

El modelado molecular como estrategia didáctica en la enseñanza de la química

Modelagem molecular como estratégia didática no ensino de química

DOI:10.34117/bjdv9n7-027

Recebimento dos originais: 05/06/2023

Aceitação para publicação: 03/07/2023

Alberto Sergio Garay

Doctor en Ciencias Biológicas

Institución: Universidad Nacional del Litoral

Dirección: C.C. 242, Ciudad Universitaria, C.P. S3000ZAA, Santa Fe, Argentina

Correo electrónico: sergio.alberto.garay@gmail.com

Charito Ivana Vignatti

Doctor en Tecnología Química

Institución: Escuela Industrial Superior, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral

Dirección: Junín 2850, 3000, Santa Fe, Argentina

Correo electrónico: cvignatti@eis.unl.edu.ar

Carolina Guadalupe Gutierrez

Doctor en Química

Institución: Escuela Industrial Superior, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral

Dirección: Junín 2850, 3000, Santa Fe, Argentina

Correo electrónico: caroguti@santafe-conicet.gob.ar

Nubia García Marín

Máster en Psicología del Desarrollo

Institución: Ministerio de Educación

Dirección: Av. Pte. Arturo Illia 1153, CP 3000, Santa Fe, Argentina

Correo electrónico: nubia.garcia.marin@gmail.com

RESUMEN

El Modelado Molecular, a través de la interpretación de los términos físico-matemáticos de un campo de fuerza, podría ser una herramienta útil en la enseñanza de la Química. En este trabajo se presentan los resultados de una actividad de articulación entre docentes y alumnos de la Escuela Industrial Superior y docentes especialistas en Modelado Molecular de la Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, ambas instituciones pertenecientes a la Universidad Nacional del Litoral (Santa Fe, Argentina).

Palabras claves: modelado molecular, software avogadro, campo de fuerza.

RESUMO

A Modelagem Molecular, por meio da interpretação dos termos físico-matemáticos de um campo de força, pode ser uma ferramenta útil no ensino de Química. Este artigo apresenta os resultados de uma atividade de articulação entre professores e alunos da

Escuela Industrial Superior e professores especializados em Modelagem Molecular da Faculdade de Bioquímica e Ciências Biológicas, ambas as instituições pertencentes à Universidad Nacional del Litoral (Santa Fé, Argentina).

Palavras-chave: modelagem molecular, software avogadro, campo de força.

1 INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

La enseñanza de la Química en el nivel medio es una tarea que conlleva cierto grado de dificultad dado que requiere que los alumnos puedan explicar el comportamiento macroscópico de la materia a partir de modelos microscópicos y utilizando un formalismo simbólico propio. En general, estos modelos fueron propuestos con base en experiencias, en el manejo de evidencia y con restricciones que sólo los científicos, embebidos en su labor creativa, comprenden. Por el contrario, la educación en el aula se focaliza casi exclusivamente en el producto final de la ciencia. Esto hace que los alumnos lleguen a comprensiones superficiales y frágiles, y, a veces equivocadas, de las ideas científicas. Asimismo, se ha introducido un cuarto nivel para representar a la Química, el nivel procesal(Dori and Hameiri, 2003).¹ El estudiante alcanza este cuarto nivel cuando es capaz de describir un fenómeno fisicoquímico (cambio de estado, reacción química, etc.) en términos de los niveles o representaciones más básicas de la Química (macroscópica, microscópica y/o simbólica), esta transferencia desde un nivel a otro permitiría comprender los fenómenos más fácilmente. El desafío, entonces, es incentivar a que los alumnos logren adquirir esta capacidad. En el mismo sentido es importante enfatizar la necesidad de formar a los docentes en el manejo del software, junto con los conceptos, la terminología y ejemplos apropiados para la enseñanza del tema, como ya fué enfatizado en el trabajo de Maija Akselaa y Jan Lundell(Aksela and Lundell, 2008).

Es por esto que surge la necesidad de desarrollar estrategias de enseñanza que faciliten a los alumnos la significación de los contenidos vinculados a la Química. En este marco, la articulación entre la escuela secundaria y la universidad resultan esenciales ya que se ha demostrado que el trabajo en conjunto de docentes y alumnos de ambos niveles educativos, genera un ámbito de intercambio, aprendizaje colaborativo y capacitación que contribuye a comprender mejor las características y problemáticas de la población joven(Córdoba et al., 2010).

En este contexto, se propuso llevar adelante una actividad de articulación entre docentes y alumnos de la Escuela Industrial Superior (EIS), anexa a la Facultad de

Ingeniería Química (FIQ) de la Universidad Nacional del Litoral (UNL), y docentes de la Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas (FBCB, UNL) con los siguientes objetivos:

- Implementar una estrategia de enseñanza basada en el Modelado Molecular, usando el software Avogadro (disponible en las netbooks del plan Conectar Igualdad) como herramienta, para la predicción o justificación de propiedades fisicoquímicas a partir de la comprensión de las interacciones enlazantes y no enlazantes presentes en un conjunto de moléculas.
- Vincular la energía de un sistema molecular con su estructura y organización microscópica empleando un campo de fuerza.

2 ANTECEDENTES Y FUNDAMENTOS

Existe evidencia sobre experiencias exitosas en la enseñanza de la Química, cuando se empleó el Modelado Molecular como herramienta, tanto en alumnos de nivel medio (Dori and Kaberman, 2012) como de nivel superior (Jones, 2001). Cuando se utiliza el Modelado Molecular, y, en particular la Mecánica Molecular, es necesario familiarizarse con la expresión del campo de fuerza que se haya seleccionado para trabajar. El campo de fuerza se emplea para describir la energía de una molécula o conjunto de átomos, conociendo sus posiciones en el espacio. Para esto, se recurre a expresiones algebraicas sencillas, que describen las interacciones entre los átomos separándolas en: enlazantes (átomos directamente unidos) y no enlazantes (entre átomos no unidos en forma directa). Mediante estas aproximaciones es posible, con un software apropiado y un computador con mínimos recursos, explorar la conformación y energía de una gran variedad de compuestos químicos, evaluar su estabilidad y comprender su estado físico a temperatura ambiente.

3 DESCRIPCIÓN DE LA PROPUESTA EDUCATIVA

Esta propuesta educativa tuvo como destinatarios a dos grupos de quinto año de la especialidad Química de la EIS (33 alumnos). Se implementó durante el primer semestre del año 2017 como parte de las actividades de la asignatura Química Orgánica. La misma se llevó adelante usando la modalidad de talleres, donde los alumnos disponían de guías teórico-prácticas relacionadas con los contenidos a desarrollar, según se detalla en la Tabla 1. Previamente, se exploraron los conocimientos previos de los estudiantes mediante una evaluación diagnóstica donde se valoraron los conceptos: energía potencial, energía potencial elástica, energía cinética, energía mecánica total, interpretación de

gráficas e identificación de interacciones intermoleculares; conceptos esenciales para introducir la idea campo de fuerza (MMFF94)(Halgren, 2002).

Previo a los talleres con los alumnos, se realizaron 3 talleres con los docentes que participaron de la propuesta. Se construyó una guía para el uso del programa Avogadro, adaptada a los conocimientos computacionales de los docentes, además de otra donde se plantearon problemas relacionados al uso del programa y otros relacionados a aprender a enseñar usando esta herramienta en la resolución de sistema químico.

En cada taller, uno de los integrantes del equipo docente expuso los conceptos teóricos y presentó las actividades a desarrollar, mientras que el resto de los docentes realizaba el seguimiento de los alumnos y contestaba las dudas que se presentaban. Las guías teórico-prácticas empleadas en los talleres se redactaron usando un lenguaje sencillo y adaptado a los conocimientos previos de los estudiantes. En las mismas, el fenómeno analizado y el modelo físico utilizado por el campo de fuerza para describirlo se vincularon mediante gráficos. La Figura 1 muestra dos de los gráficos presentados en los talleres.

Por otra parte, además de las actividades contempladas en cada taller, se diseñaron actividades para afianzar los nuevos conocimientos y se pusieron a disposición de los alumnos en el entorno virtual de la UNL (Moodle) (<http://entornovirtual.unl.edu.ar/course/view.php?id=1510>). Esta modalidad de trabajo permitió realizar el seguimiento de cada alumno en forma individual.

Para determinar el impacto de esta estrategia educativa, se realizaron dos evaluaciones: una orientada a valorar si los alumnos lograron relacionar el tema Mecánica Molecular con sus conocimientos de Química (evaluación general), y otra, más específica y vinculada a la comprensión de los conceptos relacionados al tema campo de fuerza, a través de una entrevista semi-estructurada.

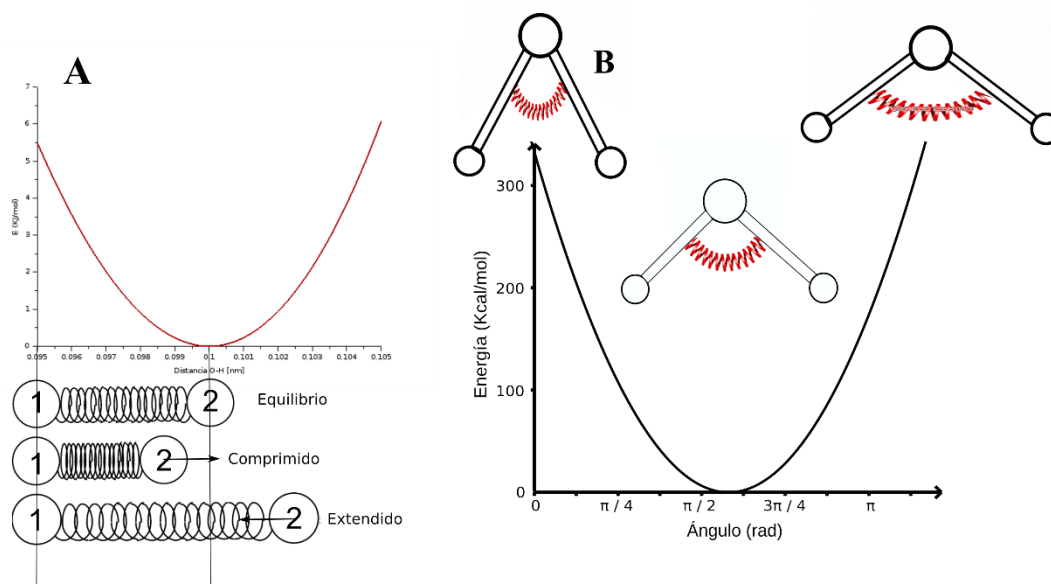
Tabla 1. Objetivos, conceptos a desarrollar y herramientas empleadas en cada taller.

Taller N°	Objetivo	Tema general	Conceptos desarrollados	Herramientas
1	Introducir nuevos conocimientos	Uso de Avogadro	Herramientas de Avogadro (rotación de la visualización, rotación de la molécula, alineamiento, construcción de moléculas, rotación de enlace, medición de longitud de enlace, de ángulo de enlace y de ángulo diedro, rotación automática y minimización de la energía potencial total molecular).	Netbooks Avogadro Guías teórico-prácticas

2		Campo de fuerza I (interacciones enlazantes)	Energía. Energía potencial asociada al estiramiento o compresión de un enlace, a la modificación de un ángulo de enlace y a la rotación de un ángulo diedro. Energía potencial total de una molécula.	
3		Campo de fuerza II (interacciones no enlazantes)	Interacción carga-carga. Interacción tipo Van der Waals. Minimización de la energía potencial.	
4	Aplicar conceptos introducidos en los talleres anteriores	Hidrocarburos saturados lineales y cíclicos	Alcanos y cicloalcanos. Puntos de ebullición. Calor de combustión. Isomería conformacional.	Netbooks Avogadro Guías teórico-prácticas

Fuente: Autores

Figura 1.A. Energía potencial de estiramiento en función del estiramiento del enlace O-H en la molécula de agua. B. Energía asociada a la deformación angular.



Fuente: Autores

4 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1 EVALUACIÓN DE CONOCIMIENTOS PREVIOS

Los resultados de la evaluación de conocimientos requeridos (Tabla 2), realizada antes de la implementación de esta propuesta mostraron falencias en el manejo de conceptos básicos que los alumnos deberían haber aprendido en años anteriores. De igual manera, hubo inconvenientes para interpretar correctamente las interacciones intermoleculares aplicadas a moléculas concretas, a pesar de poder reconocerlas y definirlas de manera abstracta.

En base a los mismos, se decidió agregar un taller adicional a los planificados (Taller N° 0), en el cual se efectuó un repaso de los conceptos: energía mecánica total,

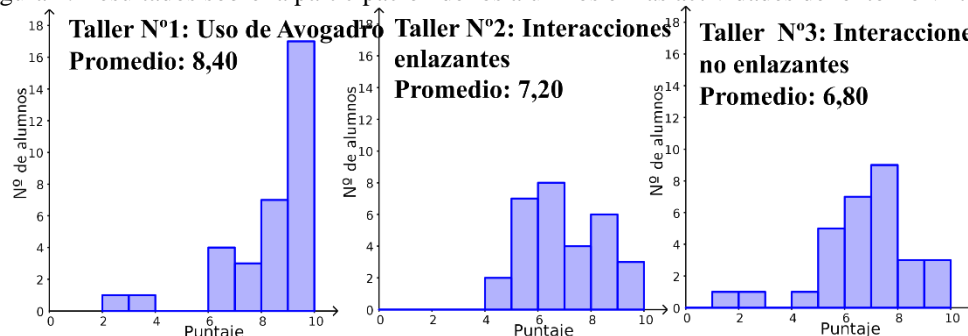
energía potencial, energía cinética, ley de Hooke e interacciones de Coulomb y de Van der Waals.

Tabla 2. Resultados de la evaluación diagnóstica.

Energía mecánica total	61 % asoció correctamente la energía potencial gravitatoria con la altura del objeto.
	76 % asoció correctamente la energía potencial elástica con la compresión del resorte.
	58 % asoció correctamente la energía mecánica total como la suma de las energías potenciales y cinética.
	70 % asoció correctamente la energía cinética con la velocidad del objeto.
Energía potencial elástica	92 % asoció correctamente la existencia de una proporcionalidad directa entre la extensión del resorte y la fuerza elástica.
	76 % interpretó correctamente el gráfico energía vs. distancia de estiramiento-compresión del resorte.
	44 % tuvo dificultad para identificar que, en reposo, la fuerza y la energía son nulas.
Interacciones de Coulomb	100 % reconoció que dos cargas de igual signo se repelen y de distinto signo se atraen.
	48 % contó correctamente el número de interacciones entre 2 moléculas de agua, cada una con sus respectivas cargas parciales.
Interacciones de Van der Waals	64 % reconoció que las interacciones ion-dipolo son más fuertes que las dipolo-dipolo.
	61 % reconoció que las interacciones dipolo-dipolo instantáneo son más débiles que las dipolo-dipolo.
	48 % asoció el estado físico del helio líquido con otra interacción que no es dipolo instantáneo-dipolo instantáneo inducido.
	30 % asoció el estado líquido del HCl a la presencia de puentes de H como dominantes.
	58 % reconoció que el estado sólido del NaCl no se debe a interacciones ion-dipolo.

Fuente: Autores

Figura 2. Resultados sobre la participación de los alumnos en las actividades del entorno virtual.



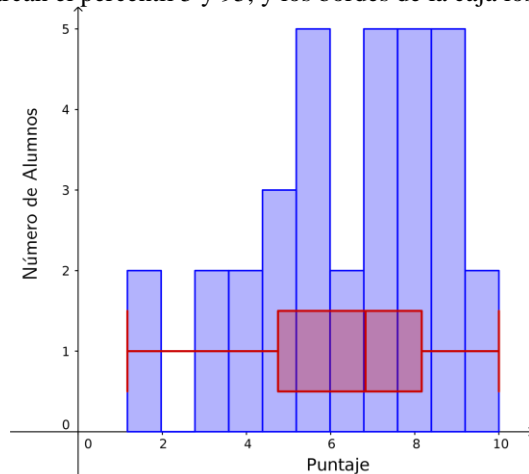
Fuente: Autores

4.2 PARTICIPACIÓN EN EL ENTORNO VIRTUAL

Respecto a la participación del estudiantado en las actividades propuestas en el entorno virtual, relacionadas con los conceptos desarrollados en los talleres 1, 2 y 3, los resultados mostraron que a medida que se avanzaba en la complejidad de los contenidos abordados y se requería una mayor integración de los mismos, la participación de los

alumnos y las calificaciones obtenidas disminuían. Es importante destacar que los alumnos recibieron colaboración del plantel docente en la realización de estos ejercicios, puesto que fueron pensados como una instancia más de aprendizaje y no de evaluación propiamente dicha.

Figura 3. Resultados de la evaluación general. El gráfico de barras muestra la cantidad de alumnos que alcanzaron cada intervalo de notas. El rectángulo rojo central representa un gráfico de caja y bigotes, donde las líneas marcan el percentil 5 y 95, y los bordes de la caja los percentiles 25 y 75.



Fuente: Autores

Tabla 3. Resultados de la evaluación general.

Utilización Avogadro	99 % fue capaz de medir longitudes de enlaces y ángulos de enlace. 82 % puede construir moléculas.
Estructura de Lewis	60 % pudo construir estructuras de Lewis.
Dipolo molecular	74 % identificó el dipolo en una molécula (H ₂ O, CS ₂ , CH ₄).
Energía potencial asociada al ángulo de enlace	30 % identificó que la energía potencial asociada al ángulo de enlace es la principal responsable de la forma curvada de la molécula de SO ₂ .
Interacciones intermoleculares	69 % respondió correctamente al respecto.

Fuente: Autores

4.3 EVALUACIÓN GENERAL

Las evaluaciones realizadas al finalizar las actividades de articulación mostraron que los alumnos pudieron utilizar el software Avogadro aceptablemente pero presentaron dificultades en: la construcción e interpretación de estructuras de Lewis, la identificación del momento dipolar de una molécula y de las interacciones moleculares y en el reconocimiento del potencial angular como el principal descriptor del cambio de energía potencial molecular.

4.4 ENTREVISTAS SEMIESTRUCTURADAS

Las respuestas a las consignas de la evaluación específica sobre Mecánica Molecular y campo de fuerza, revelaron grandes dificultades para justificar una respuesta y para darle significado fisicoquímico a expresiones matemáticas, el estudio memorístico de los contenidos y la confusión de interacciones de Van der Waals con interacciones de Coulomb. Estos resultados son llamativos puesto que se permitió el uso de apuntes para realizar esta actividad. Específicamente:

- 67 % reconoció todas las interacciones enlazantes de una molécula de agua.
- 93 % logró identificar las interacciones no enlazantes entre dos moléculas de agua. La mayoría aplicó la regla $(n \times n)$, donde n es el número de átomos de cada molécula, pero, al ser interrogados, no reconocen el tipo de interacción.
- 96 % no logró justificar cuando la fuerza entre dos átomos de H de dos moléculas de H₂O era repulsiva o atractiva teniendo disponible la gráfica que representa la función tipo Lennard-Jones que describe el cambio de energía a medida que cambia la distancia entre el par de H.
- 81 % reconoció las interacciones de Coulomb entre los átomos de agua; sin embargo, no logró diferenciarlas de las interacciones de Van der Waals.
- 60 % no justificó apropiadamente el cambio de energía potencial angular entre la molécula de propano y ciclopropano.

Por otra parte, los estudiantes valoraron positivamente el contenido teórico de los apuntes, al igual que las actividades propuestas en el entorno virtual y en los talleres. Finalmente, los estudiantes reclamaron justificadamente la falta de estabilidad del software Avogadro.

En resumen, los alumnos mostraron dificultades en la asociación entre un dado fenómeno y el modelo empleado para su interpretación, con un fuerte rechazo por la base matemática subyacente. Ver Beek y Louters (Ver Beek and Louters, 1991) han señalado que la habilidad matemática es primordial para que los estudiantes alcancen el éxito en el aprendizaje de la Química. Asimismo, afirman que los estudiantes que carecen o fallan en la aplicación de las habilidades matemáticas a un problema específico usualmente presentan dificultades en todos los aspectos vinculados a la Química.

Los resultados indican que los alumnos se sienten atraídos por el manejo del software, para la construcción y análisis de moléculas. Desde lo actitudinal, un 15% de

los estudiantes se mostraron reacios a incorporar nuevos conceptos y vincularlos con los que ya habían adquirido. Probablemente, esto último se haya visto favorecido por el hecho que los talleres se realizaron en presencia de los 33 alumnos, siendo que acostumbran trabajar en grupos más reducidos.

5 CONCLUSIONES

A pesar de los inconvenientes observados, esta iniciativa puede mejorarse y, para ello, se debe enfatizar en ciertos conceptos (enlace covalente e interacciones no enlazantes) tendientes a introducir la Mecánica Molecular como herramienta en la enseñanza de la Química. Si bien los resultados no fueron los esperados, la mayoría de los estudiantes (85 %) se interesó en la propuesta, por lo que si se realizan las modificaciones mencionadas previamente y se incrementa su implementación a todo el ciclo lectivo, y no solo al primer semestre, posiblemente se alcancen mejores logros. Por otra parte, acceder a los conocimientos previos de los estudiantes utilizando un cuestionario permitió evidenciar dificultades en el aprendizaje de conceptos básicos y disponer de un tiempo adicional para desarrollarlos, de tal manera que se facilitara su comprensión al considerarse una barrera para interpretar los temas planteados. Se infiere que los conocimientos previos de los estudiantes son un punto de partida importante de reconocer en el proceso de enseñanza – aprendizaje de la química.

Asimismo, los aspectos más novedosos de este trabajo fueron:

- Anteriormente, en el área Química de la EIS no se habían desarrollado actividades de articulación con el nivel superior que contribuyan a optimizar los recursos disponibles (software gratuito disponible en las netbooks de los estudiantes y docentes).
- La planificación de actividades, el desarrollo de los talleres, el análisis de los resultados contribuyeron significativamente a la capacitación docente, junto con los talleres realizados a priori a la experiencia con los alumnos.

REFERENCIAS

Aksela, M., Lundell, J., 2008. Computer-based molecular modelling: Finnish school teachers' experiences and views. *Chem. Educ. Res. Pract.* 9, 301–308. <https://doi.org/10.1039/B818464J>

Córdoba, M., Grinsztajn, F., Miguez, M., 2010. Articulación entre educación secundaria y universitaria en la Facultad de Ciencias Veterinarias UBA para contribuir con la inclusión social, educativa, laboral y ciudadana. Presented at the X Coloquio Internacional sobre Gestión Universitaria en América del Sur, Mar del Plata, Argentina.

Dori, Y.J., Hameiri, M., 2003. Multidimensional analysis system for quantitative chemistry problems: Symbol, macro, micro, and process aspects. *J. Res. Sci. Teach.* 40, 278–302. <https://doi.org/10.1002/tea.10077>

Dori, Y.J., Kaberman, Z., 2012. Assessing high school chemistry students' modeling sub-skills in a computerized molecular modeling learning environment. *Instr. Sci.* 40, 69–91. <https://doi.org/10.1007/s11251-011-9172-7>

Halgren, T.A., 2002. Force Fields: MMFF94. *Encycl. Comput. Chem.* <https://doi.org/10.1002/0470845015.CMA012M>

Jones, M.B., 2001. Molecular Modeling in the Undergraduate Chemistry Curriculum. *ACS Publ.* 867–868. <https://doi.org/10.1021/ed078p867>

Ver Beek, K., Louters, L., 1991. Chemical language skills: Investigating the deficit. *J. Chem. Educ.* 68, 389. <https://doi.org/10.1021/ed068p389>