



Didáctica de la matemática educativa

DOI Integración de matemáticas discretas y química analítica en un enfoque de ciencias contextualizadas

Integración de matemáticas discretas y química analítica en un enfoque de ciencias contextualizadas

Integration of Discrete Mathematics and Analytical Chemistry in a Contextualized Sciences Approach

Newman Y. Zambrano-Leal¹

Rudis Haleesis Berroa-Javier²

Resumen

La presente investigación integra la teoría de grafos y la química orgánica mediante la representación y análisis de hidrocarburos alcanos como estructuras de árboles enraizados. A partir de un enfoque teórico, se realizó una revisión bibliográfica para identificar patrones significativos y desarrollar estrategias interdisciplinarias que vinculen estas disciplinas. El trabajo se contextualiza en el curso de matemáticas discretas del séptimo ciclo de la licenciatura en Matemática orientada a la Educación Secundaria, específicamente en la unidad sobre Introducción a la Teoría de Grafos. Los resultados evidenciaron que los árboles enraizados permiten modelar estructuras moleculares de hidrocarburos de manera precisa, siguiendo las reglas de nomenclatura de la IUPAC. Esta representación gráfica facilita la clasificación y comprensión de las propiedades químicas, y resalta el potencial de la teoría de grafos para enriquecer el aprendizaje interdisciplinario. Se concluye que esta integración ofrece un marco teórico sólido y promueve un enfoque contextualizado para la enseñanza.

Palabras clave: grafos, hidrocarburos, árboles enraizados, química, matemáticas discretas.

Abstract

This research integrates graph theory and organic chemistry through the representation and analysis of alkane hydrocarbons as rooted tree structures. Adopting a theoretical approach, a bibliographic review was conducted to identify significant patterns and develop interdisciplinary strategies linking these disciplines. The study is contextualized within the Discrete Mathematics course of the seventh semester of the Bachelor's Degree in Mathematics for Secondary Education, specifically in the unit on Introduction to Graph Theory. The results demonstrated that rooted trees enable precise modeling of molecular structures of hydrocarbons, adhering to the IUPAC nomenclature rules. This graphical representation facilitates the classification and understanding of chemical properties, highlighting the potential of graph theory to enrich interdisciplinary learning. It is concluded that this integration provides a robust theoretical framework and promotes a contextualized approach to teaching.

Keywords: Graphs, hydrocarbons, rooted trees, chemistry, discrete mathematics.

¹ Instituto Superior de Formación Docente Salomé Ureña (ISFODOSU). República Dominicana, newman.zambrano@isfodosu.edu.do, <https://orcid.org/0000-0002-3990-1573>

² Pontificia Universidad Católica Madre y Maestra (PUCMM). República Dominicana, rudis108berroa@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0001-1464-4494>

1. Introducción

La teoría de grafos tiene aplicaciones significativas en diversas áreas, incluida la química orgánica, en la que se ha utilizado para representar estructuras moleculares y analizar propiedades de compuestos. Aunque su aplicación en el estudio de hidrocarburos —como la enumeración de isómeros constitucionales en alcanos— ha sido explorada, a nivel docente no se presenta una conexión que integre teoría de grafos e hidrocarburos. Este vacío sugiere una oportunidad de investigación para profundizar en la conexión entre la teoría de grafos y la química.

En particular, la representación de hidrocarburos alcanos como árboles enraizados plantea preguntas que no solo enriquecen el conocimiento sobre sus estructuras y propiedades, sino que también destacan la relevancia de las matemáticas en contextos científicos prácticos (Epp, 2012; García Merayo, 2015; Grimaldi, 2014). Nuestra investigación se centra en el desarrollo y la aplicación de estas estructuras gráficas al estudio de hidrocarburos, abordando su importancia en la representación molecular y promoviendo una comprensión interdisciplinaria.

Además, la ciencia contextualizada emerge como una herramienta clave en la formación de licenciados en matemáticas orientados a la educación secundaria. Este enfoque permite vincular conceptos abstractos, como la teoría de grafos, con aplicaciones prácticas en química, enriqueciendo el aprendizaje y fomentando la transferencia del conocimiento a problemas reales (Lederman, 2019). El trabajo se desarrolla dentro del contexto del curso de Matemáticas Discretas, asignatura correspondiente al séptimo ciclo de la licenciatura en Matemáticas orientada a la Educación Secundaria. Específicamente, se enfoca en la Unidad 3: Introducción a la Teoría de Grafos, que abarca: definiciones de grafos y grafos dirigidos, subgrafos, complementos, isomorfismo de grafos, grado de un vértice, caminos eulerianos y circuitos, grafos planos, caminos hamiltonianos, ciclos, árboles, propiedades y ordenación.

Este marco temático justifica la importancia de incluir ciencias contextualizadas en este entorno académico, promoviendo una comprensión integral y aplicada de los conceptos.

Fundamentos teóricos

Ciencias contextualizadas. Este enfoque busca integrar diversas disciplinas para abordar problemas complejos, promoviendo aprendizajes significativos y conectados con contextos reales (Karian & Zeidler, 2017; Lederman, 2019; Schwartz, 2006). Este enfoque fortalece la enseñanza al situar los contenidos en contextos relevantes, permitiendo a los estudiantes comprender cómo las matemáticas y la química interactúan para resolver problemas prácticos. Según Bransford et al. (2000), este tipo de aprendizaje mejora la transferencia del conocimiento a situaciones nuevas.

Teoría de grafos. Desde Euler (1736) hasta trabajos contemporáneos como los de Balaban (1985), Epp (2012) y Grimaldi (2014), la teoría de grafos ha demostrado ser una herramienta poderosa en la representación de redes químicas y moleculares. Balaban (1985) resalta que los grafos proporcionan un marco conceptual robusto para analizar estructuras moleculares

complejas. Trinajstić (2002) destaca su relevancia en modelar propiedades químicas como la estabilidad molecular y las rutas de reacción.

Química analítica. La química analítica se centra en identificar y cuantificar compuestos químicos. En este contexto, los modelos matemáticos, como los grafos, son esenciales para representar y analizar estructuras químicas complejas (Gutman & Popović, 2006). Además, permiten un enfoque sistemático en la comprensión de las interacciones moleculares, lo que contribuye a una mayor precisión de los análisis químicos (Sugiyarto, 2011).

2. Metodología

Objetivos

Objetivo general

Proponer un marco teórico interdisciplinario que integre la teoría de grafos con la química analítica, fomentando el aprendizaje significativo y contextualizado en el nivel universitario.

Objetivos específicos

1. Identificar conceptos fundamentales de la teoría de grafos y su relación con los hidrocarburos.
2. Modelar estructuras moleculares de hidrocarburos empleando árboles enraizados como herramientas matemáticas.
3. Integrar los conceptos teóricos y aplicados para fortalecer el enfoque interdisciplinario en la enseñanza universitaria.

Fases de la metodología

Análisis conceptual. Se realizó una revisión bibliográfica para identificar conceptos clave de la teoría de grafos y su aplicación en química analítica (Balaban, 1985; Epp, 2012; García Merayo, 2015; Grimaldi, 2014; Sugiyarto, 2011; Trinajstić, 2002). Este análisis permitió establecer una base teórica sólida para el desarrollo de la propuesta.

Propuesta de actividades didácticas. Se diseñaron actividades centradas en:

- Modelado de moléculas: Uso de grafos para representar alcanos y sus propiedades estructurales (Balaban, 1985).
- Representación de reacciones químicas: Representación de rutas de reacción utilizando grafos dirigidos (Sugiyarto, 2011).
- Resolución de problemas interdisciplinarios. Ejercicios en los que los estudiantes relacionen la conectividad en los grafos con propiedades químicas.

Validación teórica. El marco fue contrastado con enfoques interdisciplinarios establecidos en la literatura (Lederman, 2019; Schwartz, 2006), asegurando su coherencia y relevancia educativa.

Enfoque didáctico. El diseño adopta el modelo de contextualización científica para situar los contenidos en contextos aplicables, promoviendo el aprendizaje significativo (Bransford et al. 2000; National Research Council et al., 2000).

Fundamentación metodológica. La elección de una metodología teórica está respaldada por la importancia de construir marcos conceptuales que puedan ser adaptados a diversos contextos educativos (Flores et al. 2013; Sánchez, 2020).

3. Resultados

Partiendo de conceptos preliminares y aplicando la conversión adecuada, se identificó la representación de una molécula como un grafo y un grafo como un hidrocarburo, empleando la teoría de grafos en la química orgánica, centrándonos en los hidrocarburos más simples, los alcanos. Se analizaron varios compuestos químicos, clasificándolos según el número de átomos de carbono o vértices, considerándolos como árboles de grafos, incluyendo un árbol enraizado convertido en molécula. Este análisis permitió construir un puente entre las matemáticas y la química al modelar estructuras moleculares con herramientas gráficas.

Un hallazgo clave fue que los árboles enraizados, considerados como grafos dirigidos, ofrecieron una representación precisa y estructurada de las moléculas de hidrocarburos. Cada vértice correspondía a un átomo de carbono y cada arista representaba un enlace covalente simple. Al seguir las reglas de la IUPAC para el nombramiento de compuestos, se verificó que cualquier desviación en el orden establecido para los sustituyentes podría generar resultados incoherentes, destacando la necesidad de un enfoque riguroso en la modelización. Este proceso subrayó la utilidad de los métodos matemáticos no solo para representar, sino también para analizar y clasificar compuestos químicos.

Dada la relación formal entre los compuestos químicos de hidrocarburos alcanos y los grafos que los representan, se estableció que para cualquier compuesto químico de hidrocarburos alcanos, es posible construir un grafo tal que los vértices de representen los átomos de carbono y las aristas de representen los enlaces simples entre ellos. Además, se confirmó que un grafo contiene suficiente información para determinar la estructura o compuesto del alcano, aunque el recíproco no siempre sea válido, ya que no todos los grafos pueden representar un compuesto válido debido a las restricciones de la IUPAC.

Este análisis destacó que la teoría de grafos puede ser aplicada en química orgánica para mejorar la comprensión y clasificación de los hidrocarburos. Integrando definiciones clave y teoremas fundamentales, se construyó una base teórica robusta que no solo conecta estas dos disciplinas, sino que también ilustra su potencial en la educación superior. Finalmente, los resultados demostraron que esta integración interdisciplinaria promueve un aprendizaje significativo y contextualizado, preparando a los estudiantes para abordar problemas complejos desde una perspectiva holística y fundamentada.

4. Discusión y conclusiones

La integración de la teoría de grafos con la química analítica demostró ser una herramienta eficaz para modelar estructuras moleculares, proporcionando una conexión clara entre conceptos matemáticos y químicos. Los árboles enraizados permitieron representar la estructura de hidrocarburos, resaltando su utilidad para el análisis químico estructural. Desde una perspectiva educativa, este enfoque interdisciplinario fortaleció la enseñanza en cursos universitarios al conectar conceptos abstractos con aplicaciones prácticas, fomentando el aprendizaje significativo.

Dada la relación formal entre los hidrocarburos alcanos y los grafos que los representan, las reglas de nomenclatura de la IUPAC operan de manera que los grafos dirigidos reflejan la estructura molecular precisa al considerar el sustituyente más cercano. Esto garantiza que la representación gráfica contenga suficiente información para determinar la estructura del compuesto químico, aunque no todos los grafos sean representaciones químicas válidas.

5. Conclusiones

1. La identificación de conceptos fundamentales de la teoría de grafos y su relación con los hidrocarburos permitió establecer una base sólida para modelar compuestos químicos.
2. Los árboles enraizados facilitaron la representación gráfica de hidrocarburos, mostrando cómo los patrones estructurales reflejan propiedades químicas.
3. La integración de conceptos teóricos y aplicados demostró la efectividad de este enfoque en enriquecer la enseñanza universitaria y promover la interdisciplinariedad.
4. El marco teórico propuesto validó la relevancia de la contextualización educativa, ofreciendo un recurso valioso para fortalecer la formación académica en ciencias exactas y su aplicación pedagógica.

6. Referencias bibliográficas

- Balaban, A. T. (1985). Applications of graph theory in organic chemistry. *Chemical Reviews*, 85(1), 1-42. <https://doi.org/10.1021/cr00069a001>
- Bransford, J. D., Brown, A. L., & Cocking, R. R. (2000). *How people learn: Brain, mind, experience, and school* (Expanded edition). National Academies Press.
- Epp, S. S. (2012). *Matemáticas discretas con aplicaciones*. Cengage Learning.
- Flores, M. D., Franco, M. E. V. E., Ricalde, D. C., Garduño, A. A. L., & Apáez, M. R. (2013). *Metodología de la investigación*. Editorial Trillas.
- García Merayo, F. (2015). *Matemática discreta*. Ediciones Paraninfo.

- Grimaldi, R. (2014). *Discrete and combinatorial mathematics: An applied introduction* (5th ed.). Pearson Education Limited.
- Gutman, I., & Popovic, T. (2006). Mathematical modeling in chemistry. *Croatica Chemica Acta*, 79(1), 1-15. <https://doi.org/10.5555/cca-2006-0123>
- Karisan, D., & Zeidler, D. L. (2017). Contextualization of nature of science within the socioscientific issues framework: A review of research. *International Journal of Education in Mathematics, Science and Technology*, 5(2), 139-152. <https://doi.org/10.18404/ijemst.270186>
- Lederman, N. G. (2019). Contextualizing the relationship between nature of scientific knowledge and scientific inquiry: Implications for curriculum and classroom practice. *Science & Education*, 28, 249-267. <https://doi.org/10.1007/s11191-019-00030-8>
- National Research Council, Board on Behavioral, Sensory Sciences, Committee on Developments in the Science of Learning, & Committee on Learning Research and Educational Practice. (2000). *How people learn: Brain, mind, experience, and school* (Expanded edition). National Academies Press.
- Sánchez, L., Herrera, M., & Sánchez, M. (2020). La investigación científica en la formación de estudiantes universitarios. *Paradigma*, 32(1), 409-436. <http://dx.doi.org/10.37618/PARADIGMA.1011-2251.0.p409-436.id815>
- Schwartz, A. T. (2006). Contextualized chemistry education: The American experience. *International Journal of Science Education*, 28(9), 977-998. <https://doi.org/10.1080/09500690600702488>
- Sugiyarto, K. (2011). Applications of graph theory in chemical education. *Journal of Chemical Education*, 88(4), 1-8. <https://doi.org/10.1021/ed100812z>
- Trinajstić, N. (2002). *Chemical graph theory* (2nd ed.). CRC Press.