

Implementación de un laboratorio de química computacional para el apoyo del aprendizaje de la química

Implementation of a Computational Chemistry Laboratory to Support Chemistry Learning

Rubén Ignacio Arancibia-Olivares,¹ Germán Barriga-González,¹ José Muñoz-Espinoza² y Gabriela Cárdenas-Cerda³

Resumen

Entender el impacto del uso de laboratorios sobre el aprendizaje es fundamental al momento de planificar actividades experimentales que propicien el aprendizaje de nuestros estudiantes. Para ello, se presenta la implementación de un laboratorio “seco”, en el cual, en un curso de química orgánica se modelan moléculas por medio de la química computacional para visualizar y comprender diferentes temáticas asociadas al desarrollo del curso mediante los índices de reactividad y la naturaleza electrónica de la materia. A partir de la implementación, los estudiantes fueron capaces de utilizar software específicos que les permitieron modelar moléculas orgánicas junto a sus propiedades electrónicas de interés para el desarrollo del curso. Se evidenció un alto interés por la metodología a partir de las observaciones de los docentes y experiencias de aprendizaje positivas, medida por medio de una adaptación al instrumento Meaningful Learning in the Laboratory Instrument (MLLI).

Palabras clave: química orgánica; química computacional; enseñanza universitaria; laboratorio de química.

Abstract

Understanding the impact of using laboratories on learning is fundamental when planning experimental activities that foster student learning. To this end, the implementation of a “dry” laboratory is presented, in which, in an organic chemistry course, molecules are modeled through computational chemistry to visualize and understand different topics associated with the course development through reactivity indices and the electronic nature of matter. From the implementation, students were able to use specific software that allowed them to model organic molecules along with electronic properties of interest for the course development. A high interest in the methodology was evidenced from the teachers’ observations and positive learning experiences, measured through an adaptation of the Meaningful Learning in the Laboratory Instrument (MLLI).

Keywords : organic chemistry; computational chemistry; university teaching; laboratory work.

CÓMO CITAR:

Arancibia-Olivares, R. I., Barriga-González, G., Muñoz-Espinoza, J., y Cárdenas-Cerda, G. (2025, julio-septiembre). Implementación de un laboratorio de química computacional para el apoyo del aprendizaje de la química. *Educación Química*, 36(3). <https://doi.org/10.22201/fq.18708404e.2025.3.89817>

¹ Laboratorio MACEDONIA, Universidad Metropolitana de Ciencias de la Educación, Santiago, Chile.

² Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile.

³ Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Facultad de Ciencias, Valparaíso, Chile.

Introducción

Los laboratorios son un espacio transversal en la enseñanza de la química (Seery, 2020), por lo que recopilar experiencias que sean aplicables en diferentes contextos y que permitan el desarrollo de un conjunto de aprendizajes en nuestros estudiantes es fundamental (Bretz, 2019). Debido a esto, se hace necesaria la incorporación de técnicas vanguardistas de investigación dentro de cursos tempranos de carreras científicas, esto con la finalidad de entregarles herramientas actualizadas que les permitan relacionarse con los fenómenos estudiados y que les entreguen herramientas de utilidad para sus futuros profesionales. A pesar de ello, los costos que pueden llegar a tener algunos reactivos e instrumentos pueden ser un impedimento al momento de implementar algunas actividades experimentales (Reid y Shah, 2007), por lo que pensar en experiencias vanguardistas puede llegar a costos demasiado altos.

Algunos autores establecen la existencia de tipos de laboratorios; los “húmedos” y los “secos” (Kirschner y Huisman, 1998). El laboratorio “húmedo” es el laboratorio en el que solemos pensar tradicionalmente, se caracteriza porque el estudiante entra en contacto directo con los materiales y reactivos del laboratorio, por lo que requiere de un laboratorio de química como tal, el uso de material de vidrio y los reactivos propios de cada experiencia. Por su parte, el laboratorio “seco” se caracteriza porque no entran en contacto directamente con los reactivos, sino que se manipulan aparatos electrónicos para interactuar con experiencias modeladas o remotas. Si bien el concepto de laboratorio seco no es nuevo, en los últimos años ha ganado especial interés debido a la irrupción de nuevas tecnologías (Esselman y Hill, 2019) y al confinamiento COVID-19.

Esta modalidad de laboratorios mediados por aparatos electrónicos presenta desventajas respecto a la ausencia de desarrollo de habilidades técnicas relacionadas al uso de material de vidrio e instrumentos de medición, pero permite el desarrollo de otros tipos de interacciones que pueden justificar su implementación como complemento a los laboratorios “húmedos”. Uno de los elementos que más destaca en este sentido es la capacidad de modelar átomos, moléculas e incluso reacciones químicas con figuras visibles por los estudiantes (Jones, 2013). Esto permite subsanar uno de los aspectos más problemáticos de la química, el nivel de abstracción necesario para entender fenómenos atómicos y moleculares, dificultad que se ve particularmente acentuada en los primeros años de formación universitaria, al mismo tiempo da respuesta a las problemáticas expuestas al abaratar los costos asociados a la implementación de un laboratorio y ofrecer experiencias innovadoras en cuanto a la investigación química.

Dado que la palabra “modelización” puede tener varias interpretaciones, en este artículo nos enfocamos en comprenderla como una práctica científica que implica la participación activa de los estudiantes en procesos de modelización (Oliva, 2019). Esto implica no solo la evolución de los propios modelos mentales de los estudiantes, sino también su participación activa en la construcción y modificación de estos modelos. Esta práctica destaca por su capacidad para ayudar a los estudiantes a comprender mejor los conceptos fundamentales de las ciencias, permitiéndoles experimentar cómo se construyen y evalúan estas ideas (Schwarz y White, 2005). La modelización como práctica científica les permite participar activamente en la construcción del conocimiento científico, lo que

puede mejorar significativamente su comprensión y apreciación de la ciencia (Oh y Oh, 2011). En esta investigación, se utilizaron softwares que permitieron el modelamiento de moléculas orgánicas y la determinación de sus propiedades electrónicas asociadas a la reactividad, los cuales fueron utilizados por los estudiantes para la construcción activa de las representaciones en tres dimensiones de compuestos orgánicos de interés para el curso en desarrollo.

Química computacional

La *Teoría del Funcional de la Densidad* (DFT, por sus siglas en inglés) es un método versátil para estudiar la estructura y las interacciones de átomos y moléculas, basado en la distribución de densidades electrónicas asociadas al número de electrones y potencial externo (Argaman y Makov, 2000). Dentro de la DFT, la Teoría de la Reactividad Funcional de la Densidad, o Teoría Funcional de la Densidad Conceptual (cDFT), se enfoca en la reactividad química a través de la densidad de electrones, $\rho(r)$, en lugar de la función de onda de muchos electrones (Kohn et al., 1996; Shu-Bin, 2009). Esta teoría incluye índices de reactividad como la electronegatividad (χ), el potencial químico electrónico (μ), la dureza (η), la blandura (S), la función de Fukui ($f(r)$) y el índice de electrofilia global (ω^+), utilizados para predecir la reactividad química (Fuentealba y Cárdenas, 2014; Shu-Bin, 2009). Además, se han desarrollado descriptores de reactividad globales y locales para una comprensión integral de la reactividad química (Chattaraj y Debesh, 2015).

En reacciones químicas, los índices de reactividad global y local ayudan a estudiar la reactividad y selectividad en reacciones orgánicas (Sahu et al., 2014), derivándose de la energía de los sistemas moleculares (Geerlings, 2022). Los índices de reactividad local proporcionan detalles sobre la reactividad en sitios específicos de la molécula (selectividad) (Pal y Chattaraj, 2021).

El análisis de *orbitales de naturales de enlace* (NBO, por sus siglas en inglés) es una herramienta potente para entender la estructura electrónica de las moléculas, proporcionando una representación localizada del enlace y la reactividad (Dunnington y Schmidt, 2012; Glendening et al., 2013; Weinhold, 2012), específicamente con la ayuda del *análisis perturbacional de segundo orden* (E2PERT, por sus siglas en inglés), el cual permite cuantificar la ocupación electrónica orbital y la energía de estabilización orbital.

Metas de aprendizaje

Se busca dotar de herramientas a los estudiantes que les permitan entender la estructura de moléculas orgánicas y su reactividad por medio del uso de laboratorios secos centrados en la modelización de compuestos orgánicos. A partir de cuatro sesiones, se espera que los estudiantes logren: (1) diseñar moléculas orgánicas, (2) determinar su reactividad y (3) relacionar conceptos teóricos con las propiedades de las moléculas modelizadas.

Resumen de la actividad experimental

La propuesta fue implementada en un curso de Química Orgánica, el cual posee, dentro de su asignación horaria, sesiones experimentales en formato de laboratorio. Este curso se dicta el segundo año en una carrera universitaria con un fuerte componente químico dentro de la formación. El curso contó inicialmente con siete estudiantes, de los cuales solo cinco finalizaron, por lo que se consideró un número de participantes de $N = 5$.

Se consideraron cuatro sesiones de dos bloques cada una (cada bloque tiene una duración de 80 minutos), apoyada con material disponible en una plataforma Moodle. Durante el primer bloque de clases, se realiza una introducción de cada una de las temáticas a trabajar y los softwares a emplear, mientras que en el segundo bloque de clases se realiza un taller guiado. Al finalizar el taller, se programó un trabajo grupal no presencial, disponible en el Anexo 1. Cada trabajo se empleó como insumo para la sesión posterior. Como material de apoyo a los estudiantes se proporcionó un videotutorial de construcción propia, enfocado en el uso de los softwares, disponibles como Anexo 2.

Sesión número uno

La sesión número uno correspondió al efecto de los grupos sustituyentes en la reactividad de las moléculas. Para tal propósito, se les solicitó a los estudiantes que dibujaran en papel la estructura bidimensional de la molécula, caracterizando los principales grupos funcionales asociados a la posible reactividad de las moléculas. Además, se solicitó qué propusieran dos estructuras adicionales que contengan grupos *dadores y aceptores de electrones*, los cuales cambian la reactividad intrínseca de las moléculas seleccionadas. Una vez dibujadas las moléculas en sus cuadernos, se procedió a explicar los conceptos de *confórmeros y búsqueda conformacional*, de la misma forma que se introdujo los distintos métodos computacionales de cálculo asociado a esta tarea, siendo la *mecánica molecular* (MM) y el uso del campo de fuerza universal (UFF) parametrizado en el software *Avogadro* (Marcus D Hanwell, Donald E Curtis, David C Lonie, Tim Vandermeersch, Eva Zurek and Geoffrey R Hutchison; "Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform" Journal of Cheminformatics 2012, 4:17, s. f.) (ver Figura 1), el más importante, ya que este se utilizará para la búsqueda conformacional de las moléculas modeladas y estudiadas.

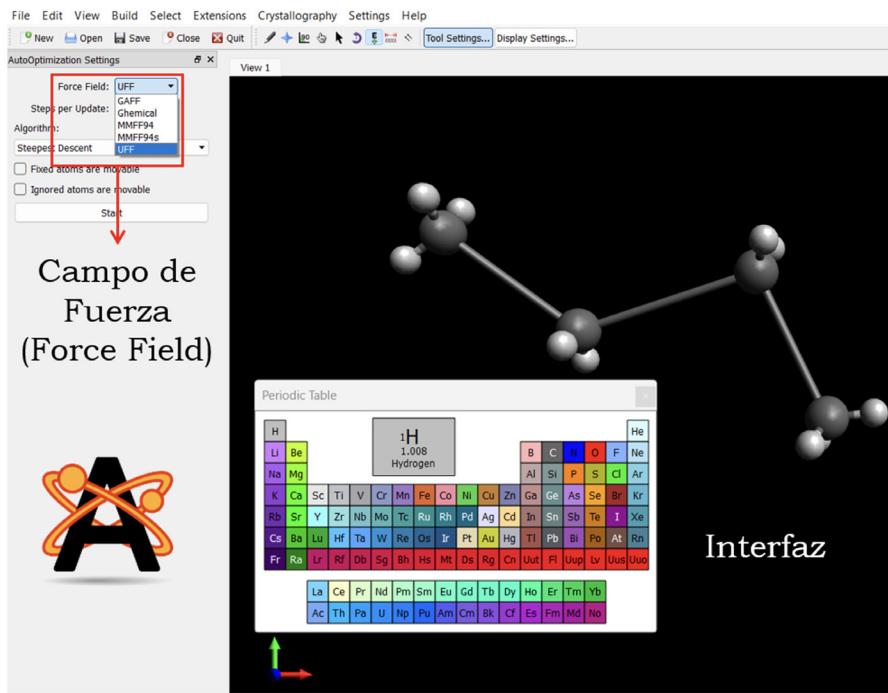


FIGURA 1. Software Avogadro (Interfaz de trabajo, Campos de Fuerzas Parametrizados y Esquema de Color CPK de los elementos).

Dado el limitado tiempo de trabajo en el taller, la primera tarea solicitada fue la realización de la búsqueda conformacional de dos estructuras considerando los grupos dadores y aceptores de electrones. Por último, con el propósito de validar los conocimientos basales, se solicitó comparar la estructura bidimensional dibujada con el confórmero obtenido en *Avogadro*, de tal forma que la abstracción y disposición espacial de átomos y enlaces quede registrada para su posterior análisis. Todos los cálculos asociados a la búsqueda conformacional se realizaron utilizando el campo de fuerza universal (UFF), el cual ha demostrado buenas convergencias y resultados.

Sesión número dos

La sesión dos consistió de una primera instancia asociada a una clase teórica sobre los métodos de cálculo computacional (específicamente, mecánica molecular MM y métodos de Química Cuántica *ab initio* y DFT), su uso para la Optimización de estructuras moleculares y las limitaciones asociadas a cada herramienta de trabajo, siendo esta la capacidad de cómputo y exactitud del modelo físico y algorítmico utilizado. En el primer bloque, además de la revisión de los conceptos teóricos, se mostró el uso del software Gaussview 6.0, el cual es un interfaz gráfico para poder modelar y establecer los parámetros de cálculo (ver Figura 2) que se ejecutaran en Gaussian. Todos los cálculos se realizaron considerando la combinación de Funcional y conjunto de base B3LYP/6-31G+(d,p), el cual ha demostrado resultado favorables en compuestos orgánicos.

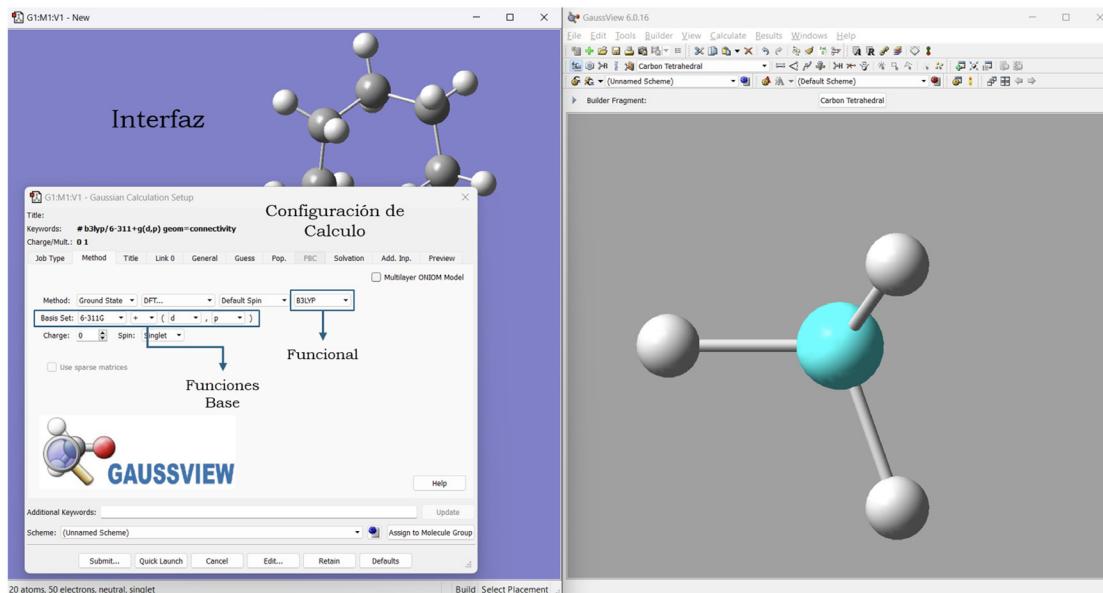


FIGURA 2. Software Gaussview 6.0 (Interfaz de trabajo y Configuración de cálculo que considera funcionales y funciones de base).

El segundo bloque de la clase, los estudiantes crearon el archivo de entrada (input) para la optimización, tomando en cuenta lo revisado en el primer bloque. Dada la diversidad de tiempo requerido para adquirir las habilidades necesarias para el uso del software, se dividió el taller en dos partes. La primera parte consistió en la entrega del archivo de entrada (input). Con estos archivos, se realizaron cálculos en un clúster utilizando el software Gaussian. Una vez finalizados los cálculos, los resultados se entregaron a los estudiantes para la segunda parte del taller, en la que se solicitó comparar las representaciones

y conformaciones de las distintas moléculas, en base al criterio de mínima energía y la ausencia de frecuencias imaginarias obtenidas del archivo de salida (output).

Sesión número tres

En la tercera sesión, durante el primer bloque, se revisaron los conceptos asociados a la reactividad química descritos a través de los Descriptores Globales y Locales. Para la compresión de estos descriptores, se introduce la aproximación de *Orbitales de Frontera* (FMO), del cual se puede obtener las propiedades electrónicas globales y locales simplemente de los orbitales HOMO y LUMO. Dado que el objetivo es estudiar el efecto de grupos *dadores y aceptores de electrones*, se puso especial énfasis en los Índices de Fukui y en el Descriptor Dual de Reactividad ($f^{(2)}$), los cuales se asocian a la reactividad local. Este análisis de reactividad se hizo con el objetivo de que los estudiantes pudieran relacionar los conceptos revisados en la cátedra del curso con las experiencias experimentales que llevarán a cabo en los laboratorios húmedos, tales como la electrofilia, nucleofilia, ácidos y bases de Lewis. Para la obtención de las propiedades electrónicas considerando la aproximación FMO se utilizó el software Fukui v4.1, el cual funciona con el output de Gaussian al considerar el Keyword específico iop(3/33=1) scf=tight (ver Figura 3).

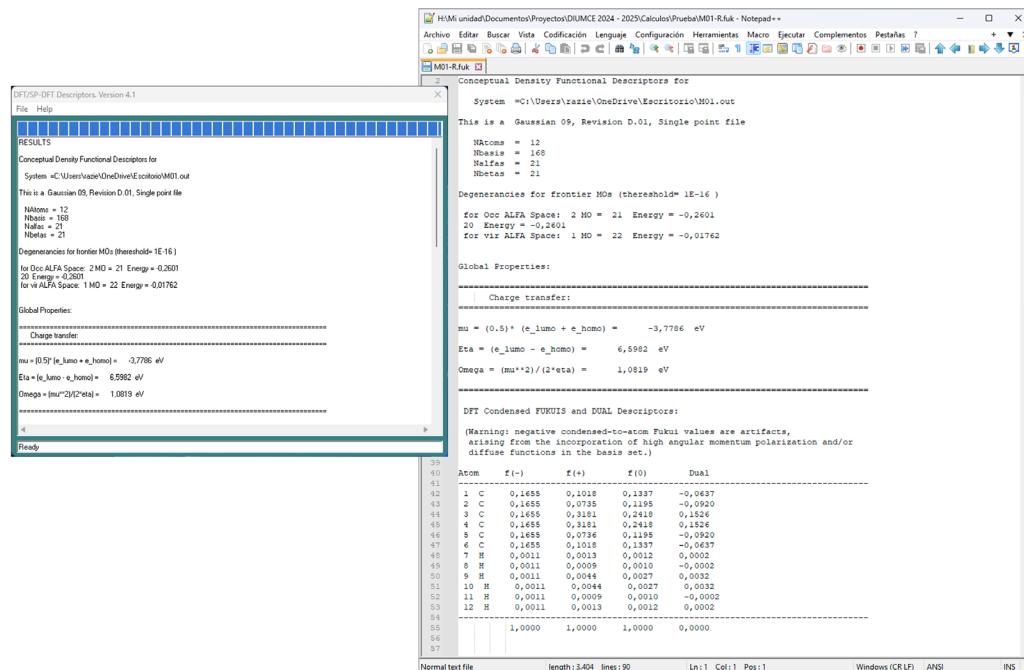


FIGURA 3. Interfaz del software Fukui v4.1 donde se puede observar la reactividad global y local.

Para el taller del segundo bloque, se comenzó con la apropiación de los conceptos HOMO y LUMO previamente discutidos. Se les solicitó que dibujaran sus moléculas bidimensionales y sobre ellas localizar los posibles sitios en los cuales se condensará los orbitales HOMO y LUMO según las propiedades asociadas a los grupos funcionales *dadores y aceptores de electrones*. Posteriormente, se procedió con el cálculo de los índices globales y locales de reactividad y se dejó como tarea la entrega de las tablas, las cuales contienen información importante tales como índices globales (dureza (η), blandura (S), electrofilia

(ω^+) y potencial químico electrónico (μ) e índices condensados en los átomos tales como las funciones de Fukui electrofílicas (f^+) y nucleofílicas (f^-) además de los valores condensados en los átomos del descriptor dual de reactividad ($f^{(2)}$). Adicionalmente, se solicitó la entrega de la isosuperficie del descriptor dual de reactividad. Para finalizar la sesión, se solicitó comparar las representaciones de isosuperficie calculadas con el diagrama bidimensional de localización de HOMO y LUMO sobre las moléculas estudiadas.

Sesión número cuatro

En la cuarta sesión, se revisaron durante el primer bloque los conceptos de Orbitales Naturales de Enlace (NBO) y el Análisis Perturbacional de Segundo Orden (E2PERT). La descripción NBO de una molécula se centró específicamente en la ocupación *real* de los orbitales atómicos y su representación de Lewis (pares electrónicos enlazados, desapareados e hibridación). Por su parte el análisis E2PERT permite la descripción de orbitales moleculares “enlazantes” y “anti – enlazantes”, y como estos se estabilizan energéticamente a través de la deslocalización electrónica. El objetivo principal de esta sesión es la capacidad de interpretar a través de los datos suministrados por Gaussian, el concepto de *ocupación* de los átomos en una molécula, e identificar los orbitales enlazantes y antienlazantes de Lewis, y como estos se estabilizan a través del análisis E2PERT.

23	C	2	S	Cor (1S)	1.99929	-10.10575
24	C	2	S	Val (2S)	1.04249	-0.26942
25	C	2	S	Ryd (3S)	0.00513	0.61181
26	C	2	S	Ryd (4S)	0.00005	0.76886
27	C	2	S	Ryd (5S)	0.00001	23.22240
28	C	2	px	Val (2p)	1.03203	-0.09873
29	C	2	px	Ryd (3p)	0.00183	0.66882
30	C	2	px	Ryd (5p)	0.00022	1.79271
31	C	2	px	Ryd (4p)	0.00009	1.36589
32	C	2	py	Val (2p)	0.91641	-0.09353
33	C	2	py	Ryd (3p)	0.00266	0.61481
34	C	2	py	Ryd (5p)	0.00028	1.79864
35	C	2	py	Ryd (4p)	0.00010	1.38133
36	C	2	pz	Val (2p)	1.06831	-0.11326
37	C	2	pz	Ryd (3p)	0.00170	0.57633
38	C	2	pz	Ryd (5p)	0.00036	1.65848
39	C	2	pz	Ryd (4p)	0.00005	1.47111

FIGURA 4. Ocupación electrónica del átomo de carbono describiendo su hibridación y E2PERT de orbitales NBO de enlace y antienlace.

En el taller del segundo bloque se trabajó con archivos de ejemplo donde se presentan los datos obtenidos del output de Gaussian (ver Figura 4). Así, la tarea que se solicitó fue el análisis de NBO, en específico la obtención del análisis perturbativo de segundo orden de las interacciones donante-aceptor (E2PERT), el cual se obtiene al activar el método de cálculo de cargas y población NBO (pop = nbo).

Finalmente, la tarea buscó integrar todos estos análisis, contrastar con las estructuras que cada grupo tenía y entregar un pequeño reporte que explique cómo con ayuda de estas herramientas de la cDFT lograron cuantificar y visualizar moléculas con diferentes grupos sustituyentes (aceptores y dadores de electrones) y comprender cómo estos sustituyentes modifican la reactividad de la molécula o de ciertos átomos, en comparación con una molécula sin sustituyentes.

Resultados y discusiones

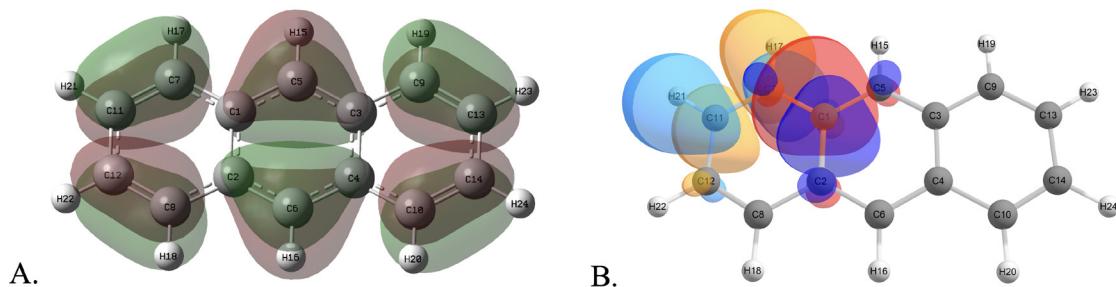
La Química Computacional como herramienta para el aprendizaje y comprensión de los fenómenos electrónicos de la materia han demostrado buenos resultados tanto en la enseñanza secundaria y universitaria (Hrubeš et al., 2024; Kuroki et al., 2023; Tuvi-Arad, 2022), por lo que su utilización es un acierto para la educación y enseñanza de las ciencias del siglo XXI. En el presente artículo se implementó un *laboratorio seco* basado en química computacional para estudiantes de educación superior, el cual demostró ser una estrategia altamente efectiva ya que se lograron vincular conceptos teóricos y prácticos en el contexto de un curso de Química Orgánica. Este enfoque permitió a los estudiantes explorar la intrincada relación entre las propiedades estructurales, electrónicas y reactividad de las moléculas. El uso de Softwares como Avogadro, Gaussview/Gaussian y Fukui v4.1 permitió que los estudiantes no solo diseñaran y modelaran sus moléculas, sino que también les permitió analizar la reactividad a partir de índices globales y locales derivados de la aproximación de orbitales de frontera HOMO y LUMO, y la estabilización electrónica de las moléculas a partir del análisis E2PERT.

Un indicador de logro significativo de la implementación del laboratorio de química computacional fue la consolidación de los objetivos de aprendizaje mediante un diseño progresivo de actividades. La secuencia propuesta permitió una construcción acumulativa de conocimiento, el cual fue desde tareas básicas, como la representación de moléculas en dos y tres dimensiones, hasta análisis avanzados de reactividad química y estabilidad orbital de moléculas. Este enfoque gradual resultó esencial para la integración de conocimientos adquiridos en las clases de cátedra con los conceptos asociados a la química computacional y teórica.

Los resultados obtenidos en los talleres y reportes evidencian que este tipo de metodología no solo fomenta la comprensión de fenómenos químicos, sino que también desarrolló competencias críticas como el análisis, interpretación y la capacidad de visualizar propiedades abstractas.

A través del trabajo realizado, se pudo evidenciar el logro completo de los objetivos propuestos. Respecto al objetivo (1) de diseño de moléculas orgánicas, la Figura 5 muestra ejemplos de moléculas modeladas por estudiantes, quienes consideran criterios de optimización en los ángulos de enlace. Adicionalmente se incorpora la representación orbital del HOMO deslocalizado en toda la molécula (Figura 5.A), característica asociada a su aromaticidad junto con la estabilización del donador-aceptor de Lewis (E2PERT) mediante los orbitales naturales de enlace (NBO) de los fragmentos de la molécula de antraceno (Figura 5.B).

FIGURA 5. Molécula de Antraceno modelada por estudiantes. *Nota.* (A) Representación del orbital HOMO. (B) Las zonas que donan carga (colores azul-rojo) para estabilizar zonas de la molécula (naranja - celeste) mediante deslocalización electrónica.



En cuanto al objetivo (2) de determinación de reactividad, se presenta la Tabla 1, que muestra los valores calculados por los estudiantes de diferentes índices que representan las propiedades electrónicas globales de reactividad del antraceno y cómo estas cambian con respecto a su funcionalización al agregar dos grupos funcionales dadores de electrones, como son los grupos $-\text{OH}$ y $-\text{NH}_2$. A partir de los resultados numéricos obtenidos por los estudiantes, se puede observar que la funcionalización con $-\text{NH}_2$ genera un aumento en la reactividad del antraceno, ya que su Blandura Global (S) incrementa, mientras que la funcionalización con el grupo $-\text{OH}$ genera un cambio marginal en la reactividad global del compuesto aromático. Este tipo de resultados permite consolidar los aprendizajes de los estudiantes, quienes, a través de una representación gráfica (Figura 5) y cuantitativa (Tabla 1), pudieron describir la reactividad y estabilidad de una especie molecular desde su composición elemental y electrónica, dando cobertura al objetivo (3) relacionar conceptos teóricos con las propiedades de las moléculas modelizadas.

TABLA 1. Índices de reactividad global obtenidos por estudiantes.

	$\epsilon_{\text{HOMO}} / \text{eV}$	$\epsilon_{\text{LUMO}} / \text{eV}$	μ / eV	η / eV	S / eV^{-1}	w^+ / eV^{-1}
Antraceno	-5,577	-2,025	-3,801	1,776	0,282	4,068
Grupo NH_2	-5,207	-1,806	-3,506	1,700	0,294	3,615
Grupo OH	-5,489	-1,962	-3,726	1,764	0,283	3,934

En cuanto a la constatación del aprendizaje de los estudiantes, se optó por el uso de una adecuación del Meaningful Learning in the Laboratory Instrument o MLLI (Galloway y Bretz, 2015), un instrumento centrado en las “expectativas” de aprendizaje a modo de encuesta de entrada y “experiencias” de aprendizaje como una encuesta de salida. Este instrumento, diseñado específicamente para el contexto del laboratorio de química, evalúa los dominios Afectivos (Af) y Cognitivos (Co) del aprendizaje significativo. En cuanto a la adecuación del instrumento, este fue traducido al español y modificado para mantener una coherencia con su aplicación en un laboratorio seco. Se adjuntan las oraciones presentadas a los estudiantes en el Anexo 3. Para facilitar la interpretación de los datos provenientes del instrumento, se optó por estandarizar los puntajes de manera que la escala se adecue a valores del cero a uno. Los resultados se grafican en la Figura 6, en la cual se puede evidenciar que todos los resultados se sitúan en el cuadrante I, el cual habla de una tendencia positiva de las expectativas y experiencias de aprendizaje del grupo de estudiantes.

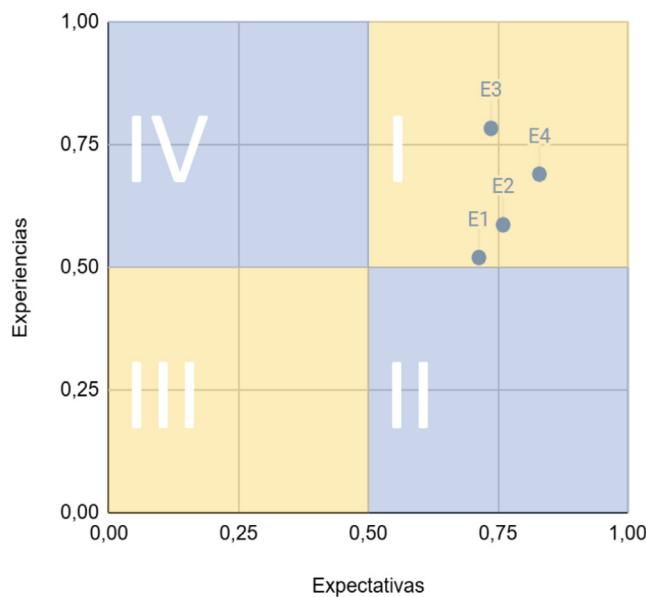


FIGURA 6. Resultados de aprendizaje de los estudiantes respecto al MLLI. *Nota.* Los diferentes cuadrantes muestran las relaciones entre las expectativas y experiencias de aprendizaje, en particular, el cuadrante I muestra una alta expectativa y experiencia de aprendizaje.

En cuanto al análisis de las oraciones presentadas en las encuestas, detalladas en la Tabla 2, se observa que los elementos más destacados por los estudiantes están relacionados con la capacidad de continuar trabajando a pesar de las dificultades durante los laboratorios computacionales. Por otro lado, la oración con la que menos se identifican los estudiantes se refiere a la desorganización, lo que indica que el orden en la ejecución del proceso de modelamiento molecular es fundamental en los laboratorios. La oración 1, que refiere a la aplicabilidad del contenido químico a la vida cotidiana, muestra una clara disminución entre las expectativas y las experiencias de aprendizaje, lo que sugiere que no se cumplieron las expectativas de contextualización en la vida cotidiana a lo largo de los laboratorios.

TABLA 2. Sentencias destacadas respecto al análisis de los resultados del MLLI. *Nota.* Los dominios (Dom) se presentan con un signo que indica una contribución positiva (+) o negativa (-). Las expectativas (Expect) y experiencias (Exper) se muestran bajo los puntajes promedios obtenidos para cada una de las encuestas aplicadas.

Oración	Dom	Expect	Exper
26.- intenté de nuevo cuando cometí errores	Co (+)	0.95	0.86
12.- me sentí desorganizado	Co/Af (-)	0.25	0.26
11.- reflexioné sobre el comportamiento de las moléculas	Co (+)	0.63	0.84
01.- aprendí química aplicable en mi vida cotidiana	Co/Af (+)	0.92	0.52

Finalmente, se destaca la oración 11, que se relaciona con el cumplimiento del objetivo (3) relacionar conceptos teóricos con las propiedades de las moléculas modelizadas al preguntar sobre un proceso reflexivo en torno al comportamiento molecular. En este caso, se observa un valor relativamente bajo de expectativas que aumenta a 0.84 luego de realizar el laboratorio computacional, lo que evidencia que los estudiantes manifiestan realizar procesos reflexivos sobre los compuestos estudiados a lo largo de las actividades.

Conclusiones

A partir de la secuencia realizada con estudiantes de cuarto semestre de una carrera científica, fue posible modelar moléculas empleando elementos propios de la química computacional y calcular sus índices de reactividad global. Esta metodología permitió a los

estudiantes analizar la reactividad de las moléculas propuestas y enlazar conceptos propios de la cátedra con lo experimental propio de la química orgánica, como lo son los orbitales HOMO/LUMO y las zonas donadoras de carga. Este modelamiento de las moléculas, en conjunto al análisis realizado con los índices de reactividad, permiten a los estudiantes entender el comportamiento de las moléculas, dando cumplimiento a las tres metas de aprendizaje propuestas: (1) diseñar moléculas orgánicas, (2) determinar su reactividad y (3) relacionar conceptos teóricos con las propiedades de las moléculas modelizadas.

Como parte de la evaluación del aprendizaje, se evaluaron los resultados del instrumento MLLI (adaptado), lo cual permitió identificar que los estudiantes declaran avanzar en el trabajo a pesar de las dificultades que se puedan presentar, sentir un avance del laboratorio computacional ordenado y realizar proceso de reflexión sobre el comportamiento de las moléculas. De igual forma, se evidencia la necesidad de mejorar la contextualización a la vida cotidiana del proceso realizado. A pesar de los datos recolectados, sería conveniente evidenciar el aprendizaje en futuras iteraciones por medio de instrumentos propios del laboratorio, como lo son los informes, y por medio de la incorporación de instrumentos específicos asociados a la modelización.

Esta propuesta deja entrever ventajas de los laboratorios secos como una metodología con beneficios para los estudiantes, las cuales pueden ser proyectadas en módulos más extensos o incluso en la incorporación de asignaturas dentro del avance curricular de una carrera con carácter científico que permita el desarrollo de habilidades experimentales por medio del uso de software.

Si bien, este tipo de metodologías muestran tener altas ventajas en cuanto al desarrollo del aprendizaje de los estudiantes, es necesario seguir explorando cómo este tipo de metodologías se pueden integrar en cursos tradicionales de química, esto con la finalidad de ser una herramienta más que se complementa con las cátedras y laboratorios húmedos. Otro elemento que puede ser considerado para nuevas implementaciones, es la incorporación del modelamiento por medio de otras herramientas, como lo puede ser la realidad aumentada o la impresión en 3D.

Agradecimientos

Esta investigación fue realizada utilizando el sistema informático de alto rendimiento del PIDi-UTEM (SCC-PIDI-UTEM CONICYT - FONDEQUIP - EQM180180). Agradecemos al Dr. Eduardo Chamorro (UNAB) por haber proporcionado el software Fukui 4.1. Asimismo, expresamos nuestro agradecimiento a la Universidad Metropolitana de Ciencias de la Educación por el financiamiento otorgado al proyecto mediante el fondo competitivo DIUMCE Regular 2024 (código 27-2024-EFA), así como por el apoyo brindado a través del Programa extraordinario de Becas UMCE (código 1003497).

Referencias

- Argaman, N., & Makov, G. (2000). Density functional theory: An introduction. *American Journal of Physics*, 68(1), 69–79. <https://doi.org/10.1119/1.19375>
- Bretz, S. L. (2019). Evidence for the importance of laboratory courses. *Journal of Chemical Education*, 96(2), 193–195. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.8b00874>

- Chattaraj, P., & Debesh, R. (2015). Conceptual density functional theory of chemical reactivity. En *Advances in Mathematical Chemistry and Applications* (Vol. 1, pp. 196–221). Bentham Science Publishers. <https://www.eurekaselect.com/chapter/7997>
- Dunnington, B. D., & Schmidt, J. R. (2012). Generalization of natural bond orbital analysis to periodic systems: Applications to solids and surfaces via plane-wave density functional theory. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 8(6), 1902–1911. <https://doi.org/10.1021/ct300002t>
- Esselman, B. J., & Hill, N. J. (2019). Integrating computational chemistry into an organic chemistry laboratory curriculum using WebMO. En *Using Computational Methods To Teach Chemical Principles* (Vol. 1312, pp. 139–162). American Chemical Society. <https://doi.org/10.1021/bk-2019-1312.ch011>
- Fuentealba, P., & Cárdenas, C. (2014). Density functional theory of chemical reactivity. En M. Springborg & J.-O. Joswig (Eds.), *Chemical modelling: Volume 11* (Vol. 11, p. 0). The Royal Society of Chemistry. <https://doi.org/10.1039/9781782620112-00151>
- Galloway, K. R., & Bretz, S. L. (2015). Development of an assessment tool to measure students' meaningful learning in the undergraduate chemistry laboratory. *Journal of Chemical Education*, 92(7), 1149–1158. <https://doi.org/10.1021/ed500881y>
- Geerlings, P. (2022). From density functional theory to conceptual density functional theory and biosystems. *Pharmaceuticals*, 15(9). <https://doi.org/10.3390/ph15091112>
- Glendening, E. D., Landis, C. R., & Weinhold, F. (2013). NBO 6.0: Natural bond orbital analysis program. *Journal of Computational Chemistry*, 34(16), 1429–1437. <https://doi.org/10.1002/jcc.23266>
- Hrubeš, J., Jaroš, A., Nemirovich, T., Teplá, M., & Petrželová, S. (2024). Integrating computational chemistry into secondary school lessons. *Journal of Chemical Education*, 101(6), 2343–2353. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.3c00908>
- Jmol Development Team. (2016). *Jmol* [Software]. <http://jmol.sourceforge.net/>
- Jones, L. L. (2013). How multimedia-based learning and molecular visualization change the landscape of chemical education research. *Journal of Chemical Education*, 90(12), 1571–1576. <https://doi.org/10.1021/ed4001206>
- Kirschner, P., & Huisman, W. (1998). 'Dry laboratories' in science education; computer-based practical work. *International Journal of Science Education*, 20(6), 665–682. <https://doi.org/10.1080/0950069980200605>
- Kohn, W., Becke, A. D., & Parr, R. G. (1996). Density functional theory of electronic structure. *The Journal of Physical Chemistry*, 100(31), 12974–12980. <https://doi.org/10.1021/jp9606691>
- Kuroki, N., Mochizuki, Y., & Mori, H. (2023). Practical computational chemistry course for a comprehensive understanding of organic, inorganic, and physical chemistry: From molecular interactions to chemical reactions. *Journal of Chemical Education*, 100(2), 647–654. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.2c00837>

- Lu, T., & Chen, F. (2011). Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer [Software]. *Journal of Computational Chemistry*, 33(5), 580–592. <https://doi.org/10.1002/jcc.22885>
- Hanwell, M. D., Curtis, D. E., Lonie, D. C., Vandermeersch, T., Zurek, E., & Hutchison, G. R. (2012). Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform [Software]. *Journal of Cheminformatics*, 4, 17. <https://doi.org/10.1186/1758-2946-4-17>
- ChemAxon. (2014). *MarvinSketch* (Version 6.2.2) [Software]. <http://www.chemaxon.com/products/marvin/marvinsketch/>
- Glendening, E. D., Badenhoop, J. K., Reed, A. E., Carpenter, J. E., Bohmann, J. A., Morales, C. M., Karafiloglou, P., Landis, C. R., & Weinhold, F. (2018). NBO 7.0 [Software]. Theoretical Chemistry Institute, University of Wisconsin, Madison.
- Oh, P. S., & Oh, S. J. (2011). What teachers of science need to know about models: An overview. *International Journal of Science Education*, 33(8), 1109–1130. <https://doi.org/10.1080/09500693.2010.502191>
- Oliva, J. M. (2019). Distintas acepciones para la idea de modelización en la enseñanza de las ciencias. *Enseñanza de las Ciencias. Revista de investigación y experiencias didácticas*, 37(2), 5–24. <https://doi.org/10.5565/rev/ensciencias.2648>
- Pal, R., & Chattaraj, P. K. (2021). Chemical reactivity from a conceptual density functional theory perspective. *Journal of the Indian Chemical Society*, 98(1), 100008. <https://doi.org/10.1016/j.jics.2021.100008>
- Reid, N., & Shah, I. (2007). The role of laboratory work in university chemistry. *Chemical Education Research and Practice*, 8(2), 172–185. <https://doi.org/10.1039/B5RP90026C>
- Sahu, V., Sharma, P., & Kumar, A. (2014). Impact of global and local reactivity descriptors on the hetero-Diels-Alder reaction of enaminothine with various electrophiles. *Journal of the Chilean Chemical Society*, 59(1), 2327–2334. <https://doi.org/10.4067/S0717-97072014000100019>
- Schwarz, C. V., & White, B. Y. (2005). Metamodeling knowledge: Developing students' understanding of scientific modeling. *Cognition and Instruction*, 23(2), 165–205. https://doi.org/10.1207/s1532690xci2302_1
- Seery, M. K. (2020). Establishing the laboratory as the place to learn how to do chemistry. *Journal of Chemical Education*, 97(6), 1511–1514. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.9b00764>
- Serena Software. (n.d.). *PCmodel software* (Version 10.0) [Software]. <http://www.serenasoft.com/>
- Liu, S.-B. (2009). Conceptual density functional theory and some recent developments. *Acta Physico-Chimica Sinica*, 25(3), 590. <https://doi.org/10.3866/PKU.WHXB20090332>
- Tian, L., & Chen, F.-W. (2011). Meaning and functional form of the electron localization function. *Acta Physico-Chimica Sinica*, 27(12), 2786–2792. <https://doi.org/10.3866/PKU.WHXB20112786>

Tuvi-Arad, I. (2022). Computational chemistry in the undergraduate classroom – Pedagogical considerations and teaching challenges. *Israel Journal of Chemistry*, 62(1-2), e202100042. <https://doi.org/10.1002/ijch.202100042>

Weinhold, F. (2012). Natural bond orbital analysis: A critical overview of relationships to alternative bonding perspectives. *Journal of Computational Chemistry*, 33(30), 2363–2379. <https://doi.org/10.1002/jcc.23060>

Anexo I.

Procedure:

During the following four laboratory sessions, you will work in pairs.

Activity 1.

The image shows the electron-attracting and electron-giving groups built from the same skeleton of three molecules. The first must contain an electron-attracting group, the second an electron-giving group, and the third one must not contain any group. Once they have decided which molecules to work on, they should draw them using the MarvinSketch software, saving each file with the corresponding IUPAC name and in mol2 file format.

Activity 2.

Using the mol2 files saved from Activity 1, conduct the conformational search. For this purpose, each pair member will conduct the conformational search using two different software programs. Student one will use Avogadro to perform the conformational searches, and the other student two will use PCModel. Once they have all the conformational structures, they should discuss and compare the lowest energy conformers and decide which results they will keep. Finally, for Task 1, they should upload their results to the eVirtual-Pregrado platform. If in doubt, remember to review the video tutorials available.

Activity 3.

In the next activity, you and your partner will have to consider the minimum energy formula you obtained with either Avogadro or PCModel, and you will have to build an input file in Gaussian format to perform the geometry optimization. Once this file is ready, upload it to eVirtual-Pregrado in Task 2. Your teacher will carry out all the calculations. If you have any questions, remember to check the available video tutorials.

Activity 4.

Part 1.

The working pair will have the output files generated in activity 3 in this activity, shared through eVirtual-Pregrado. You and your partner will find the chk, fchk, and log files. Use the fchk file to obtain the cubes corresponding to the isosurface of the HOMO and LUMO orbitals. Remember to save an image capture of these orbitals. Next, you must save these cube files and obtain visual representations of the nucleophilic and electrophilic Fukui

functions. You should use the Cubman application to obtain these visual representations, which allows you to perform mathematical operations on these cubes. Using the Cubman application, square each cube and save it. Open these cubes in the viewer and take screenshots.

Part 2.

In addition, you will have to calculate the global descriptors of each of the molecules; for this purpose, build an Excel file with the formulas for electronic chemical potential, hardness, softness, and electrophilicity that you can find in the course presentations. Submit all the obtained results in Assignment 3 on eVirtual-Pregrado. If you have any questions, remember to check the available video tutorials.

Final Activity.

Part 1.

In this activity, students will again share files through eVirtual. In this case, the teacher gives them the NBO analysis output files. Open these files as text and search for the "Second Order Perturbation Analysis" title. In this text file section, they should find the most relevant donor-acceptor interactions for each molecule studied. You can visualize these results in Jmol by using the Jmol-NBO Visualization Helper extension. Once you obtain the images, do not remember to save them.

Part 2.

Use the Multiwfn program with the fchk file from the previous activity. To get the ELF/LOL representations, follow the instructions in the Multiwfn manual in section 4, Tutorials and Examples. Save an image capture of each result and the corresponding cube file. If you have any doubts, remember to check the available video tutorials.

Part 3.

With all the results you have obtained in pairs, you should communicate your findings in a report containing a brief introduction, the structures of your molecules in 2D, and then the properties you determined with the different tools used. To conclude, they should answer the question: *Do the different electron-giving and electron-attracting substituents modify the reactivity of the base molecule?* Use the images obtained at each stage of the work to support your conclusions.

Anexo II.



Laboratorio MACEDONIA. (2024, 17 julio). *Química Orgánica Computacional* [Video]. YouTube. <https://www.youtube.com/playlist?list=PLQDvFckIm9RsaNDVnfF21uu93B4yCZCiV>

Anexo III.

Encuesta sobre las experiencias de aprendizaje en laboratorios computacionales