



La Química Computacional como mediación pedagógica para el aprendizaje de conceptos inorgánicos

Computational chemistry as pedagogical mediation for learning inorganic concepts

María del Carmen Suárez Millán y Juan Pablo Betancourt Arango¹

Recepción: 27/09/2020
Aceptación: 30/09/2022

Resumen

En el mundo de hoy han surgido diversas áreas que permiten apoyar los procesos de enseñanza-aprendizaje para las generaciones actuales de docentes y estudiantes. Un ejemplo es la química computacional, la cual ha sido muy representativa como mediación pedagógica, debido a que, con el desarrollo de diferentes softwares y aplicativos tecnológicos que se dedican al análisis predictivo de las propiedades químicas y avances investigativos en el tratamiento de enfermedades, también han presentado un auge al momento de utilizarlos en el aula de clase, para propiciar una comprensión de los conceptos para el aprendizaje de la química. De esta manera, a través del uso del aplicativo tecnológico MolecularARweb, se llevó a cabo una intervención en un aula de clase, en donde se pudo analizar de forma cualitativa la asimilación y el entendimiento de conceptos inorgánicos, y el rol pedagógico que a su vez proporciona el uso de este tipo de aplicaciones, para explicar conceptos que no son entendibles a simple vista por los estudiantes, logrando así, una variación significativa en el aprendizaje al momento de utilizar dicha herramienta pedagógica.

Palabras clave

Aplicativos tecnológicos, Cualitativo, Química Computacional, Mediación pedagógica, MolecularARweb.

Abstract

In today's world, various areas have emerged to support teaching-learning processes for today's generations of teachers and students. An example is computational chemistry, which has been highly representative as pedagogical mediation, because, with the development of different software and technological applications dedicated to predictive analysis of chemical properties and research advances in the treatment of diseases, they have also presented a boom when used in the classroom, to foster an understanding of the concepts for learning chemistry. In this way, through the use of the technological application MolecularARweb, an intervention was carried out in a classroom, in which it was possible to analyze qualitatively the assimilation and understanding of inorganic concepts, and the pedagogical role that in turn provides the use of such applications, to explain concepts that are not understandable to the naked eye by students, thus achieving a significant variation in learning when using such a pedagogical tool.

Keywords

Technological Applications, Qualitative, Computational Chemistry, Pedagogical Mediation, MolecularARweb.

¹ Universidad de Caldas, Manizales, Colombia.

Introducción

En la actualidad, es necesario que los estudiantes adquieran nuevas habilidades que permitan su preparación y adaptación a los rápidos cambios que el mismo mundo del conocimiento les impone a través del desarrollo de diferentes tecnologías emergentes, debido a que estas, proporcionan nuevos procesos de innovación e investigación (Flores et al., 2019), a través de la interacción que se presenta hoy en día entre la Ciencia, Tecnología y Sociedad (CST), cuyo objetivo de estudio está enmarcado en la comprensión del conocimiento científico-tecnológico y sus implicaciones en ámbitos sociales, ambientales y culturales, favoreciendo así los procesos de reflexión sobre las problemáticas actuales educativas y sus posibles soluciones frente al uso de la tecnología (Cano y Alberto, 2010). Un ejemplo de esto, son los avances que están enmarcados por el desarrollo de investigaciones que utilizan la química computacional (QC), entendiéndose esta, como la unión entre la química y la tecnología, la cual, tienen un papel crucial frente a la aplicación de simulaciones, análisis predictivo de sistemas que se pueden encontrar dentro de la química y la creación de nuevos materiales educativos (Parada y Hernández, 2009).

De esta forma, la QC se caracteriza por ser una rama joven que cuenta con diferentes aplicabilidades tanto en la mecánica molecular (MM), como en la mecánica cuántica (MQ) (Leiva y Estrin, 2011; Ardèvol, 2013). Históricamente, esta ciencia emana desde los avances científicos proporcionados por el físico austriaco Erwin Schrödinger, quien en 1925 desarrolló una ecuación, en la cual, con dicha formulación demuestra la cuantización de la materia sin necesidad de introducirla como en el modelo de Bohr (Mó y Yáñez, 2011). Por ello, el hecho de que la ecuación de Schrödinger fuese resuelta para sistemas monoeléctricos indica que hay un progreso continuo en las investigaciones, demostrando así por medio de aproximaciones, el desarrollo de la QC y la fundamentación teórica suficiente para lograr interpretar estos fenómenos (Mó y Yáñez, 2011).

Cuando esta ciencia está aplicada a la MM, pues lo que pretende este método, es basarse en el modelamiento matemático de una molécula compuesta por átomos que se mantienen unidos por enlaces, asumiendo un comportamiento hidrogenoide para átomos diferentes a hidrógeno y además se utilizan parámetros de fuerza de tensión y flexión, lo cual permite las interacciones entre los átomos no enlazados, logrando así la construcción de una expresión de la energía potencial, que puede ser aplicada a sistemas biológicos mucho más complejos como los son por ejemplo: las proteínas y las enzimas (Valles-Sánchez et al., 2014). Además, cuando esta ciencia es aplicada a la MQ lo que pretende es describir las moléculas en términos de interacciones explícitas entre núcleos y electrones, con el fin de analizar la correlación electrón-electrón y electrón-núcleo (Cjuno y Arroyo, 2003; Valles-Sánchez et al., 2014). Por ello, este tipo de análisis permiten determinar la distribución espacial del núcleo, los electrones, sus energías y la función de probabilidad normalizada, logrando así determinar la probabilidad de encontrar un electrón en ese estado (Valles-Sánchez et al., 2014).

Pero no solamente se utiliza esta rama de la química para realizar predicciones en diferentes sistemas de baja y alta complejidad, sino que también se está utilizando para el diseño de nuevos materiales educativos computacionales, que permitan el desarrollo de competencias científicas como lo es, por ejemplo, el pensamiento computacional en las ciencias (Zapotecatl, 2018), y el pensamiento viso-espacial (Cadavid y Tamayo, 2013). Es

por ello por lo que, esta ciencia demuestra ser una aplicación de las nuevas tecnologías electrónicas y las matemáticas, para ayudar a comprender de una mejor manera, las diferentes propiedades fisicoquímicas que posee un determinado sistema, además es utilizada por estudiantes y profesionales en áreas afines, como nueva una forma o método de estudio que potencialice el entendimiento hacia el mundo de la química (Valles- Sánchez et al., 2014).

De esta manera, la QC está en un proceso de desarrollo debido al aumento de la tecnología, por lo cual, esta rama de la química esta correlacionada con los diferentes avances científico-tecnológicos que van surgiendo en la actualidad, y que, por medio de esto, se permite dar desarrollo a problemas clásicos de la química teórica, al igual que, a nuevos enigmas que van surgiendo a partir de los avances que se den en esta ciencia (Mó y Yáñez, 2011). Hoy por hoy, en esta rama de la química, hace uso de herramientas tecnológicas tanto de software como de hardware, así como también de las áreas de las ciencias exactas, por ejemplo: las matemáticas, la física, la biología y la química (Mó y Yáñez, 2011). Por ello, todo esto conllevaría al progreso constante en la producción de nuevos descubrimientos científicos, pero si se analiza desde otro punto de vista, la QC es una herramienta que da la posibilidad de mostrarles a los estudiantes algunos fenómenos que no se pueden ver a simple vista, permitiendo así, un mayor entendimiento frente a los conceptos de química que son impartidos en el aula de clase (Bedolla y Olvera, 2009).

Por otro lado, muchos investigadores afirman que esta rama de las ciencias exactas nace con la necesidad de comprender aspectos importantes que no se pueden resolver de forma práctica como, por ejemplo, el análisis de sistemas en condiciones extremas de temperatura o presión, el comportamiento de materiales o el estudio de sistemas químicos que experimentalmente genera un alto costo (Valles-Sánchez et al., 2014). De esta forma, la QC resulta ser un gran método de estudio, ya que los programas de esta rama actualmente contienen los avances científicos de la disciplina de las últimas décadas, pero en cuanto a su manejo pleno, es difícil y requiere del dominio de algunos aspectos con relación a los fundamentos de la química cuántica y computacional (Bedolla y Olvera, 2009). Sin embargo, es posible su empleo limitado dentro del proceso de formación de estudiantes de secundaria, para hacer cálculos sencillos con parámetros estándar que funcionen bien, y que, en la mayoría de los casos, pueden ser llevados al aula de clase, con el fin de utilizarse como una buena herramienta didáctica (Bedolla y Olvera, 2009), debido a que, es posible emplear la QC como un modelo de mediación pedagógica que permita tanto al docente como al estudiante, mediar los diferentes procesos de enseñanza-aprendizaje a través de la química más la tecnología, por medio del uso de diferentes softwares para reforzar, ampliar e interiorizar mucho más fácil aquellos conceptos impartidos en clase que no se pueden analizar a simple vista (Figura 1).

Otro aspecto que es importante analizar según Parada y Hernández, (2009), en su investigación *Material Educativo Computacional Para El Desarrollo de Competencias Científicas*, es el hecho de desarrollar nuevas estrategias para la enseñanza de la química, por lo cual, la QC representa ese camino a seguir para transformar la forma en que se enseña y se aprende dicha asignatura (Parada y Hernández, 2009). Por ello, dichos autores plantean el uso de la QC para la elaboración de nuevos materiales educativos que permitan al estudiante incentivar su creatividad con la ayuda de dichos softwares, demostrando así, que, si la tecnología estuviera ligada a la enseñanza de dicha ciencia, la contribución al desarrollo de competencias científicas en los estudiantes sería cada día más notoria,

emotiva e innovadora (Parada y Hernández, 2009). Una ilustración de lo anterior, es la forma en la que se utiliza la bioinformática en entornos colaborativos virtuales y de animaciones computacionales para el aprendizaje de otras ciencias como la biología molecular, permitiendo así, introducir al estudiante en la práctica y la formación investigativa, convirtiendo las prácticas en simulaciones de situaciones experimentales y en puntos metodológicos, para los cuales tanto el estudiante como el docente puede analizar y profundizar (Pérez y Rodríguez, 2007).

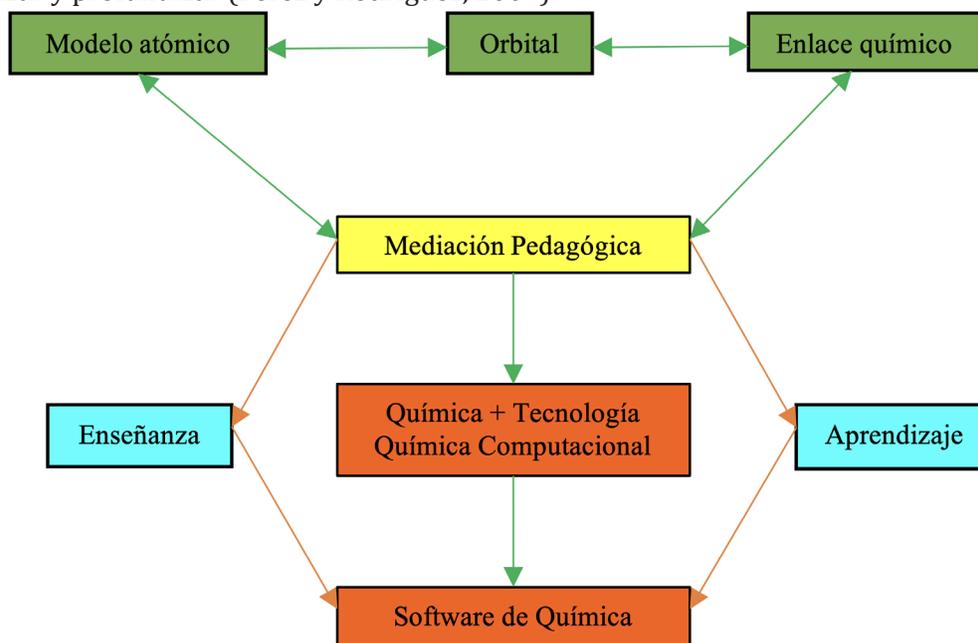


FIGURA 1.
Esquematación de los ejes centrales de interés para la presente investigación.

Además de la utilización de la QC en los procesos de mediación pedagógica, esta ciencia también permite que los docentes en la actualidad fomenten el desarrollo de habilidades visoespaciales, ya que estas funciones están presentes en cada minuto de nuestro día, y las utilizamos, por ejemplo: “cuando nos desplazamos a nuestros hogares, sitios de estudio y de trabajo, o al momento de conducir un carro, leer un mapa u orientarnos en la ciudad donde vivimos” (Cadavid y Tamayo, 2013). Por ende, todas estas características se ven reflejadas a través del desarrollo del pensamiento viso-espacial que una persona debería de poseer, pero que actualmente es difícil su enseñanza y aún más su aprendizaje, debido al poco interés que representa esta temática.

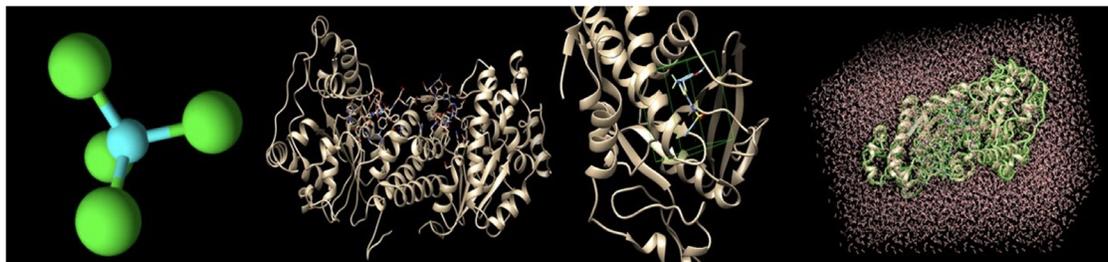
Hay algunas investigaciones que abordan este campo, con el fin de incentivar el desarrollo de este tipo de habilidades, un ejemplo de esto es la investigación realizada por Cadavid y Tamayo, (2013) en donde, se plantearon cuestionamientos relacionados al cómo interactúan la inteligencia viso-espacial y la metacognición en el proceso de resolución de problemas para el campo de la estereoquímica (Cadavid y Tamayo, 2013). De esta manera, a través del desarrollo de un instrumento de lápiz y papel, los autores presentan una serie de preguntas metacognitivas enfocados en el tema de estereoquímica (imagen especular y quiralidad), para determinar conjuntamente las habilidades viso-espaciales que son incentivadas a través del aprendizaje de esta temática y los procesos metacognitivos que llevan a cabo los estudiantes cuando resuelven ejercicios de estereoquímica (Cadavid y Tamayo, 2013).

Por ello, vemos la importancia que tiene el desarrollo de este pensamiento y su relación con los diferentes procesos metacognitivos que se pueden presentar al momento de analizar la estereoquímica de las moléculas, donde junto con la QC representaría una alternativa para proporcionar a los estudiantes, con el fin de incentivar al desarrollo de habilidades viso-espaciales, dado que, una ventaja que representa el uso de la QC en el aula de clase, es que podemos poner al sujeto a interactuar con el programa, permitiendo así que mire la geometría molecular de gran variedad de compuestos que esté deseando analizar y realice cálculos sencillos a través de dichos softwares (Harle y Tows, 2011; Patiño, 2017), además, es de resaltar que la QC le permite al estudiante la realización de movimientos en la molécula y analizarla desde otras perspectivas que no sean posibles de ver con el ojo humano, por lo cual, se ve expresado la necesidad de llevar a cabo procesos de mediación pedagógica (Forero et al., 2017), que conlleven a un mayor entendimiento de los diferentes fenómenos químicos, las interacciones entre moléculas y las formas en las que se pueden enlazar los compuestos de una forma más práctica y observacional.

Todo esto es debido a que, actualmente los estudiantes aprenden e interiorizan dichos conceptos de química de una manera más práctica a través de la observación y la experimentación, por lo cual, el rol del docente actual, está enmarcado en la aplicación de nuevos procesos de enseñanza-aprendizaje que estén articulados con el uso de las diferentes herramientas tecnológicas, como lo es por ejemplo la QC, para incentivar la práctica a través de la experimentación en dicha ciencia (Sepúlveda, 2014; Martínez y Saavedra, 2017). De esta manera, es importante aplicar todo lo anterior en el aula de clase, debido a que, es necesario evolucionar en estos espacios y cambiar la metodología magistral que se ha manejado hasta el momento al impartir esta ciencia en la educación secundaria, debido a que, la enseñanza-aprendizaje de la química, ha pasado por diferentes momentos en cuanto a la formulación de sus finalidades, contenidos y métodos didácticos, por ejemplo, en los años setenta, la enseñanza de la química estaba centrada en el conocimiento descriptivo de las sustancias y reacciones químicas, y ya en los años ochenta, se estableció un cambio importante al centrarse dicha enseñanza en los aspectos conceptuales de la química, colocándose un énfasis en los principios químicos más que, en las propiedades de las sustancias y sus reacciones concretas (Caamaño y Oñorbe, 2004).

Con la QC, el sujeto puede lograr un mayor entendimiento de aquellos fenómenos que no se pueden entender a primera instancia, debido a que no son observables a través de la cotidianidad, y para ello, actualmente se reportan programas como Eduquim (Castillo et al., 2017; Tovar et al., 2020), MolecularARweb (Rodríguez et al., 2020), ChemSketch (Campos, 2013), *Avogadro* (Hanwell et al., 2012; Torres et al., 2017), UFCS Chimera (Pettersen et al., 2004; Hertig et al., 2015), GaussView (Antony et al., 2008; Antony et al., 2011) y Visual Molecular Dynamics (VMD) (Humphrey et al., 1996), los cuales se caracterizan por ser herramientas de las tecnologías de la información y la comunicación (TIC) que permiten la visualización de estructuras moleculares de baja y alta complejidad (Gamboa-Carballo et al., 2017), logrando acceder a una gran variedad de análisis químicos, como por ejemplo, la distribución de cargas, la determinación de los orbitales frontera HOMO/LUMO, el cálculo de valores energéticos de entalpía, entropía y energía libre de Gibbs, además de permitir la observación de macromoléculas a nivel biológico para la determinación de sus sitios activos, posibles análisis farmacocinéticos, farmacodinámicos y acoplamiento molecular (docking molecular), como se puede observar a través de la Figura 2.

FIGURA 2. Ilustración de sistemas químicos de baja y alta complejidad, obtenidos a través de los programas de QC de libre acceso ChemSketch y UFCS Chimera.



Todo esto nos lleva a entender el potencial aplicativo que tiene la QC en todos los ámbitos de las ciencias químicas, y el poder predictivo que se tiene a través del desarrollo de cálculos computacionales, para dar entendimiento de una forma teórica a diferentes fenómenos químicos. Ahora bien, es importante entender el rol que puede representar la QC al momento de ser llevada al aula de clase para dar complementariedad a los procesos de enseñanza-aprendizaje de la química, es por ello, que surge el siguiente planteamiento *¿De qué manera la Química Computacional puede ser utilizada como mediación pedagógica para el aprendizaje de conceptos inorgánicos?*

Metodología

La investigación es de tipo cualitativa, establecida por Mayring, (2000) y Duran, (2012), quienes plantean que:

El análisis cualitativo de contenido, se define así mismo dentro del marco de trabajo como una aproximación empírica, de análisis metodológicamente controlado de textos al interior de sus contextos de comunicación, siguiendo reglas analíticas de contenido y modelos paso a paso, sin cuantificación de por medio. (Mayring, 2000).

De igual forma,

expresa un enfoque múltiple en el cual, se refleja una profunda comprensión del fenómeno en cuestión convirtiéndose en una alternativa para captar la realidad a través de los ojos de cada sujeto con su percepción del fenómeno natural, adoptando así una postura metodológica de análisis, para producir conocimiento sobre la realidad humana. (Durán, 2012).

Por ende, mediante un análisis cualitativo, se pretende comprender el como la QC puede ser utilizada en los procesos de mediación pedagógica para potencializar el aprendizaje de conceptos inorgánicos en el aula de clase. Por ello, para poder entender dichos procesos de mediación, se procede a trabajar con una población de estudiantes que hacen parte de una institución educativa perteneciente a la ciudad de Manizales, Caldas, Colombia, y que se encuentran cursando el grado décimo durante el año 2020. De dicha población, se seleccionó el grado décimo uno, con un total de diecisiete estudiantes como muestra de estudio, para analizar los resultados frente a la aplicación de la QC, a través de la elaboración y ejecución de las siguientes etapas.

Inicialmente en la primera etapa, se realizó una exploración de ideas previas a través de la aplicación de un instrumento de *pretest*, el cual está conformado por cinco interrogantes que permitieron identificar los conocimientos previos que tiene cada estudiante, frente a conceptos de química como: 1) Modelo Atómico, 2) Orbital, 3) Enlace

Químico, además de preguntarle por 4) el entendimiento que se tiene frente a la idea de si es posible o no, la unión entre la química y la tecnología, y 5) la experiencia que tenga el estudiante con relación al manejo de algún software de QC que le permita complementar el aprendizaje durante las clases de química.

En la segunda etapa, se llevó a cabo la implementación de un aplicativo tecnológico de acceso libre como **MoleculARweb**, el cual se puede categorizar como una plataforma de fácil manejo dentro del ámbito de la escuela secundaria, ya que permite la unión entre la tecnología y la química, además de la utilización de la realidad aumentada; llevando a cabo un proceso de intervención en el aula de clase, con el fin de visualizar estructuras químicas de gran variedad de compuestos. De esta forma, al poder observar diversas estructuras químicas con dicho software, se genera un espacio de aprendizaje, en donde se puede ampliar la temática de estos conceptos, con el fin de darle a entender al estudiante por medio de la visualización de estructuras con el aplicativo tecnológico, el cómo interaccionan y se unen los átomos para formar uno o más compuestos, a través de la formación del enlace por medio de sus orbitales; además se utilizaron este tipo de representaciones para aclarar el concepto de modelo atómico, con el fin de que, el estudiante comprenda e integre en su proceso de aprendizaje una realidad de cambio, es decir, una transición del modelo atómico de Dalton (representado a través de esferas) al modelo atómico de Schrödinger (expresado en forma de ecuaciones matemáticas).

Finalmente, en la tercera etapa, se realizó un *postest* el cual contenía las mismas preguntas que se realizaron durante el *pretest*, con el fin de observar si se generó una variación significativa en el aprendizaje de los estudiantes con relación a dichos conceptos trabajados, analizando de esta manera, el proceso de formación que impulsa al cambio conceptual en los estudiantes, al momento de incorporar en su sistema cognitivo nuevos conocimientos proporcionados a través de la aplicación de la QC, como una forma de mediación pedagógica para el aprendizaje de dichos conceptos inorgánicos en el aula de clase.

Resultados y discusión

Llevando a cabo el proceso metodológico anteriormente establecido, con el uso del aplicativo tecnológico MoleculARweb (Antes llamado *Molecular Mirror*) se realizó una gran variedad de aplicaciones, con el fin de visualizar estructuras químicas de compuestos (Figura 3) y generar un mayor aprendizaje para estos conceptos trabajados. De esta manera, se realizó un comparativo entre los resultados obtenidos con relación al instrumento aplicado, haciendo análisis entre el antes (*pretest*) y el después (*postest*) para cada una de las preguntas que se les hizo a los estudiantes, y de los cuales, dichos resultados se pueden observar a través de las tablas 1 a 5.

Con relación al *pretest* para la primera pregunta (Tabla 1), en donde se indagó por los presaberes que tienen los estudiantes sobre como creen que está constituida la materia, se evidencia que la mayoría no elaboran representaciones del átomo para expresar la respuesta a dicha pregunta, sin embargo, otros estudiantes realizan dibujos en donde se observan errores conceptuales frente a los diferentes modelos atómicos, debido a que, algunos estudiantes realizaron cuatro representaciones del átomo, con base a los modelos de Dalton, Thomson, Bohr y Sommerfeld. Otros estudiantes, expresaron una confusión entre el modelo atómico de Rutherford y el de Sommerfeld, debido a que dibujan ambas representaciones, y otra pequeña parte de estudiantes, demostraron la constitución de la

materia a partir del modelo atómico de Bohr o el de Sommerfeld de manera independiente, y cuando se analizó las explicaciones de los respectivos dibujos, se observó que los estudiantes tienen conocimiento de que la materia está constituida por átomos, también se evidenciaron errores y confusiones conceptuales entre un modelo atómico y otro.

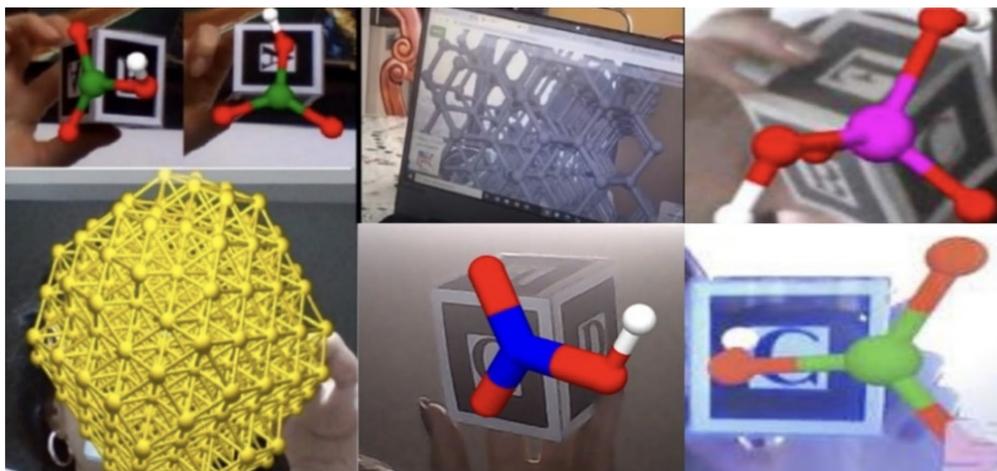


FIGURA 3. Ilustración de sistemas químicos de baja y alta complejidad, obtenidos a través de los programas de QC de libre acceso ChemSketch y UFCS Chimera.

En el *postest* (Tabla 1), se observó un cambio en las respuestas, dado que los estudiantes elaboraron dibujos relacionados con el modelo atómico de Sommerfeld, dejando la confusión que se presentó anteriormente con el modelo de Rutherford, además se notó en algunos estudiantes, la utilización de representaciones a través del modelo de Dalton o de Bohr. De igual forma, también surgieron respuestas frente a esta pregunta, como por ejemplo, estudiantes que explicaron el concepto de átomo desde el desarrollo de un dibujo que hace alusión a los orbitales y otros que no realizan ningún tipo de representación con lo cual, se puede dar a entender una aproximación al modelo mecánico-cuántico, pero cuando se mira la explicación a dicha representación no se evidencia una justificación desde la aproximación al entendimiento a este modelo, mostrando así, una predominancia del modelo atómico de Arnold Sommerfeld y una transición progresiva hacia el concepto de átomo actual.

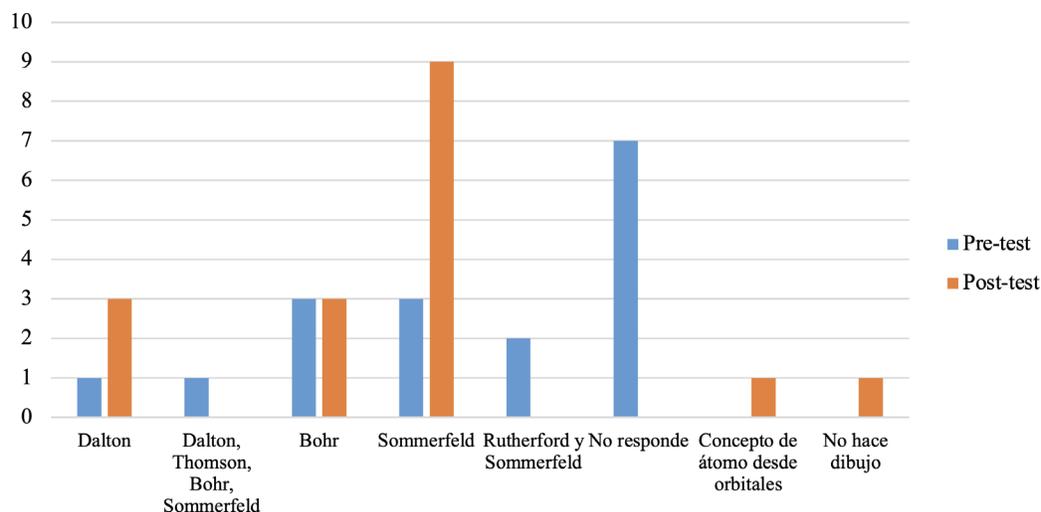


TABLA 1. Análisis resultados *pretest* y *postest* con relación a la pregunta número uno.

1. ¿Cómo crees que está constituida la materia? Dibuja y explica tu respuesta

Frente al *pretest* de la segunda pregunta (Tabla 2), en el cual se indaga por el concepto de orbital, se pudo observar que la mayoría de los estudiantes realizaron representaciones del modelo atómico de Sommerfeld o de Rutherford para dar explicación al concepto. Otros estudiantes, por el contrario, no comprenden que es el orbital o en algunos casos intentan realizar una representación de este concepto, al hacer un círculo a modo de esquematización del sistema solar. Además, cuando se comienza a analizar las explicaciones de dichos dibujos, los estudiantes afirman que el concepto de orbital está delimitado a la representación o dibujo realizado, y lo expresan como una línea transparente, en la cual, un cuerpo se mueve alrededor de algo o como una especie de aro, afirmando que, el orbital es el espacio que tiene el modelo atómico realizado y es una parte en la que se puede encontrar los protones.

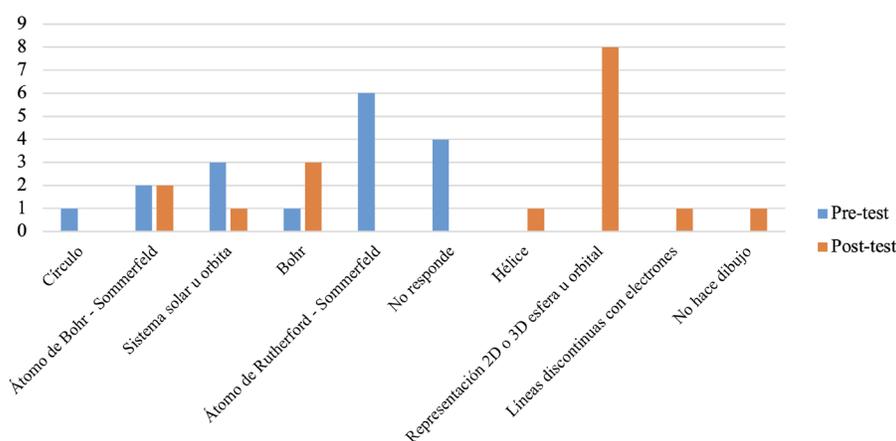


TABLA 2. Análisis resultados *pretest* y *posttest* con relación a la pregunta número dos.

2. ¿Qué entiende por orbital? Dibuja y explica el dibujo realizado

En el *posttest* (Tabla 2), se observó un desarrollo progresivo al momento de dar explicación sobre el concepto de orbital atómico, debido a que la mayoría de los estudiantes realizaron una representación en dos o tres dimensiones a través de las líneas cartesianas, al hacer una esfera, interpretando esto como el orbital S, en donde, se sigue evidenciando que los estudiantes utilizan el modelo atómico de Bohr o el de Sommerfeld para dar explicación a dicho concepto y la elaboración de líneas suspensivas para delimitar la región en el espacio. Otros estudiantes, por el contrario, siguen entendiendo el concepto como una representación del sistema planetario, al realizar círculos o elipses. Los resultados en forma global indicaron que los estudiantes demuestran un avance en el proceso de comprensión sobre el concepto al realizar representaciones en 2D o 3D, pero en las explicaciones se observaron respuestas poco argumentadas desde el lenguaje propio de la química, ya que, dan a entender este concepto como un modelo planetario, más no como una región en el espacio en el cual es probable encontrar el electrón.

Con relación al *pretest* para el concepto de enlace químico (Tabla 3), la mayoría de los estudiantes no responden a dicha pregunta debido a que no entienden que son las interacciones químicas. Otros estudiantes dan una explicación de este concepto usando el

modelo atómico de Bohr o el de Sommerfeld, en otros casos, realizaron un dibujo de los dos tipos de representaciones, explicando este concepto como una especie de unión entre cargas positivas, neutras y negativas, por el contrario, entienden el enlace químico como una interacción entre átomos cuando hay espacio para que los electrones salten de un átomo a otro buscando un proceso de estabilidad.

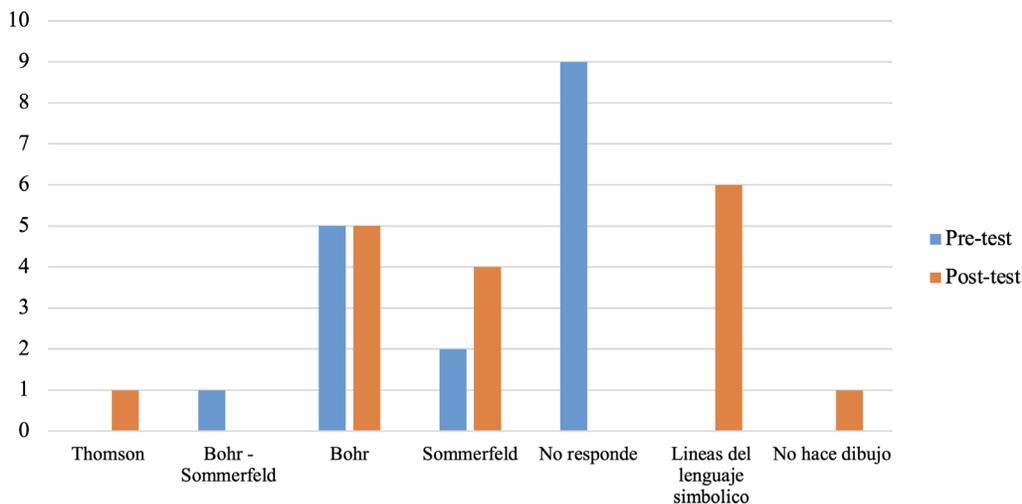


TABLA 3. Análisis resultados *pretest* y *posttest* con relación a la pregunta número tres.

3. ¿Cómo crees que interaccionan los átomos? Realiza un dibujo en el cuadro uno y en el cuadro dos describa la explicación del dibujo

Al momento de analizar los resultados del *posttest* (Tabla 3), se observa una mayor comprensión para el concepto, debido a que, los estudiantes implementan representaciones con base en el lenguaje propio de la química al realizar líneas para indicar una unión de un elemento con otro, pero no se evidencia una profundidad conceptual en sus explicaciones, debido a que aún asumen el enlace químico como una línea, en lugar de entender éste como una distancia generada por la atracción de cargas y regulada por el tipo de enlace (sencillo, doble, triple). Por otro lado, en los dibujos, utilizan los modelos atómicos para tratar de dar una explicación a dicho fenómeno, como el modelo de Thomson, el de Bohr y el de Sommerfeld. Con el modelo de Bohr y el de Sommerfeld se muestra como los electrones pasan de un átomo a otro con el fin de buscar estabilidad durante el enlace químico y así dar cumplimiento a la regla del octeto. Pero con el modelo de Thomson, no se evidencia una profundidad conceptual, así que los estudiantes expresan el enlace químico como una especie de contacto entre un átomo y otro en términos de esferas.

Cuando se les pregunta a los estudiantes si es posible que la química se pueda fusionar con la tecnología (Tabla 4), en dicho *pretest* se observa que de forma mayoritaria responden que, si es posible dicha unión, lo cual se ve sustentado por las explicaciones que presentan, al afirmar que, con la ayuda de la tecnología, la química ha evolucionado y se generaron diferentes avances científicos. De igual forma, otros estudiantes expresaron dicha fusión al decir que, sin química no habría tecnología, y que con ambas se puede generar una relación entre el uso de la tecnología, la química para el aprendizaje. Esto lo dicen con el fin, de resaltar la importancia de estas dos disciplinas, ya que ambas ciencias han avanzado para dar solución a problemáticas como, por ejemplo: “...curar un árbol que este enfermo a través de los avances nanotecnológicos... (escrito textualmente por ellos)”.

En definitiva, la mayoría de los estudiantes entiende que, con la evolución de la tecnología se puede generar un mayor progreso en la química y por ende en las investigaciones, pero también se encontró estudiantes que no respondieron a dicha pregunta o por el contrario contestaron que no creen que se pueda unir estas dos áreas de estudio, debido a que según lo expresado en el *pretest*, la química no es necesaria para un futuro, ni para la salud de los seres humanos, ni mucho menos para la tecnología, llegando a la conclusión que no sería necesario su estudio,

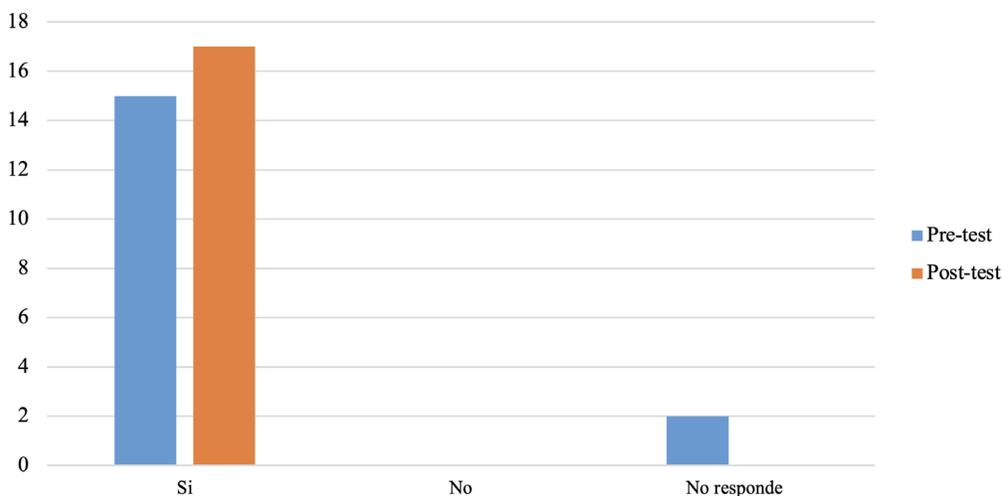


TABLA 4. Análisis resultados *pretest* y *posttest* con relación a la pregunta número cuatro.

4. ¿Considera que la química se puede fusionar con la tecnología? Si _____ No _____ Argumente su respuesta

Al momento de analizar esta pregunta en dicho *posttest* (Tabla 4), se demuestra una variación significativa en el proceso del aprendizaje, debido a que los estudiantes que consideraron que la química no se puede unir con la tecnología, pues ahora reportan de manera afirmativa la unión de estas dos ciencias. De igual forma, estos mismos estudiantes en los que se generó este cambio de ideas, comienzan a expresar justificaciones en las cuales reconocen que con la ayuda de la tecnología la química ha crecido en diferentes avances investigativos, permitiendo así, generar una mayor comprensión y facilidad en la transmisión de conocimientos aplicados en la intervención de los procesos de enseñanza-aprendizaje de la química.

Por último, cuando se les pregunta a los estudiantes en el *pretest* frente al manejo de algún software que les permita apoyar el aprendizaje de la química (Tabla 5), en donde se obtuvo que, la mayoría de los estudiantes responden que, si conocen algún software, otros dicen que no, una pequeña parte de los estudiantes, no respondieron o escribieron en el *pretest* que no saben. Por ello, cuando se analizó las respuestas de los estudiantes que contestaron que si a esta pregunta, se descubre que algunos han utilizado programas como *sololearn*, *chem balancer*, *cloud labs* el cual es un laboratorio virtual interactivo debido a que se está implementado en el colegio, *chem lab*, otros por el contrario, manifiestan que la aplicación encarta habla de química, y que también está *khan academy* la cual, es utilizada para todas las asignaturas de ciencias naturales debido a que tiene videos explicativos y una buena eficacia en la educación. De igual manera, hay estudiantes que manifiestan, no recordar el nombre del programa que utilizan, por el contrario, algunos estudiantes

expresan que no utilizan ningún software pero que saben que hay muchos con buena afinidad para el aprendizaje.

Con relación al *postest* (Tabla 5) se observa un cambio en los estudiantes que no responden o no saben, debido a que, comienzan hacer parte de la población que responden que si tienen algún conocimiento de softwares de química, que les permite apoyarse para un mejor aprendizaje de esta ciencia, con lo cual, se puede ver que hay estudiantes que, si conocen algún software, pero en la explicación hacia las respuestas del instrumento, se vuelve a dar conocimiento sobre las mismas aplicaciones que se han utilizado en la institución como *sololearn*, *chem balancer*, *cloud labs*, de las cuales, *chem balancer*, *cloud labs* y *chem lab*, son aplicaciones para el aprendizaje propiamente de la química y *sololearn* es un aplicativo para el aprendizaje de programación básica. Por otro lado, hay otros estudiantes que tratan de expresar su conocimiento sobre programas como *Avogadro* y *Molecular Mirror*, para la observación de moléculas en 3D. De igual manera, se sigue evidenciando estudiantes que expresaron no utilizar ninguna herramienta tecnológica para generar un mayor aprendizaje de la química, pero hacen la aclaración de que saben que hay muchos aplicativos con buena afinidad para profundizar y trabajar de una manera más didáctica las clases de química, escribiendo en dicha explicación que no recuerdan el nombre de los aplicativos.

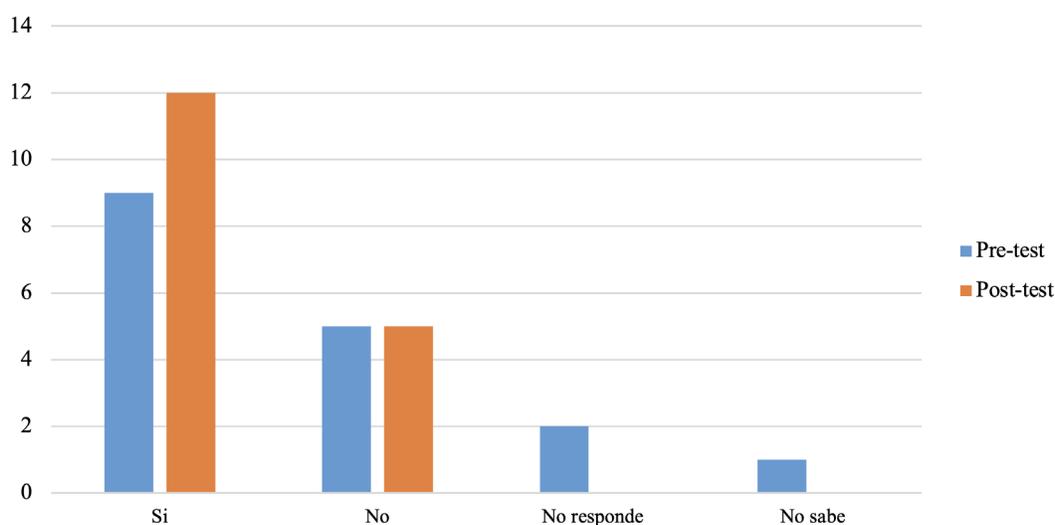


TABLA 5. Análisis resultados *pretest* y *postest* con relación a la pregunta número cinco.

5. ¿Conoces algún Software que apoya los aprendizajes de la química? Si _____ No _____ Explica tu respuesta

Conclusiones

Actualmente la QC tiene dos connotaciones, una desde las ciencias químicas y otra desde las ciencias de la educación. Cuando hablamos de la QC desde las ciencias químicas, esta disciplina es entendida como una integración de programas informáticos y ordenadores con la química, para dar resolución a problemas de este ámbito, mediante el desarrollo e incorporación de teorías, conceptos y nuevos modelos de la química teórica, para la determinación de cálculos estructurales, propiedades moleculares, simulaciones y

predicciones que son de gran apoyo en investigaciones experimentales. Por otro lado, cuando, se habla de esta disciplina desde las ciencias de la educación, es analizada desde un nivel conceptual superficial, debido a que es utilizada para momentos de intervención en el aula de clase, en donde se pueda ayudar a dar claridad a conceptos abstractos, con los que se puede presentar dificultades en el aprendizaje, por ello, desde las ciencias de la educación, se aprovecha la QC, para la elaboración de recursos didácticos y como una forma de incorporar la química con la tecnología.

Mediante el uso del aplicativo tecnológico MolecularARweb, se llevó a cabo una intervención en un aula de clase, en donde se analizó de forma cualitativa la comprensión de conceptos químicos inorgánicos, además del rol como mediación pedagógica que a su vez proporcionó el uso de esta aplicación, al momento de explicar conceptos que no son entendibles a simple vista por los estudiantes, logrando así, una variación significativa en el aprendizaje al momento de utilizar dicha herramienta pedagógica.

Los resultados obtenidos al final de este proceso de investigación muestran variación significativa en el aprendizaje de los conceptos trabajos durante el año 2020, identificando avances paulatinos en el cambio conceptual que tienen los estudiantes sobre estos conceptos. De igual forma, también se encontró una desmotivación en algunos estudiantes que se vio reflejado en las respuestas del *pretest*, dado que no conocían herramientas tecnológicas que les permitieran un mayor entendimiento de los conceptos de química, además, otros estudiantes afirmaron que la química no se puede unir con la tecnológicas porque son ramas o líneas de trabajo independientes. Por ende, se demuestra que inicialmente la mayoría de los estudiantes desconocen la variedad de herramientas tecnológicas que están disponibles en la red y que pueden ser de utilidad para el aprendizaje como mediación pedagógica, en el progreso de ellos mismos.

La aplicación de la QC y los diferentes aplicativos tecnológicos pueden llevar a cabo procesos de mediación pedagógica de la mejor manera, ya que pueden ser útiles, para aquellos estudiantes que son muy visuales en el aprendizaje, puedan entender con mayor claridad el concepto que se está trabajando, y además de permitir interaccionar con dicha herramienta. Todos estos aplicativos tecnológicos pueden ser llevados al aula de clase dependiendo de dos factores, en primer lugar, está el nivel de profundidad conceptual al que quiera llegar el docente con sus estudiantes marcando así la diferencia el aprendizaje significativo de dicha temática, debido a que hay docentes que solamente se dedican a la enseñanza de los conceptos básicos establecidos por los estándares de competencias o por desempeños de trabajo.

Y, en segundo lugar, también es necesario tener en consideración el tipo de institución y la metodología de trabajo, dado que hay instituciones en las cuales no se cuentan con los recursos necesarios para realizar este tipo de aplicaciones tecnológicas en la enseñanza–aprendizaje de la química, por ende, puede ser limitante en este aspecto. De igual manera, está el desconocimiento que pueden tener algunos docentes sobre el manejo de las herramientas tecnológicas, pero en este aspecto, se hace la aclaración de que, no es necesario que un docente tenga un grado superior de profundidad conceptual para la utilización de dichas aplicaciones, pero si es necesario que tenga conocimiento básico de ofimática para utilizar las interfaces y que tengan un proceso de motivación para implementar estrategias en el aula de clase, con el fin de contribuir en el mejoramiento de los procesos de enseñanza–aprendizaje de la química.

Agradecimientos

Los autores expresan sus agradecimientos al Semillero de Investigación Pedagógica y al Grupo de Investigación Innov-acción Educativa, que pertenecen a la Universidad de Caldas, por las diferentes contribuciones realizadas al presente proyecto.

Referencias

- Ardèvol, A. (2013). Métodos de simulación QM / MM y de mecánica estadística : una aproximación teórica a la biología molecular. *Real Sociedad Española de Química*, 109(4), 268–275.
- Antony, J., Frisch, M. J., y Rendell, A. P. (2008). Modelling the Performance of the Gaussian Chemistry Code on x86 Architectures. *Modeling, Simulation and Optimization of Complex Processes*, 49–58. https://doi.org/10.1007/978-3-540-79409-7_4
- Antony, J., Rendell, A. P., Yang, R., Trucks, G., y Frisch, M. J. (2011). Modelling the runtime of the gaussian computational chemistry application and assessing the impacts of microarchitectural variations. *Procedia Computer Science*, 4, 281–291. <https://doi.org/10.1016/j.procs.2011.04.030>
- Bedolla, C. A., y Olvera, C. O. (2009). La química computacional en el salón de clase. *Educación Química*, 20(2), 182–186. [https://doi.org/10.1016/S0187-893X\(18\)30025-9](https://doi.org/10.1016/S0187-893X(18)30025-9)
- Caamaño, A., y Oñorbe, A. (2004). La enseñanza de la química: conceptos y teorías, dificultades de aprendizaje y replanteamientos curriculares. *Alambique: Didáctica de Las Ciencias Experimentales*, 41, 68–81.
- Cadavid, V., y Tamayo, O. (2013). Metacognición en la enseñanza y en el aprendizaje de conceptos en Química Orgánica. *Revista EDUCyT*, 7, 546–550.
- Castillo, W., Martínez, F., Álamo, L. M., Sojo, V., Ramírez, B., Peraza, A., Rojas, L., Sánchez, M., Echeverría, M., Alfonzo, F., Rondón, P., Martínez, M., y Ruetter, F. (2017). EduQuim, una herramienta para el aprendizaje computacional y la enseñanza de Química en la escuela secundaria. *Educere*, 21(68), 127–141. <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=35652744013>
- Campos, D. (2013). ChemSketch (software gratuito para química y biología). *Alambique, Didáctica de Las Ciencias Experimentales*, 74, 84–91. <https://docplayer.es/21542735-Chemsketch-software-gratuito-para-quimica-y-biologia.html>
- Cano, Q., y Alberto, C. (2010). Enfoque Ciencia, Tecnología y Sociedad (CTS): perspectivas educativas para Colombia. *Zona Próxima*, 12, 222–239.
- Cjuno, A., y Arroyo, J. (2003). La Química Teórica Y La Química Cuántica Computacional. *Csi Boletín*, 48(2), 16–19.
- Durán, M. M. (2012). El estudio de caso en la investigación cualitativa. *Revista Nacional de Administración*, 3(1), 121–134. <https://doi.org/10.22458/rna.v3i1.477>

- Forero, E. F., Jaramillo, C. I., y Páez, A. C. (2017). La Mediación pedagógica, una propuesta para generar un cambio hacia una cultura aprendiente. *Revista REDpensar*, 5(1), 23–35. <https://doi.org/10.15332/dt.inv.2021.02172>
- Flores, A., Rodríguez, J., y Chávez, G. (2019). La transformación de la educación básica en México desde la perspectiva de la Educación 4.0. 103–111. <https://bit.ly/37zKFyR>
- Gamboa-Carballo, J., Ferino-Pérez, A., Lau-González, M., Hernández-Garcés, A., Corona-Hernández, J., y Jáuregui-Haza, U. (2017). Las TIC como herramienta para visualizar estructuras moleculares en la enseñanza de la Química General. *Rev. Cubana Quím.*, 29(3), 466–479. <http://ojs.uo.edu.cu/index.php/cq>
- Harle, M., y Towns, M. (2011). A review of spatial ability literature, its connection to chemistry, and implications for instruction. *Journal of Chemical Education*, 88(3), 351–360. <https://doi.org/10.1021/ed900003n>
- Hanwell, M. D., Curtis, D. E., Lonie, D. C., Vandermeersch, T., Zurek, E., y Hutchison, G. R. (2012). *Avogadro*: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of Cheminformatics*, 4, 17. <https://doi.org/https://doi.org/10.1186/1758-2946-4-17>
- Hertig, S., Goddard, T. D., Johnson, G. T., y Ferrin, T. E. (2015). Multidomain assembler (MDA) generates models of large multidomain proteins. *Biophysical Journal*, 108(9), 2097–2102. <https://doi.org/10.1016/j.bpj.2015.03.051>
- Humphrey, W., Dalke, A., y Schulten, K. (1996). VMD: Visual Molecular Dynamics. *J Mol Graphics*, 14(1), 33–38. [https://doi.org/10.1016/0263-7855\(96\)00018-5](https://doi.org/10.1016/0263-7855(96)00018-5)
- Leiva, E., y Estrin, D. (2011). Simulaciones matemáticas del comportamiento de átomos y moléculas. *Química Computacional*, 21(124), 50–54.
- Martínez, E., y Saavedra, J. (2017). *Química Computacional. Una Revisión Histórica*. Universidad Pedagógica Nacional. <http://hdl.handle.net/20.500.12209/9606>
- Mayring, P. (2000). Qualitative Inhaltsanalyse. *Forum Qualitative Sozialforschung*, 1(2), Art. 20. <http://www.qualitative-research.net/fqs/>
- Mó, O., y Yáñez, M. (2011). La química computacional en la nueva frontera. *Arbor Ciencia, Pensamiento y Cultura*, 187, 143–155. <https://doi.org/10.3989/arbor.2011.extran1119>
- Patiño, D. (2017). *Uso De La Química Computacional Como Herramienta Para La Enseñanza De La Química En Instituciones Educativas*. Universidad de Ciencias Aplicadas y Ambientales, 60. [https://repository.udca.edu.co/bitstream/11158/657/1/Uso de la química computacional como herramienta.pdf](https://repository.udca.edu.co/bitstream/11158/657/1/Uso%20de%20la%20química%20computacional%20como%20herramienta.pdf)
- Parada, A., y Hernández, M. (2009). Material educativo computacional para el desarrollo de competencias científicas. *Revista Studiositas*, 4(1), 17–26. <http://hdl.handle.net/10983/540>
- Pettersen, E.F., Goddard, T.D., Huang, C.C., Couch, G.S., Greenblatt, D.M., Meng, E.C., Ferrin, T.E. (2004). UCSF Chimera-A visualization system for exploratory research and analysis. *Journal of Computational Chemistry*, 25, 1605–1612. <http://dx.doi.org/10.1002/jcc.20084>

- Pérez, C., y Rodríguez, J. (2007). De la táctica didáctica a la práctica investigativa: experiencia desde la bioinformática From Didactic Tactics to Investigative Practice : An Experience from Bioinformatics. 1–12.
- Rodríguez, F. C., Frattini, G., Krapp, L. F., Martinez-Huang, H., Moreno, D. M., Salomón, J., Stemkoski, L., Träger, S., Peraro, M. D., y Abriata, L. A. (2020). MoleculARweb: a website for chemistry and structural biology education through interactive augmented reality out of the box in commodity devices. ChemRxiv, 2. <https://doi.org/10.26434/chemrxiv.13012463.v1>
- Sepúlveda, L. (2014). La incorporación de la tecnología en la enseñanza de la química. Universidad Del Valle. <https://bibliotecadigital.univalle.edu.co/handle/10893/7189>
- Torres, C., Varela, P., Frías, M. V., y Flores-Morales, P. (2017). Implementación de *Avogadro* como visualizador y constructor de moléculas para alumnos de primer año de Odontología en la asignatura Química General y Orgánica. Educacion Quimica, 28(1), 22–29. <https://doi.org/10.1016/j.eq.2016.09.003>
- Tovar, M. L., Sánchez, M., Serny, K., y Ruetter, F. (2020). La estructuración de una herramienta para la enseñanza de la química de bachillerato (EduQuim) utilizando la plataforma Moodle. IKASTORRATZA.e-Journal on Didactics, 5911(october), 208–227. https://doi.org/10.37261/25_alea/8
- Valles-Sánchez, A., Rosales-Marines, L., Serrato-Villegas, L., y Farías-Cepeda, L. (2014). Métodos y Usos de la Química Computacional. Chemistry Methods and its Applications. Revista Científica de La Universidad Autónoma de Coahuila Métodos, 6(11), 16–21.
- Zapotecatl, L. L. J. (2018). Introducción al pensamiento computacional: conceptos básicos para todos. Academia Mexicana de Computación A.C, 1–221.