

Descripción de experiencias innovadoras para el trabajo experimental, gráfico, de modelación, teórico, tecnológico y para la resolución de problemas.

## Uso de modelado molecular como herramienta didáctica en el primer curso de grado de Química Orgánica\*

M. Boiani,<sup>1</sup> P. Buccino,<sup>1</sup> H. Cerecetto,<sup>1</sup> M. González,<sup>1</sup> V. López,<sup>1</sup> P. Saenz,<sup>1</sup> G. Seoane,<sup>1</sup> S. Loureiro,<sup>2</sup> M. Míguez,<sup>2</sup> X. Otegui<sup>2</sup>

### Abstract (*Molecular Modeling as didactic tool for the first course of Organic Chemistry*)

The application of diagnostic evaluations in advanced courses of organic chemistry revealed a poor learning of some concepts presented in previous organic chemistry courses. Taking this into consideration and aiming at overcoming these difficulties, a new aula methodology was implanted in the first organic chemistry course. By using molecular modeling as a didactic tool our objective was to improve the student's ability to visualize the tridimensional structure of molecules and correlate it with their reactivity. Also, the use of this interactive graphical methodology allows the students to solve problems (and not only simple exercises) and increases their capacity at interdisciplinary thinking. In addition, the students are exposed to new techniques used in current research in organic chemistry. This methodology was implanted in a so called "virtual laboratory". This experience was evaluated as very good. It is worth to mention the high receptivity and enhanced motivation found in the participants related to the didactic tool used, which offered a visual aid to facilitate the learning of different topics in the course.

**Key words:** classroom methodologies, didactic, molecular modeling, organic chemistry

### Introducción

El primer curso de Química Orgánica (Química Orgánica 101) de la Facultad de Química, Universidad de la República (Montevideo, Uruguay) se dicta para las carreras de Química Farmacéutica, Ingeniería Química, Química, Bioquímica Clínica e Ingeniería en Alimentos, y tiene como objetivo dar una visión general de química orgánica, poniendo énfasis en la relación estructura-reactividad y presentando la química de los principales grupos funcionales, incluyendo su forma de preparación. Este curso semestral consta de 56 horas de

clases teóricas, con clases de dos horas de duración y 28 horas presenciales de clase de ejercicios teórico-prácticos sobre los temas tratados previamente. Tradicionalmente el dictado del curso se realiza a través de clases magistrales, con una metodología netamente expositiva. Los estudiantes adoptan en estas clases una actitud completamente pasiva, donde se comportan como simples receptores de información, siendo el docente el único activo en el aula.

En cursos posteriores de la materia se detectó que los estudiantes no aprovechan en forma efectiva este primer curso. En este sentido, se identificaron dos posibles hechos que inciden en esta situación:

- i) La masificación estudiantil, que ha llevado al uso de clases magistrales con mínima interacción estudianto-docente.
- ii) Las dificultades inherentes a la materia; el estudiante que comienza su estudio en Química Orgánica, con frecuencia se ve abrumado por el volumen de información que recibe. Hay una cantidad de datos, conceptos y nueva terminología que debe aprender, tan sólo en un semestre, siendo una disciplina con un alto "contenido tridimensional". Aunque durante el curso tradicionalmente se hace uso de ilustraciones para ayudar a visualizar los procesos moleculares y se construyen modelos moleculares clásicos, a la mayoría de los estudiantes le resulta difícil imaginar la estructura y las reacciones en tres dimensiones. Esto ocasiona que el estudiante comprenda parcialmente los conceptos, generando serias dificultades para aplicarlos o relacionarlos con hechos químicos o bioquímicos reales.

En la búsqueda de posibles soluciones a esta problemática se planteó el uso de métodos gráficos computacionales, intentando aprovechar las grandes posibilidades que ofrecen los paquetes informáticos disponibles para la construcción y visualización espacial de estructuras orgánicas. Estas herramientas informáticas permiten no solamente la visualización espacial sino también la realización de cálculos cuantitativos que funcionan como un dato adicional para la comprensión de ciertos tópicos de los temas tratados.

El uso de Modelado Molecular como herramienta didáctica en cursos de grado de química ha ido creciendo en los últimos años, al reconocerse la importancia de la tecno-

<sup>1</sup> Departamento de Química Orgánica. Facultad de Química-Facultad de Ciencias.

<sup>2</sup> Unidad de Enseñanza. Facultad de Ingeniería.

Universidad de la República. Montevideo. Uruguay.

Correo electrónico: megonzal@fq.edu.uy, uni\_ens@fing.edu.uy

Recibido: 9 de octubre de 2003; aceptado: 6 de enero de 2004.

logía computacional como medio para que los educadores desarrollen habilidades cognitivas en los estudiantes y así se conviertan en productores de información, y no en meros consumidores pasivos. El Modelado Molecular está cambiando la “cara de la química”. Nunca antes había sido tan sencillo desplegar gráficamente las propiedades y el comportamiento de los sistemas químicos, explorando la química en una forma más integrada, interactiva, atractiva y totalmente nueva. (García, 2000; Hessley, 2000; Lipkowitz, 2000; Robinson, 2000; Zeiganik, 2000).

Es así que se propuso la incorporación de esta metodología, sustituyendo prácticos de resolución de ejercicios por Laboratorios Virtuales (LV) de Química Orgánica. El objetivo fue que los LV se transformaran en un ámbito de enseñanza y aprendizaje donde el estudiante adquiriera conocimientos a través de la aplicación de técnicas computacionales que incluyen métodos gráficos para comprender los procesos químicos y la estructura y reactividad de las moléculas. Se buscó que mediante la simulación de experimentos, su observación, el registro de los resultados y la realización de conexiones entre estas observaciones y otras áreas de la química, el estudiante lograra un manejo de los conocimientos de química orgánica básica. La propuesta pone énfasis en los fenómenos químicos y no en los principios matemáticos relacionados, compartiendo las características comunes de un curso tradicional de química orgánica.

### Desarrollo de la experiencia

Se sustituyeron, en el cuatrimestre lectivo, ocho horas de prácticos de resolución de ejercicios por 12 horas de LV. Se plantearon como principales objetivos que el estudiante mejore su capacidad para el manejo tridimensional de moléculas orgánicas, correlacionando estructura con reactividad; que enfrente y resuelva situaciones problemáticas nuevas y realice asociaciones con otras disciplinas. También se planteó como objetivo que el estudiante manejase equipamiento de primer nivel, estableciendo contacto con herramientas propias de la investigación actual en Química Orgánica.

El paquete de Modelado Molecular empleado en el desarrollo del LV fue Hyperchem, siendo de uso comercial y estando disponible en la web diferentes versiones de “demos”.

La implementación de esta metodología se realizó en etapas: 1) preparación de los LV; 2) desarrollo de los LV, y 3) evaluación de la nueva metodología.

**1. Preparación de los LV.** Esta actividad se realizó durante el mes previo al comienzo del curso y consistió en la elaboración del material didáctico de apoyo:

- i. Material escrito: confección de una guía breve (“tutorial”) que permitiese al estudiante familiarizarse con el

software a utilizar y que aportase someramente conceptos básicos para el adecuado uso del mismo.

- ii. Selección y optimización de los problemas a realizar en el aula, considerando: tiempo necesario para el cálculo computacional, conocimiento teórico mínimo de cálculo necesario para el adecuado desarrollo, profundidad del tema a tratar.

Se eligieron los siguientes módulos de trabajo para la preparación de problemas:

- i) Hibridación, distancia y ángulos de enlace.
- ii) Análisis conformacional.
- iii) Estereoisomería (geométrica y óptica)
- iv) Deslocalización de cargas y aromaticidad.
- v) Reactividad y centros electrofílicos y nucleofílicos.
- vi) Estados de transición y mecanismos de reacción
- vii) Acidez y basicidad.

Se plantearon 16 ejercicios que se implementaron en cuatro prácticos. En la figura 1 se muestran ejemplos de problemas de clase, desarrollados en la forma tradicional (primera columna) y con la implementación de la nueva metodología (segunda columna).

**2. Desarrollo de los LV.** Antes de comenzar los LV se dictó una clase demostrativa sobre el uso del software, basándose en la guía breve (“tutorial”) elaborada previamente. Los LV se realizaron en el aula de informática de la Facultad de Química, con asistencia de dos docentes por grupo. En cada grupo se trabajó en subgrupos de dos a tres estudiantes por computadora, con 10 computadoras en el aula. Los estudiantes, interactuando con el software, buscaban soluciones a los problemas planteados, asistidos por los docentes. Se realizaron tres o cuatro problemas por clase. La sala de informática estuvo a disposición de los estudiantes fuera del horario de clase, con los programas disponibles, de modo que el estudiante que estuviese interesado, dispusiese de un tiempo extra para trabajar e interactuar con el software, evacuando dudas y generando nuevas inquietudes.

En los exámenes parciales de evaluación no se incluyeron preguntas relacionadas con el software, manejo y herramientas de cálculo.

**3. Seguimiento y evaluación de la nueva metodología.** Esta actividad se realizó durante el proceso de implementación y desarrollo de los LV, y estuvo a cargo de especialistas en educación en ciencias.

Los instrumentos de evaluación fueron (Amat, 1998; Campuzano Ruiz, 1992):

- 1) Para recabar la opinión estudiantil:
  - i. encuesta diagnóstica, para determinar características generales de la población involucrada

**Figura 1.** Ejemplos de problemas desarrollados en la forma tradicional y con la implementación de la nueva modalidad (LV).

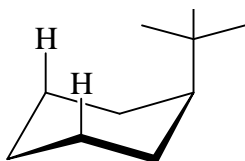
**Problemas tradicionales:**

1) a) Represente para el siguiente compuesto todos los conforméromos posibles e indique el más estable:  
*t*-Butilciclohexano

b) ¿Qué puede predecir respecto a la relación de las constantes de equilibrio conformacional?

Resolución:

Se recuerda sobre la importancia de las interacciones 1,3-diaxiales en el conforméromo:



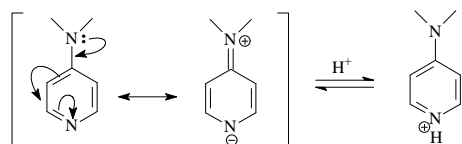
y el importante volumen del *t*-butilo que hace que el equilibrio se desplace hacia la forma ecuatorial:



2) Explique el siguiente hecho experimental:  
4-Dimetilaminopirina es más básica que la piridina.

Resolución:

Se utilizan conceptos de deslocalización de electrones para identificar la disponibilidad de cargas negativas:



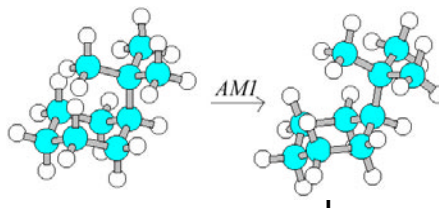
y explicar así la diferencia de basicidad entre estas aminas.

**Problemas en L.V.:**

1) a) Construya la estructura tridimensional del *t*-Butilciclohexano y optimice su energía. ¿El conforméromo más estable coincide con el que predijo?  
b) Calcule la diferencia de energía entre las diferentes conformaciones para el *t*-Butilciclohexano. Compare estas diferencias de energía. ¿Qué puede decir respecto a la constante de equilibrio conformacional de cada compuesto?

Resolución L.V.:

Se comienza dibujando la estructura del conforméromo I (*t*-butilo axial). Luego se optimiza por AM1:



y se observa cómo el *t*-butilo se aparta de los protones en posiciones 1,3- para hacer más estable la molécula.

Se calcula la energía del conforméromo. De igual manera se procede con el conforméromo II (*t*-butilo ecuatorial).



**Conforméromo**  
**Energía (cal/mol)**  
**ΔE (kcal/mol)**

	I	II
Energía (cal/mol)	-2805.54	-2800.42
ΔE (kcal/mol)	—	5.12

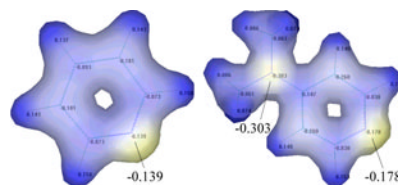
La diferencia de energía entre los conforméromos I y II es tal que el equilibrio conformacional se encuentra desplazado hacia el conforméromo con el sustituyente en posición ecuatorial.

2) Explique el siguiente hecho experimental, utilizando herramientas de modelado molecular.

4-Dimetilaminopirina es más básica que la piridina.

Resolución:

Se construyen las estructuras, se optiman por AM1 y se calculan cargas Mulliken y se observan las propiedades moleculares:



- ii. encuestas de seguimiento, para obtener insumos para una retroalimentación y mejoras durante el desarrollo del curso.
- iii. encuesta final, para conocer la opinión de los estudiantes sobre la utilidad de la herramienta en el mejoramiento del curso
- iv. entrevistas semi-estructuradas

2) Para recabar la opinión docente: encuestas de opinión y reuniones periódicas entre los docentes y el grupo de

especialistas en educación en ciencias, durante la implementación y desarrollo de los LV.

3) Observaciones de clase no participantes a los LV y a los prácticos tradicionales.

**Resultados y discusión**

El desarrollo y aplicación de los LV en el primer curso de Química Orgánica resultó en la transformación de prácticos de ejercicios convencionales de pizarrón en prácticos interactivos de visualización tridimensional de los procesos químicos.

La encuesta diagnóstica estudiantil, realizada sobre el total de la población, permitió establecer las características de los asistentes y sus conocimientos previos de computación, donde se destaca que la mayoría (83%) ha trabajado en el entorno Windows. Las encuestas intermedia y final, realizadas también sobre el total de la población estudiantil, indicaron que la mayoría de los estudiantes (79%) opinó que el uso del software de modelado molecular ayudó a la comprensión de los temas de la asignatura y a la resolución de los ejercicios de pizarrón de los prácticos tradicionales (71%). La principal ventaja del uso del software como herramienta didáctica, de acuerdo con la opinión estudiantil, es la posibilidad de visualización tridimensional de las moléculas, permitiendo aplicar lo aprendido en clase y tener una idea más real de los ejercicios. Además, los estudiantes manifestaron que la resolución de ejercicios se tornó más fácil, entendible, entretenida y dinámica comparada con las clases prácticas tradicionales. Entre las desventajas se cita que no todos los estudiantes tienen igualdad de destrezas en el manejo de la computadora y el acceso limitado al software fuera de la Facultad. Las sugerencias más comunes fueron la realización de una clase previa sobre el manejo del programa, disponer de más tiempo para explorar el programa y tener un mayor número de prácticos en la modalidad LV. Las soluciones docentes a este inconveniente, que se están implementando actualmente, se orientan al diseño de ejercicios con menores requerimientos de experiencia previa en el manejo del software. Este último punto parece ser el más adecuado considerando la estructura curricular de la Facultad de Química, donde el primer curso de la materia química orgánica se encuentra al principio de la carrera y en semestres muy compactos.

La gran mayoría de los estudiantes (94%) consideró globalmente bueno el curso, manifestando que sus expectativas respecto al mismo se vieron colmadas.

El grupo de docentes participantes señaló, a través de encuestas y entrevistas, la mayor fluidez de la interacción con los estudiantes y de éstos entre sí en la nueva modalidad de trabajo. El trabajo de los estudiantes en grupos de dos a tres integrantes, para plantear las hipótesis de los ejercicios y manejar el software hace que el práctico se vuelva mucho más interactivo. Al igual que los estudiantes, los docentes notaron que la mayor ventaja de haber empleado esta herramienta informática en el curso fue la visualización de la "tridimensionalidad" de las moléculas. Manifestaron, además, que resultó un buen complemento didáctico para el práctico de resolución de ejercicios tradicional que implica el uso del pizarrón como principal recurso.

Por lo anterior puede decirse que la aplicación de la metodología colmó las expectativas docentes, ya que por un

lado se fortaleció el vínculo estudiante-docente y, por otro, el compromiso estudiantil en la instancia de enseñanza y aprendizaje. Este hecho fue constatado a través de las observaciones de clases seriadas. Según las mismas, el término "laboratorio virtual", usado para la incorporación de esta metodología, resulta apropiado ya que al aumentar la fluidez de la interacción docente-estudiante y de los estudiantes entre sí se obtienen resultados más próximos a un práctico experimental de laboratorio que a un práctico expositivo de ejercicios de pizarrón.

### Conclusiones

A partir del análisis de los resultados se puede destacar la muy buena receptividad y la motivación generada en los estudiantes en relación con la herramienta didáctica empleada, ofreciendo la misma un apoyo que facilitó la comprensión de las temáticas trabajadas durante el curso básico de Química Orgánica.

### Agradecimientos

A la CSE (Comisión Sectorial de Enseñanza, Universidad de la República) por el financiamiento de este proyecto.

### Información suplementaria disponible

Una descripción de ejercicios utilizados con esta nueva metodología puede solicitarse a los autores vía correo electrónico. ■

### Bibliografía

- Amat, O. *Aprender a enseñar. Una visión práctica de la Formación de Formadores*. 4ª ed., Gestión 2000, 1998.
- Campuzano Ruíz, A. *Tecnologías audiovisuales y educación. Una visión desde la práctica*. Ediciones Akal, 1992.
- García, M., Montes, I.; New Alternative for Teaching Organic Chemistry using Molecular Modeling, *American Chemical Society Conference*, Puerto Rico, julio 2000.
- Hessley, R.; Computational Investigation for Undergraduate Organic Chemistry: Predicting the Mechanism of the Ritter Reaction, *J. Chem. Educ.*, **77**, 202-203, 2000.
- Hyperchem (<http://www.hyper.com>)
- Lipkowitz, K.B., Robertson, D.; Conformer Hunting: An Open-Ended Computational Chemistry Exercise that Expresses Real-World Complexity and Student Forethought, *J. Chem. Educ.*, **77**, 206-209, 2000.
- Robinson, W.R.; Scientific Discovery Learning with Computer Simulation, *J. Chem. Educ.*, **77**, 17-19, 2000.
- Zeiganik, A., Valdez-Pérez, R., White, B.; Proposed Methodological Improvement in the Elucidation of Chemical Reaction Mechanisms Based on Chemist-Computer Interaction, *J. Chem. Educ.* **77**, 214-218, 2000.