

El Empleo de Recursos Informáticos como Complemento en la Enseñanza de la Química

*M. J. Lavecchia⁽¹⁾; V. Ferraresi Curotto^(1,2); C. A. Franca⁽¹⁾;
R. Pis Diez⁽¹⁾*

1: Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR), UNLP. 47 y 115 (1900), La Plata.

2: Cát. de Didáctica Especial de la Química, FCEyN, UNCa. Av. Belgrano 300 (4700),
San Fernando del Valle de Catamarca. lavecchia@gmail.com

Resumen

La amplia divulgación de las computadoras personales facilita el acceso de amplios sectores de la población a tener esta tecnología al alcance de la mano. En los últimos años, con la creación y extensión masiva de la red de redes, o Internet, ha permitido una extensa difusión del conocimiento y el consecuente desarrollo de aplicaciones informáticas de creación individual o grupal. Muchas de estas aplicaciones son gratuitas, al menos para instituciones educativas, y otro tanto de código abierto, lo que invita a entender su funcionamiento y aventurarse a producir modificaciones.

Como la Química es una ciencia que se puede entender a dos niveles, el macroscópico y el molecular, su enseñanza debe apuntar a ambos para lograr una comprensión general. El nivel molecular frecuentemente causa mayores problemas a los estudiantes, razón por la cuál debe ser fortalecido.

En este trabajo pretendemos acercar las posibilidades que ofrecen los recursos informáticos como apoyo a la enseñanza de la Química, haciendo hincapié en el nivel molecular. Se esboza una clasificación general de las aplicaciones informáticas que sirven de

apoyo a la enseñanza de la Química, según su función, en Visualizadores, Editores, Simulación, Cálculos de Química Computacional, Recursos Específicos Educativos y Programación. También se mencionan algunos ejemplos gratuitos de cada tipo, sin pretender que esto impida una búsqueda personalizada de otras aplicaciones disponibles.

Palabras clave: Química; Enseñanza; Recursos informáticos; Aplicaciones; Clasificación.

Use of Informatic Resources as a Complement in the Teaching of Chemistry

Abstract

The increasingly widespread use of personal computers provides access to broad segments of the population to have technology at their fingertips. In recent years, the extensive use of the Internet has allowed an important dissemination of knowledge and the consequent development of new, useful software. Many of those applications are free, at least for educational institutions, and likewise open source, a feature that invites to understand how programs work and, eventually, to introduce improvements which become available to the rest of the community.

As Chemistry is a science that can be understood both at a macroscopic and at a molecular level, an efficient teaching should aim to achieve a general understanding at the two levels. The molecular level of understanding often causes major problems for students and should be strengthened.

In this work it is tried to bring the potential of computing resources to support the teaching of Chemistry, with emphasis on the molecular level of understanding. A general classification of computer applications that can be used to improve Chemistry teaching is provided. Applications are as varied as Molecular Viewers, Molecular Editors, Simulation Packages, Computational Chemistry Calculations, Specific Educational Resources and Programming Tools. Some free examples of every category are

given, without preventing the future customer for searching for other available applications.

Key words: Chemistry; Education; Information resources; Software; Classification.

Introducción

Se han producido grandes cambios en el empleo de la informática aplicada en la enseñanza de la Química, teniendo en cuenta los inicios, allá por el 1978, durante la *Fifth Biennial Conference on Chemical Education*, donde Bill Butler y Scott Owen exhibieron un Commodore PET y con un Apple II (dos microcomputadoras lanzadas en 1977), con las que realizaron diversas demostraciones de programas para la enseñanza de la química [1].

Con la amplia divulgación de las computadoras personales, cada vez es más común tener esta tecnología al alcance de la mano. Es muy frecuente, y cada vez más, que en el ámbito de una escuela o sobre todo de una universidad se disponga de un gabinete informático, a los cuales, en general, no se les extrae el máximo potencial que pueden brindar.

Además, en los últimos años, con la creación y extensión masiva de la red de redes, o Internet, ha permitido una amplia difusión del conocimiento y el consecuente desarrollo de aplicaciones informáticas de creación individual o grupal. Muchas de estas aplicaciones son gratuitas, al menos para instituciones educativas, y otro tanto de código abierto (disponible su código fuente), lo que invita a entender su funcionamiento y aventurarse a producir modificaciones en su funcionamiento.

Como la Química es una ciencia que se puede entender a dos niveles, el macroscópico y el molecular, su enseñanza debe apuntar a ambos para lograr una comprensión general. El nivel molecular frecuentemente causa mayores problemas a los estudiantes, razón por la cuál debe ser fortalecido.

En este trabajo pretendemos acercar las posibilidades que ofrecen los recursos informáticos como apoyo a la enseñanza de la Química, haciendo hincapié al nivel molecular.

Clasificación del Software para Química

Si bien no existe una clasificación general de las aplicaciones informáticas que sirven de apoyo a la enseñanza de la Química, intentaremos agruparlas según su función. Al realizar esta clasificación, se debe tener en cuenta que en ciertos casos, una misma aplicación tiene varias funciones incorporadas, por lo que la misma puede no resultar del todo correcta. También mencionaremos algunos ejemplos gratuitos de cada tipo compatibles con algunas versiones del sistema operativo Windows, pero sólo a efectos ilustrativos, sin pretender que esto evite una búsqueda personalizada de otras aplicaciones disponibles. Cabe mencionar, que existen también diversas aplicaciones para otros sistemas operativos, tal como Linux o MacOS, de similares prestaciones.

Hay que resaltar que las aplicaciones disponibles en Internet suelen estar acompañadas de manuales de uso y tutoriales que de forma sencilla acercan al usuario a las posibilidades que los mismos ofrecen. Usualmente se encuentran actividades educativas diseñadas especialmente para alumnos, muchas veces creadas por otros usuarios.

1. Visualizadores

Permiten, entre otras cosas, proyectar en pantalla diversos modelos de sistemas químicos preexistentes. Los más corrientes son aquellos que representan a los átomos como puntos o esferas en tres dimensiones y los enlaces como líneas o tubos. En general, estas imágenes se pueden girar o rotar sobre los ejes cartesianos, permitiendo “jugar” con los átomos al igual que con los modelos rígidos empleados en clase. Esto permite entre otras cosas, formar al usuario una idea más concreta acerca de la estructura espacial, lo cual muchas veces resulta un problema difícil de abordar para los alumnos.

En Internet se encuentran disponibles bases de datos con estructuras moleculares listas para ser visualizadas; podemos citar www.chemspider.com.

A continuación listamos algunos ejemplos de visualizadores:

- *gOpenMol*: (www.csc.fi/gopenmol) visualizador de moléculas y propiedades químicas, densidades electrónicas y orbitales moleculares obtenidos de programas de cálculo de química cuántica [2].
- *Jmol*: (jmol.sourceforge.net) visor de código abierto para estructuras químicas en tres dimensiones con prestaciones para compuestos químicos, cristales, materiales y biomoléculas [3].
- *Molekel*: (molekel.cscs.ch) visor de estructuras moleculares, con la característica de creación de animaciones [4].

- *PyMol*: (www.pymol.org) potente visor orientado particularmente a grandes moléculas [5].
- *USCF Chimera*: (www.cgl.ucsf.edu/chimera) visualización y análisis de estructuras moleculares [6].

2. Editores

Son empleados para crear y editar sistemas moleculares, tanto en dos como en tres dimensiones. La mayoría se utilizan de forma similar a un programa de diseño gráfico e incluyen las mismas funciones que los visualizadores, con la ventaja que se puede generar y modificar las moléculas. Muchas veces tienen la opción de crear los archivos de entrada necesarios para ejecutar un determinado programa de cálculo.

El empleo de este tipo de aplicaciones favorece a la comprensión de los enlaces moleculares, hibridaciones, distancias interatómicas entre otras propiedades. Un ejercicio interesante para aprovechar estos recursos consiste en solicitar al alumno que diseñe los isómeros que corresponden a una determinada fórmula molecular.

- *ACD/ChemSketch*: (www.acdlabs.com) Permite dibujar moléculas en dos dimensiones y, con un simple click, las transforma en 3D. El programa consta de dos partes: la de diseño, con múltiples bases de datos de prediseños, que incluso se pueden ampliar en la misma web y, la parte de visualización 3D [7].
- *ArgusLab*: (www.arguslab.com) no sólo es un editor y visualizador molecular, sino que también posee herramientas de cálculo [8].

- *Avogadro*: (avogadro.openmolecules.net) poderoso editor y visualizador molecular de código abierto en constante actualización [9].
- *Vega ZZ*: (www.ddl.unimi.it/vega) editor y visualizador molecular. Contiene una librería con compuestos y fragmentos moleculares, así como también algunas herramientas de análisis y cálculo [10].

3. Simulación

Algunas aplicaciones permiten simular experiencias de laboratorio en la computadora, tal como se haría en una experiencia de laboratorio real. Esto permite “trasladar” el laboratorio de Química a una computadora, con la ventaja de poder realizar experiencias en corto plazo, controlar variables de entorno, diseñar sus propias experiencias, optimizar recursos, etcétera. Con esto no se quiere decir que la simulación de ensayos de laboratorio pueda reemplazar a las experiencias prácticas, sino que pueden formar un buen complemento.

- *CurTiPot*: (www2.iq.usp.br/docente/gutz/Curtipot_.html) aplicación para análisis y simulación de curvas de titulación ácido-base y pH desarrollada sobre una planilla Excel.
- *Virtual Lab Simulation*: (www.chemcollective.org/applets/vlab.php) permite manipular reactivos tal como se lo haría en un laboratorio, con la posibilidad de diseñar diversos experimentos de ácido-base, termoquímica, solubilidad y reacciones redox.

4. Cálculos de Química Computacional

La función de estas aplicaciones es la obtención de información de sistemas químicos por medio de cálculos matemáticos basados en leyes fundamentales de la Física y de la Química. Nos encontramos así con dos grandes líneas en los cálculos de estructuras moleculares, los métodos que parten de una concepción cuántica y los que lo hacen desde los modelos clásicos.

Los métodos cubren tanto situaciones estáticas como dinámicas. En todos los casos, el tiempo de cálculo y otros recursos, tales como la memoria RAM, se incrementan con el tamaño del sistema a estudiar. Este sistema puede ser una molécula, un grupo de moléculas o un sólido. Los métodos van desde aquellos que son muy precisos, aplicables sólo a sistemas pequeños como son los métodos *ab initio*, hasta aquellos que son aproximados, tales como semiempíricos y mecánica molecular, empleados para sistemas de mayor tamaño, como por ejemplo las proteínas.

Estas aplicaciones proveen un medio que permite a los estudiantes construir conexiones entre propiedades macroscópicas y los niveles atómicos de la materia. Entre las propiedades que se pueden estudiar, podemos mencionar la estructura atómica, entalpías, energías, distribución de cargas, dipolos, datos espectroscópicos, entre otras.

- *Gromacs*: (www.gromacs.org) paquete de programas para llevar a cabo dinámicas moleculares, es decir, simular las ecuaciones de Newton del movimiento para sistemas de varios de cientos de partículas [11].

- *Mopac*: (openmopac.net) paquete de programas de métodos semiempíricos de química cuántica orientado a la predicción de propiedades químicas y modelado de reacciones [12].
- *ORCA*: (www.thch.uni-bonn.de/tc/orca) paquete de programas de estructura electrónica con amplia variedad de métodos cuánticos [13].
- *Firefly*: (classic.chem.msu.su) paquete de programas de métodos ab initio [14].
- *Tinker*: (dasher.wustl.edu/tinker) paquete de programas de dinámica y mecánica molecular, con algunas características especiales para biopolímeros [15].

5. Recursos Educativos Específicos

Aplicaciones diseñadas especialmente para la enseñanza, las cuales hacen muchas veces más placentero el aprendizaje de la Química. Incluyen imágenes y/o videos, juegos, etcétera, que de una manera divertida acercan al alumno temas de difícil comprensión.

- *Chemistry Games*: (www.sheppardsoftware.com/Elements_games.htm) juegos en inglés sobre los elementos químicos.
- *Tabla Periódica de los Elementos*: (www.periodni.com/es/) posee información detallada para cada elemento de la tabla periódica [16].
- *The Chemical Thesaurus*: (www.chemthes.com) página en inglés que contiene extensa información sobre diversos temas químicos.

6. Programación

Una alternativa muy interesante es que los alumnos generen sus propias aplicaciones, las cuales pueden abarcar desde simple rutinas para realizar conversiones de unidades de magnitudes, cálculo y análisis de datos sencillos, hasta cálculos mecanocuánticos y visualizadores para lo cual no hace falta ser un experto programador. Esto permite al alumno adentrarse en el mundo de la Química a través de la informática, estimulando la creatividad para generar sus propias aplicaciones, logrando a su vez un mejor entendimiento del problema químico.

Para esto se encuentran disponibles diversos lenguajes de programación, con distintas filosofías y grados de dificultad. En la página sobre Lenguajes de Programación almacenada en la *Wikipedia* (es.wikipedia.org/wiki/Lenguaje_de_programacion) se da un panorama sobre los distintos lenguajes.

- *Python*: (www.python.org) lenguaje de programación interpretado, la facilidad de utilización y gran versatilidad son sus principales características.
- *PyQuante*: (pyquante.sourceforge.net) paquete de programas de código abierto destinado al desarrollo personal de programas de química cuántica.

Conclusiones

En este trabajo se muestra la amplia gama de aplicaciones disponibles en Internet, algunas diseñadas específicamente, para emplear como complemento en la enseñanza de la Química. Se clasifican las aplicaciones en seis categorías: visualizadores, editores, simulaciones, cálculos de química computacional, recursos educativos específicos y programación. Estas aplicaciones pueden ser utilizadas en todos los estadios educativos, luego de una correcta evaluación de las ideas y conocimientos previos de los alumnos.

Bibliografía

1. Jiménez Valverde, G., Llitjós Viza, A., 2006, Una revisión histórica de los recursos didácticos audiovisuales e informáticos en la enseñanza de la Química, Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias Vol. 5 N° 1.
2. Bergman, D.L., Laaksonen, L. and Laaksonen, A., 1997, Visualization of solvation structures in liquid mixtures, *J. Mol. Graph. Model.* 15, 301-306.
3. Jmol: an open-source Java viewer for chemical structures in 3D. <http://www.jmol.org/>.
4. Varetto, U., Swiss National Supercomputing Centre: Manno (Switzerland)
5. The PyMOL Molecular Graphics System, Schrödinger, LLC.
6. UCSF Chimera package, Resource for Biocomputing, Visualization, and Informatics at the University of California, San Francisco.
7. ACD/ChemSketch Freeware, 2006, Advanced Chemistry Development, Inc., Toronto.
8. Mark Thompson and Planaria Software, 2004 LLC.
9. Avogadro: an open-source molecular builder and visualization tool. <http://avogadro.openmolecules.net/>
10. Pedretti, A., Villa, L. and Vistoli, G., 2004, Vega - An Open Platform to Develop Chemo-Bio-Informatics Applications, Using Plug-In Architecture And Script Programming *J.C.A.M.D.*, 18, 167-173.
11. Hess *et al.*, 2008, *J. Chem. Theory Comput.*, 4, 435-447.
12. Stewart, J. P., 2008, Stewart Computational Chemistry, Colorado Springs.
13. Ganyushin, D., Neese, F., 2006, First Principle Calculation of Zero-Field Splittings, *J. Chem. Phys.*, 125, 024103.
14. Granovsky, A. A., Firefly.
15. William Ponder, J., 2001, TINKER - Software Tools for Molecular Design.
16. Generalic Eni, 2010, Tabla periódica de los elementos. KTF-Split.