

“ChemDraw” para alumnos de iniciación a la Química Orgánica: Una útil herramienta docente para el dibujo de moléculas, nomenclatura, cálculo de fórmulas, simulación de espectros y el diseño espacial de estructuras tridimensionales (Química IV, 1º Grado en Química).

Francisco José Pulido Pelaz, Asunción Barbero Pérez

Departamento de Química Orgánica, Área de Química Orgánica, Facultad de Ciencias,

Email: pulido@qo.uva.es; barbero@qo.uva.es

RESUMEN: Se ha presentado a los alumnos de la asignatura de Química IV una novedosa herramienta de trabajo en Química: el programa informático “ChemDraw”, desarrollado por CambridgeSoft, y diseñado especialmente para el estudio tridimensional de moléculas orgánicas. Esta útil innovación docente, no empleada hasta la fecha en 1º de Grado, permite el dibujo en 3D de estructuras complejas, articulado a través de una serie de plantillas de fácil uso y altamente pedagógicas, que facilitan la visión espacial de las moléculas orgánicas. La aplicación se ha llevado a cabo en pequeños grupos de trabajo, en aulas de informática equipadas con el programa y con acceso individual a cada terminal, de manera que permita la resolución individual de los ejemplos planteados y el auto-aprendizaje del alumno, tutorizado en todo momento por el profesor a través de la pantalla del aula.

PALABRAS CLAVE: proyecto, innovación, docente, química orgánica, herramientas docentes, evaluación continua, tutorías, auto-aprendizaje, ChemDraw.

INTRODUCCIÓN

Uno de los muchos problemas que se achacan al bajo rendimiento académico en la universidad española es la escasa motivación que muestra el alumno por el aprendizaje clásico que supone el binomio tradicional: lección magistral/seminario práctico. A esto hay que unir la difícil tarea de convencer al alumno de la importancia de llevar los conocimientos al día en el proceso de maduración y consolidación del aprendizaje.

Las metodologías docentes actuales y los procesos de innovación nacidos en el marco del EEES pretenden de algún modo romper esa dinámica perversa. De entre las múltiples vías exploradas, la utilización periódica de **herramientas** sencillas, pero altamente pedagógicas, que mantengan alerta al alumno y le permitan auto-evaluarse frente al proceso continuo de aprendizaje, parece un recurso eficaz y muy recomendable.

Con esta idea, dentro del marco de los proyectos de innovación docente promovidos por el Vicerrectorado de Extensión Universitaria, el grupo de innovación docente en Química (GIDeQ), constituido por veinte profesores del grado y coordinado por el Prof. E. Barrado, ha tenido la iniciativa de difundir, en entorno Moodle, diversos materiales para las distintas asignaturas del grado, que supongan nuevas herramientas docentes que faciliten la capacidad de auto-aprendizaje y autonomía del alumno, y faciliten al profesor la evaluación continua del alumno.

En particular, en esta memoria se describen las actuaciones llevadas a cabo en la asignatura Química IV “Introducción a la Química Orgánica: Conceptos y Modelos”.

OBJETIVOS

La Química Orgánica es una ciencia muy conceptual, donde a menudo no son necesarias altas dotes memorísticas ni grandes desarrollos matemáticos pero si mucha claridad de conceptos. Su carácter tridimensional requiere una buena capacidad de abstracción y alta memoria espacial. Aunque los principios generales pueden estudiarse en los libros o verse en clases teóricas, en la práctica, es la resolución de problemas y cuestiones la que proporciona la habilidad y desarrolla las competencias necesarias para el éxito académico del estudiante de química orgánica. La visión espacial de las moléculas orgánicas no siempre es fácil, y depende mucho de habilidad personal del alumno para imaginar estructuras en 3D. Por otro lado la representación en papel, o el dibujo en perspectiva de un compuesto orgánico, con frecuencia, resulta una ardua tarea para aquellos alumnos con menor capacidad de visión espacial. Así pues, disponer de un buen programa de diseño molecular espacial que permita dibujar y editar moléculas orgánicas en el espacio puede ser una herramienta extraordinariamente útil para medir la destreza del alumno. Entre estos programas informáticos destaca por su calidad y difusión el programa informático denominado “ChemDraw” desarrollado por la compañía CambridgeSoft en 1985 y posteriormente a partir de 2011 por PerkinElmer, marca que amplió sus posibilidades. Se trata de un potente y versátil editor gráfico de moléculas diseñado para crear y modificar estructuras químicas, que facilita la visión espacial y resulta idóneo para el

entrenamiento del alumno en la construcción de modelos moleculares.

El problema no es baladí, ya que de la correcta representación espacial de las moléculas se deriva buena parte del éxito de la asignatura. Por ejemplo, la correlación entre estructura espacial y reactividad permite predecir el comportamiento químico de un compuesto en función de su geometría espacial, por lo que una errónea asignación estructural conlleva un resultado incorrecto.

El programa ChemDraw es ampliamente utilizado tanto en el mundo académico como en labores de investigación.

La asignatura de Química IV esta constituida por ocho capítulos incluida la introducción:

Tema 1: Introducción

Tema 2: El enlace en Química Orgánica:

Delocalización Electrónica

Tema 3: Estructuras Fundamentales Saturadas:

Conformación

Tema 4: Estructuras Fundamentales Insaturadas:

Aromaticidad

Tema 5: Grupos Funcionales con Enlaces Sencillos

Tema 6: Grupos Funcionales con Enlaces Múltiples

Tema 7: Sistemas Multifuncionales

Tema 8: Estereoisomería Óptica y Quiralidad

De los temas indicados más de la mitad necesitan un buen dominio de la formulación espacial y una aceptable habilidad para la representación tridimensional de las moléculas, de ahí la importancia de esta nueva herramienta informática.

METODO, APLICACIÓN y RESULTADOS

El programa ChemDraw de modelización molecular se articula a través de una serie de plantillas de dibujo que incluyen, entre otros, distintos tipos de enlace, flechas, orbitales, cargas, esferas, recuadros, paréntesis, símbolos químicos, cadenas abiertas, ciclos diversos, sistema biciclos, unidades aromáticas, conformaciones, proyecciones de Newman y Fischer, estereocentros, plantillas especiales para bioquímica y mucho más. Su uso es muy simple y en pocos momentos la molécula dibujada adquiere la perspectiva tridimensional deseada. Una vez construida la molécula y representada en el espacio, esta puede moverse, trasladarse, rotarse, agrandarse, alargarse y deformarse a voluntad. Acompaña al programa un editor de texto que permite incluir los símbolos atómicos en la estructura, así como escribir fórmulas, notas y etiquetas. El editor permite añadir, corregir o eliminar cualquiera unidad con facilidad. Además el uso del color facilita la diferenciación de centros atómicos o señala aspectos singulares que deseen remarcar. Las moléculas editadas pueden

representarse bien como estructuras bidimensionales o tridimensionales, siendo convertibles unas en otras.

Además, a partir de la estructura, ChemDraw puede llevar a cabo :

- a) Cálculo de la Fórmula Molecular
- b) Análisis Químico
- c) Mostrar propiedades químicas
- d) Conversión de fórmula a nombre IUPAC
- e) Conversión de nombre a fórmula estructural
- f) Simulación de espectro de RMN
- g) Predicción de desplazamientos químicos (δ)
- h) Simulación de espectro de E.M.
- i) Cálculo de configuraciones absolutas R/S

Y otras muchas más herramientas útiles, como el chequeo de la estructura para comprobar que esta es correcta, o el volteo espacial de 180° que invierte la direccionalidad de los enlaces manteniendo la configuración R o S de los centros quirales.

Un amplio espectro de flechas de equilibrio químico, conformacional o de resonancia, permite la representación de esquemas de reacción, estados de transición, intermedios de reacción o coordenadas de reacción; teniendo así un rápido, fiable y exacto acceso a todos los modos de representación bi- y tridimensional más habituales en Química Orgánica. Prácticamente cualquier tipo de dibujo o representación contenida en los libros de texto más empleados puede realizarse usando la aplicación ChemDraw. Actualmente es el editor más universal.

La aplicación práctica del programa se ha llevado a cabo en grupos pequeños de unos 20 alumnos (capacidad del aula), en aulas informatizadas, sobre la base de un ordenador por alumno. El profesor dispone de un terminal propio conectado a proyector y pantalla desde donde plantea, guía, tutoriza y resuelve los ejemplos elegidos. La metodología empleada consiste, de modo general, en:

A) Presentación del programa, posibilidades de éste y herramientas principales.

B) Ejemplos de moléculas orgánicas (acíclicas y cíclicas). Representación en Fórmula Molecular, Fórmula desarrollada, Fórmula simplificada y Fórmula Espacial.

C) Ejemplo de representación de conformaciones. Conversión de conformación a Proyección de Newman y viceversa.

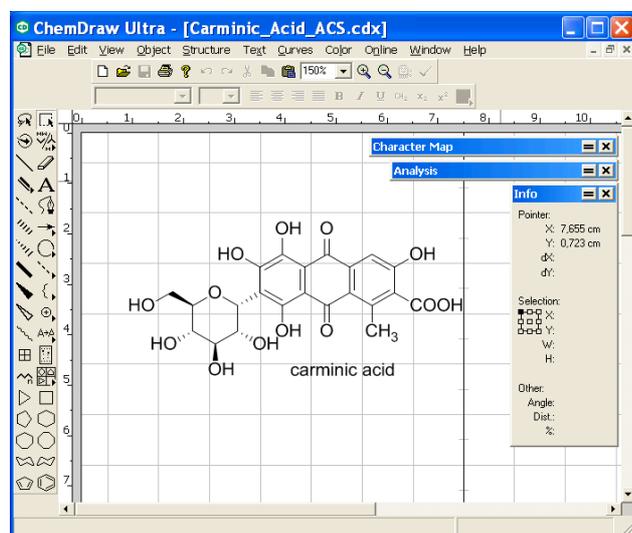
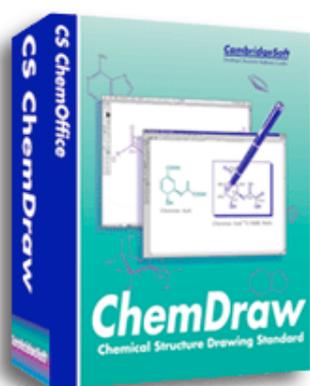
D) Compuestos quirales: representación espacial, asignación de configuraciones R/S, representación en Proyecciones de Fischer.

E) Otros herramientas

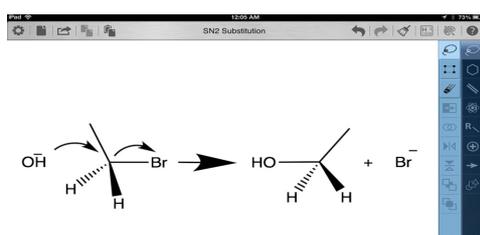
Después de la presentación del programa, la clase se inicia con un ejemplo práctico que elige el profesor

y resuelve en presencia de los asistentes. A continuación se presentan ejemplos generales de los apartados **a-d** que van resolviendo los alumnos de forma individual con la guía del profesor, vía pantalla. El sistema de trabajo en ChemDraw se autoalimenta mediante la secuencia: ejemplo-resolución individual-corrección-resultado final, de manera que el alumno adquiera la autonomía necesaria en la resolución de ejemplos prácticos.

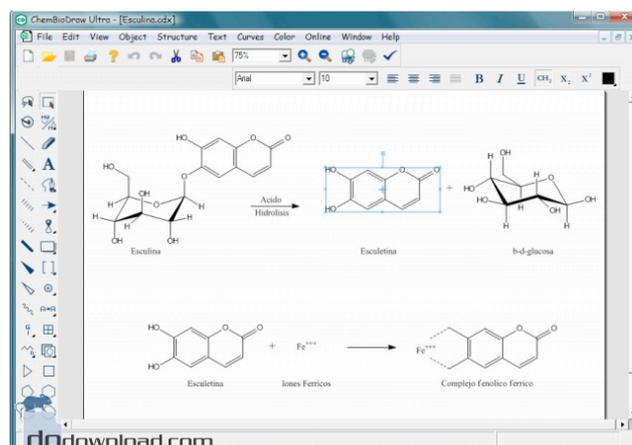
A continuación se muestran algunas de las pantallas, aplicaciones y subprogramas a través de las que se mueven en ChemDraw.



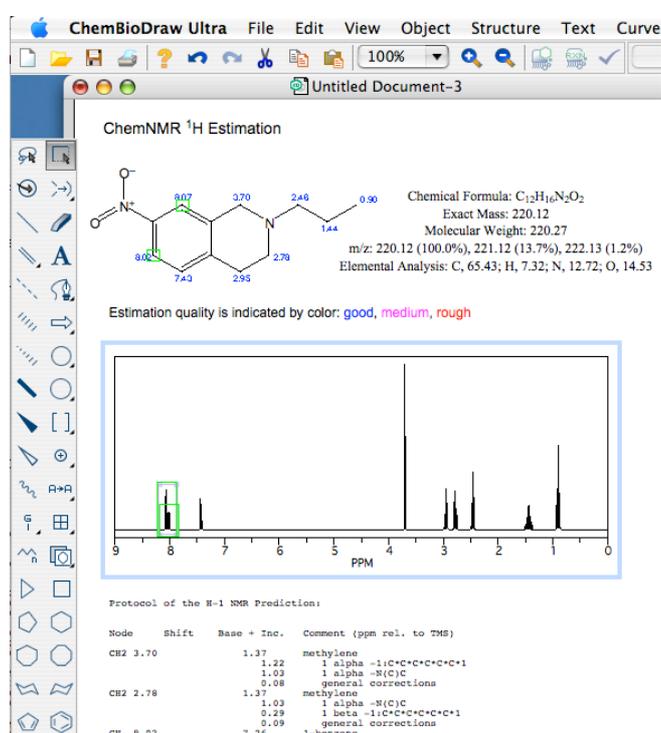
Plantilla de dibujo: A. Carmínico (fórmula estructural)



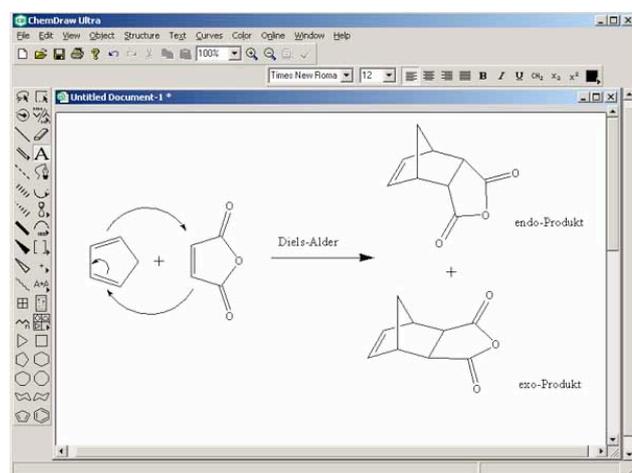
Mecanismos de Reacción



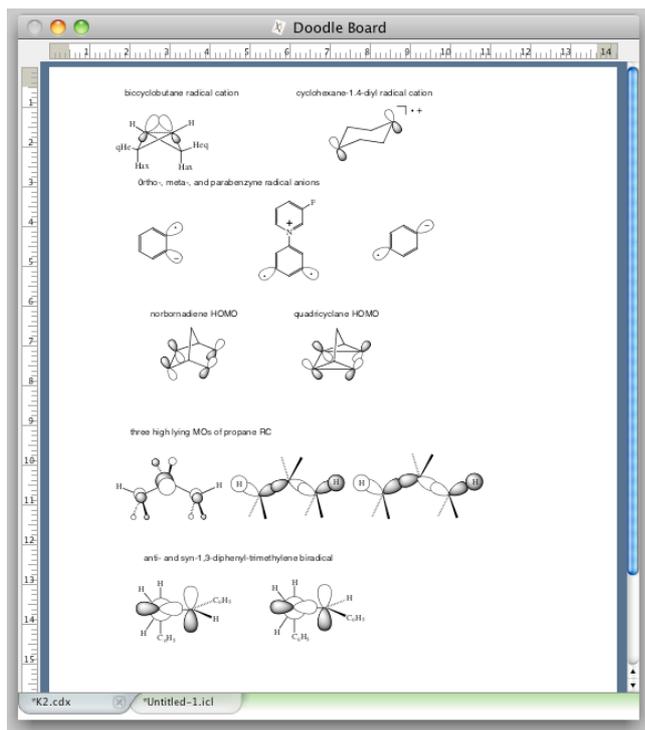
Plantilla de dibujo: Conformaciones



Simulación de espectros (RMN) y desplazamiento químico (δ)



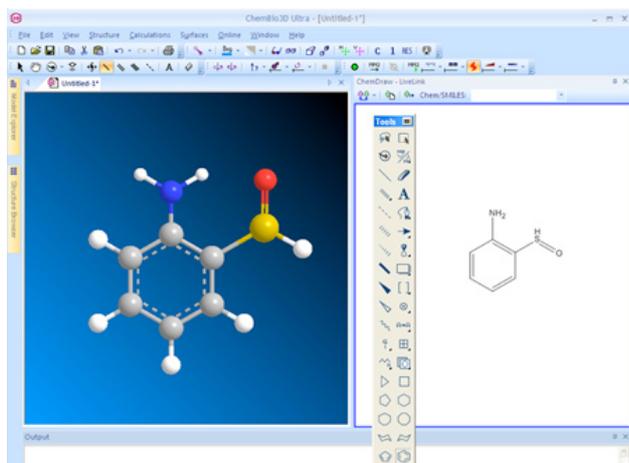
Esquema de reacción (Diels-Alder)



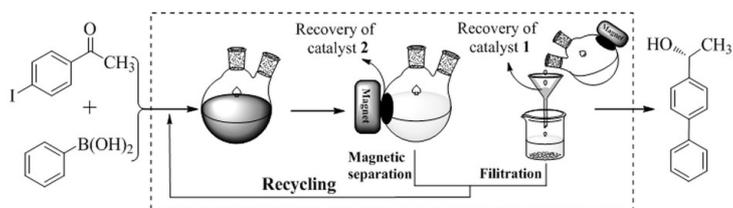
Tipos de Orbitales y geometría orbital

CONCLUSIONES

El empleo de programas de dibujo del tipo del ChemDraw como herramientas de trabajo en la modelización molecular de compuestos orgánicos puede ser una excelente innovación educativa en la enseñanza de la química orgánica a edades tempranas, en los primeros cursos de la carrera. Facilita la comprensión de la asignatura, mejora la capacidad visual del alumno frente a moléculas tridimensionales complejas y permite alcanzar una buena destreza en la representación espacial de las moléculas mediante procedimientos sencillos de auto-aprendizaje que mejorarán su rendimiento académico.



Grupos Funcionales



Procedimientos de laboratorio