

Avances en la aplicación de TICs en la enseñanza de la Química en el inicio de carreras de grado.

Victorio A. Marzocchi ⁽¹⁾, Miguel D'Amato ⁽²⁾, Rodolfo Leonarduzzi ⁽³⁾ y Nicolás Vanzetti ⁽⁴⁾.

Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral
Santiago del Estero 2654, (S3000AOM) Santa Fe, Argentina

⁽¹⁾ Instituto de Tecnología Celulósica/PI:56-273, FIQ, UNL. vmarzocc@fiq.unl.edu.ar

⁽²⁾ Instituto de Catálisis y Petroquímica/PI:56-273, FIQ, UNL. mdamato@fiq.unl.edu.ar

⁽³⁾ Estudiante de Ingeniería Química/PI:56-273, FIQ, UNL. rodolfoleonarduzzi@gmail.com

⁽⁴⁾ Estudiante de Ingeniería Química/PI:56-273, FIQ, UNL. nvanzetti@gmail.com

Resumen

Se informa el estado de avance en la incorporación de TICs de Visualización y Modelado Molecular en el inicio de las carreras de grado de la Facultad de Ingeniería Química de la UNL. Las posibilidades que brinda el software de dominio público han permitido su instalación masiva en los gabinetes informáticos generando condiciones de libre disponibilidad, superando las restricciones de los elevados costos del software propietario. Desde 2008 desarrollamos una serie de actividades: promovimos la instalación de doble booteo en los gabinetes informáticos, seleccionamos software libre de visualización y modelado molecular, dictamos un ciclo de charlas y realizamos talleres para estudiantes y docentes. Estas actividades despertaron un imprescindible interés e involucramiento docente que permitió generar y respaldar actualizaciones curriculares que incluyen el uso de estas herramientas en asignaturas optativas del tercio final de las carreras y de las químicas básicas. Recientemente logramos la inclusión del software libre Gabedit 2.3.5 – interfaz gráfica de usuario con un avanzado constructor de moléculas - en la asignatura Informática que se dicta para los ingresantes de las carreras de la FIQ, hecho de alto impacto en todas las actividades de docencia, que permitirá iniciativas de actualización, perfeccionamiento, aplicación y desarrollo con estas herramientas.

Palabras claves: TICs, software libre Gabedit, visualización, modelos moleculares, educación en química.

Introducción

La visualización en 3D permite una clara comprensión de la estructura tridimensional de las moléculas y de muchas propiedades físicas y químicas derivadas de ellas. El modelo más sencillo representa cada elemento químico por átomos esféricos de tamaño y color característicos y los enlaces atómicos mediante barras. Estos modelos son comunmente denominados de “bolas y palitos”. Manteniendo las distancias entre centros atómicos se pueden disminuir los radios de las esferas de modo de obtener una estructura más abierta en la que se visualiza fácilmente la red tridimensional de enlaces atómicos. Algunos conceptos como escala, accesibilidad, reactividad, impedimentos estéricos y topoquímica, son fácilmente asequibles con la ayuda de estos modelos tridimensionales.

Hace más de medio siglo, Watson y Crick (1) construyeron un modelo mecánico de unos dos metros de altura para visualizar el modelo de ADN que proponían (2); en la actualidad hay disponible una variada oferta de kits comerciales de modelos moleculares (3). En las últimas dos décadas, la aparición y el acelerado desarrollo de nuevas Tecnologías de la Información y la Comunicación (TICs) han producido una gran cantidad de software de

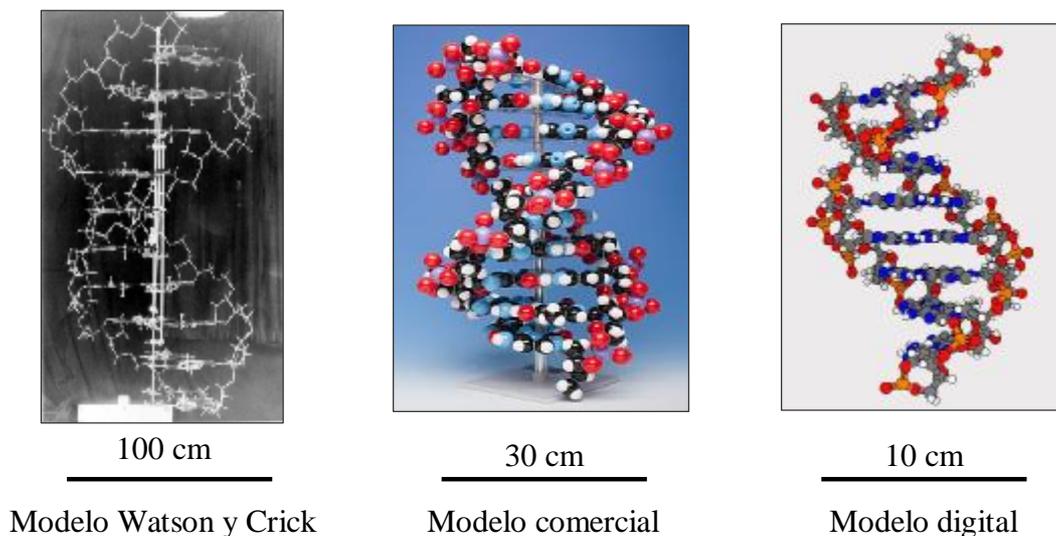


Fig. 1: Visualización de moléculas en 3D

Química Computacional (**Fig.1**); citamos a modo de ejemplo el repositorio de la RELAQ-Red Latinoamericana de Química (4). El carácter propietario de la licencia de uso de algunos software establece serias restricciones legales y económicas para su instalación masiva en gabinetes informáticos para fines educativos. En 2003 la UNL adoptó como política institucional la utilización en su ámbito del software libre (5), estableciendo un marco institucional para la necesaria actualización en la incorporación y uso de TICs con esta filosofía. La posterior organización de varios gabinetes informáticos compartidos por algunas unidades académicas, provistos de computadoras con plataforma Linux dio un importante impulso a la concreción de esta decisión; por ejemplo, en el dictado de la asignatura optativa Modelado Molecular se comenzó a usar solamente software libre sobre plataforma Linux (6). El uso de software de Modelado Molecular en la enseñanza de la Química, es incipiente en la FIQ, falencia debida principalmente al alto costo de la licencia del software privativo. En la convocatoria CAI+D 2009-UNL presentamos un proyecto (7) cuyo objetivo es promover la incorporación de TICs de Modelado Molecular, proponiendo líneas de trabajo en docencia, investigación y servicios,

aprovechando sin más demoras las oportunidades que brinda el software de dominio público y recogiendo la experiencia acumulada en 2008 durante la realización del ciclo de charlas "Modelado Molecular y Software Libre" y el primer taller para docentes usando programas de visualización y modelado molecular de dominio público, con la participación de especialistas en el tema (6)(8).

Actividades Desarrolladas

La **Fig. 2** resume las tareas desarrolladas y discriminadas por año. Se observa que las mismas se han escalonado de modo que la realización de algunas de ellas sirve de base para otra posteriores. Esto es así ya que era imprescindible lograr el involucramiento de los docentes responsables de asignaturas de distintos tramos de las carreras.

La FIQ cuenta con cuatro gabinetes informáticos, distribuidos en dos edificios, con un total de sesenta computadoras. En 2008 promovimos la instalación de doble booteo en los gabinetes, iniciamos la búsqueda e instalación de software libre de modelado molecular (Gabedit, Tinker, VMD, Gamess), y además organizamos un ciclo de charlas y el primer taller para docentes sobre "Modelado

Actividades		2008	2009	2010	2011	2012
1	Plataforma Linux (Distribuciones Debian y Ubuntu)	■	■	■	■	■
2	Software libre de Modelado Molecular	■	■	■	■	■
3	Ciclo de charlas	■	■			
4	Taller para docentes		■			
5	Talleres para estudiantes		■	■	■	
6	Modificaciones curriculares (Materia optativas y Químicas básicas)			■	■	■
7	Material de apoyo docente			■	■	■
8	Expo Carreras UNL 2010			■		
9	Seminario interno docentes Informática				■	
10	Modificación curricular (Gabedit en Informática)				■	■
11	Seminario interno para docentes FIQ				■	
12	Taller para docentes preuniversitarios				■	
13	Taller para alumnos ingresantes FIQ					■

Fig. 2: Detalle de las actividades desarrolladas por año.

Molecular y Software Libre”. Durante 2009 comenzamos la realización de talleres para estudiantes con modalidad teórico-práctica en gabinete informático, presentamos una modificación en la planificación de una cátedra incluyendo el uso de software de modelado molecular y logramos la instalación de doble booteo en todos los gabinetes.

En el primer cuatrimestre de 2010 se aprobó la modificación curricular propuesta, dictándose por primera vez el TP: “Visualización y Modelado Molecular” en la asignatura Química Inorgánica de la carrera Licenciatura en Química, usando el software Gabedit (9) instalado sobre ambas plataformas. También se realizó un taller con alumnos de Química Orgánica de la misma carrera, siendo ambas asignaturas del tercio inicial. Todas estas actividades ya han sido comunicadas en un evento académico (10). Posteriormente, se desarrolló material de apoyo docente para la

asignatura optativa “Residuos Contaminantes de Alimentos” de la carrera de Licenciatura en Química, obteniéndose modelos mecánicos y digitales de los 209 congéneres de la familia de bifenilos policlorados (11).

El software libre Gabedit, una oportunidad.

La experiencia durante 2010 nos condujo a concentrar el interés en el software Gabedit, interfaz gráfica de código abierto que puede realizar una variedad de cálculos incluyendo soporte a la mayoría de los formatos de archivos de moléculas (12). El avanzado "Constructor de Moléculas" permite un rápido bosquejo de moléculas, examinarlas en 3D y guardarlas en varios formatos. Dispone de herramientas para editar, visualizar, renderizar, analizar, convertir y animar moléculas. La última versión estable a la fecha es la 2.3.5. Algunas de las herramientas disponibles en el

Gabedit útiles para su uso como editor de moléculas son:

§ Posee una librería interna con unas 380 moléculas clasificadas en 10 categorías: grupos funcionales, anillos, heterocíclicos, hidrocarburos, drogas, fullerenos, aminoácidos (L), aminoácidos (D), agentes antivirales, y misceláneas.

§ Crea librerías de moléculas de usuario agregadas a la librería interna.

§ Lee y graba archivos en formato propio y en varios formatos de software de química computacional: Gamess-US, Gaussian, HyperChem, Molcas, Molpro, MPQC, Open Mopac, Orca, PC Gamess, Q-Chem y otros.

§ Lee y graba archivos con formato pdb (Protein Data Bank) lo que permite visualizar gran cantidad de archivos alojados en repositorios en internet.

§ Asistente Build para construir rápida y

facilmente moléculas lineales, en anillo, con un eje de simetría, polipéptidos, ácidos polinucleicos, polisacáridos y nanotubos.

§ Ventana de dibujo con sencillas y potentes herramientas para construir moléculas, con distintas opciones de visualización y renderización. (Fig. 3)

§ Panel de mediciones de parámetros conformacionales: distancias de enlaces, ángulos y ángulos diedros. (Fig. 4)

§ Editor XYZ que muestra las coordenadas de los centros atómicos y admite el ingreso o la modificación directa de valores (Fig. 4)

§ Genera archivos pdf y jpg de las moléculas visualizadas en la ventana de dibujo (Fig. 5).

Además de todas estas herramientas útiles para la visualización en 3D, el Gabedit puede calcular la energía de moléculas, optimizar estructuras químicas y realizar muchos otros cálculos de química computacional.

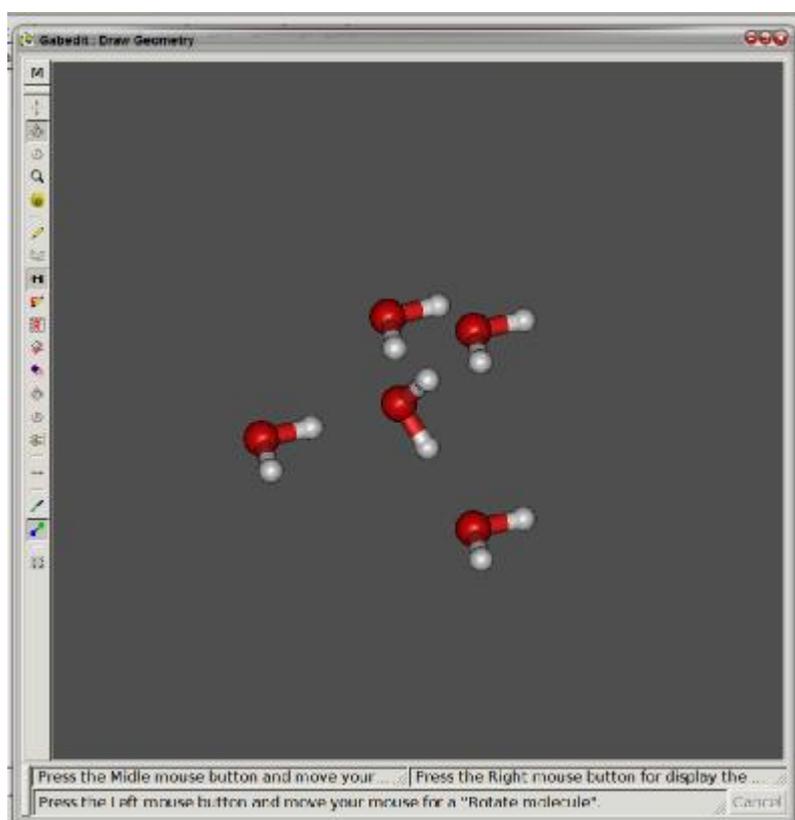


Fig. 3: Ventana de dibujo del Gabedit mostrando moléculas de agua en disposición tetrahédrica.

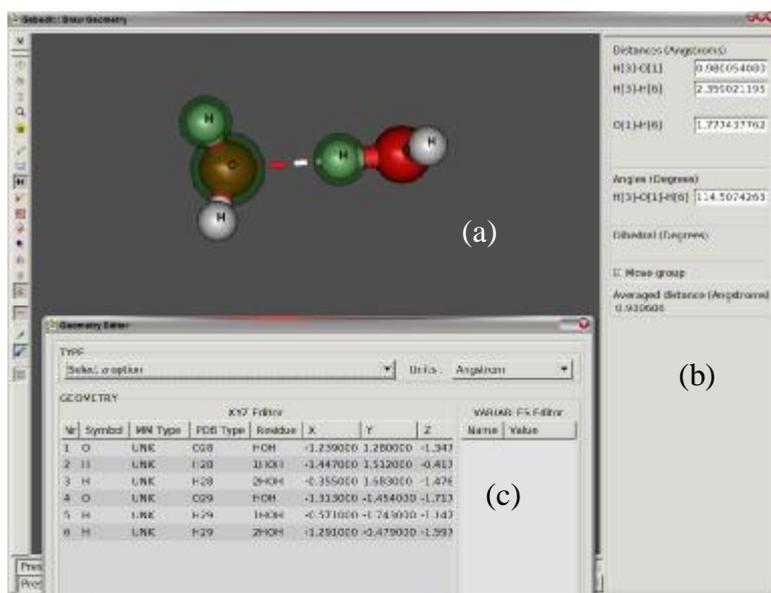


Fig. 4: Gabedit. a) Ventana de dibujo; b) Panel de mediciones; c) Editor XYZ.

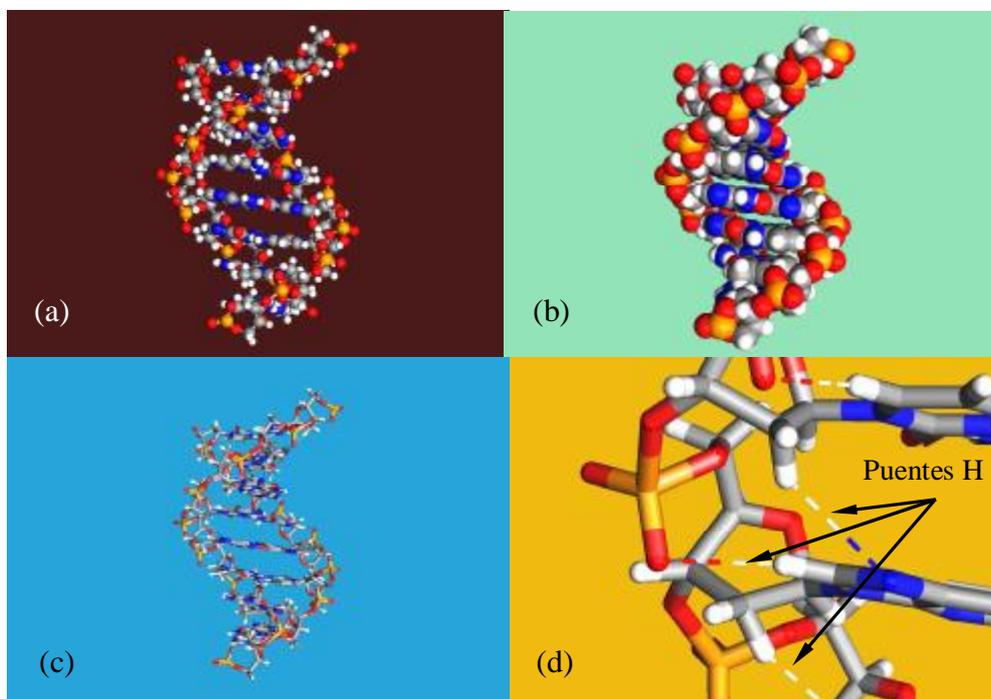


Fig. 5: Gabedit. Imágenes capturadas de modelos de ADN con distintas renderizaciones. (a) (b) Bolas y palitos; (c) (d) Palitos.

Últimos Avances

Desde mediados de 2010 a la fecha hemos continuado en el desarrollo de varias actividades: a) mantenimiento y actualización del software instalado en los gabinetes, particularmente de las distribuciones Debian y Ubuntu, y el software Gabedit; b) dictado de las actualizaciones curriculares en las asignaturas optativas y las químicas básicas; c) colaboraciones para generación de material de apoyo docente, tal es el caso de los modelos de macropolímeros naturales de la pared fibrosa para la asignaturas optativas que se dictan en el Instituto de Tecnología Celulósica, d) colaboración con la FIQ en la preparación de material para presentar en la Expo Carreras 2010, instalando software de visualización molecular en una notebook con acceso a base de datos de modelos moleculares disponibles en internet, para realizar demostraciones a los aspirantes al ingreso a la UNL.

Destacamos que en las conclusiones del trabajo previamente citado (10), reafirmamos nuestra opinión favorable a una rápida incorporación de TICs de modelado molecular en el pregrado y el inicio de las carreras de grado, con el respaldo de planes institucionales y aprovechando las oportunidades del software libre.

Con esta convicción en 2011 propusimos iniciativas que están en ejecución y se vislumbran como relevantes logros: la inclusión del software Gabedit en la asignatura Informática que se dicta a ingresantes de todas las carreras de la FIQ, para lo cual organizamos para los docentes de la cátedra, el seminario interno "Gabedit: un editor libre de moléculas en 3D", exitosamente desarrollado. Para la primera quincena de mayo, está planificado el dictado de una clase en las seis comisiones de la asignatura. Por razones de disponibilidad en infraestructura, la asignatura Informática se dicta para la mitad de las carreras en el primer cuatrimestre y la otra mitad lo hace en el segundo cuatrimestre. Esto ha llevado al Consejo Directivo de la FIQ, a analizar y discutir la posibilidad de implementar dos acciones complementarias: la

realización de un Taller en la cuarta semana del primer cuatrimestre para todos los estudiantes ingresantes de la FIQ y el dictado de un seminario interno para los docentes de la FIQ del área Química.

Por último hemos propuesto, en el marco de actividades organizadas para celebrar el Año Internacional de la Química, la realización de un Taller para docentes preuniversitarios, iniciativa que está en la etapa preliminar de organización y que se efectivizaría a mediados de año.

Discusión

La incorporación de TICs en todas las actividades humanas se ha transformado en una necesidad permanente y alcanza niveles de desafío impostergable en ámbitos públicos, en particular en las universidades nacionales y otras instituciones científicas y técnicas (13).

Los recursos humanos que se desempeñan en estos ámbitos presentan la fortaleza de ser altamente calificados, pero a la vez subsiste en un segmento importante las debilidades derivadas del hecho de que estas TICs no son herramientas adquiridas durante su formación de grado o posgrado, lo que induce en muchos casos a actitudes reticentes frente a la incorporación de TICs.

Esto contrasta con la actitud de los estudiantes, que son el estamento más dinámico, muchas veces con expectativas no satisfechas y que cuando se los convoca a participar activamente, se transforman en la fuerza impulsora necesaria para hacer posible los cambios necesarios (7).

La incorporación de TICs en el ámbito estatal requiere la aplicación de políticas tendientes a lograr el involucramiento del personal (8) y su conjugación con la formación y promoción de jóvenes recursos humanos, configuran una estrategia con altas posibilidades de éxito.

Conclusiones

Los resultados alcanzados y las acciones planificadas y en desarrollo, respaldan nuestra opinión de que es posible la rápida incorporación de TICs de Visualización y

Modelado Molecular en el inicio de las carreras de grado, e incluso en el pregrado de las escuelas técnicas dependientes de la UNL, aprovechando las oportunidades que ofrece el software libre.

Estas posibilidades deberían ser potenciadas con planes institucionales a nivel de la UNL que promuevan decidida y efectivamente el uso de software libre, y a nivel de la FIQ para

la incorporación y uso de software de visualización y modelado molecular.

Esperamos concretar durante el presente año la inclusión del Gabedit, un software de Visualización y Modelado Molecular, en los contenidos iniciales de las currículas de todas las carreras de la FIQ, sentando las condiciones para afrontar desafíos de mayor envergadura en el área de la docencia relacionada a la Química Computacional.

AGRADECIMIENTOS

A la Universidad Nacional del Litoral por el financiamiento a través de la Convocatoria CAI+D 2009 y a Guillermo Hang por el soporte técnico en gabinete informático.

REFERENCIAS

1. Watson, J.D. and Crick, F.H.C. (1953.a). *Molecular structure of nucleic acids. A structure for deoxyribose nucleic acid*. Nature N° 4356, April 25, pag. 737-738 .
Disponible en <http://www.nature.com/nature/dna50/watsoncrick.pdf>
2. Watson, J.D. and Crick, F.H.C. (1953.b). *Original DNA demonstrations model*. Cold Spring Harbor Laboratory Archives. Imagen disponible en <http://hmaloy.wikispaces.com/DNA>
3. T.E.S.A. (2010). *Tecnología Educativa S.A. Modelos moleculares*.
<http://www.tecnoedu.com/Modelos/MMO.php>
4. RELAQ: Red Latinoamericana de Química. *Software Química*.
<http://www.relaq.mx/RLQ/software.html>
5. Universidad Nacional del Litoral. *Resolución Consejo Superior UNL "C.S." 8-27/3/2003*. "ARTICULO 1º: Adoptar como política institucional la utilización del Software Libre en el ámbito de la Universidad Nacional del Litoral".
6. Sferco, S.J. y Garay S.A. (2011). *Curso Modelado Molecular*. Departamento de Física, FBCB, UNL.
<http://www.fcb.unl.edu.ar/dfbioq/index.php/materias-y-cursos/modelado-molecular>
7. Marzocchi, V.A. (2009). *Visualización y Modelado Molecular de Macropolímeros Orgánicos de Interés Industrial*. Proyecto de Investigación PI:56-273. Convocatoria CAI+D 2009, UNL.
http://www.unl.edu.ar/eje/8/Convocatoria_2009_.html
8. Courault, G.A. (2011). *Blog de Gustavo Courault*. http://www.courault.com.ar/?page_id=2
9. Allouche, A.R. (2011). *Gabedit-A graphical user interface for computational chemistry softwares*. Journal of Computational Chemistry: 32, 174–182.

10. Marzocchi, V.A.; Cagnola, E.; D'Amato, M.A.; Vanzetti, N. y Leonarduzzi, R. (2010). *Las TICs en la enseñanza de la Química: Una experiencia con software libre de visualización y Modelado Molecular*. FABICIB, Volumen 14, Suplemento 1, Santa Fe, Argentina. (ISSN 0329-5559).
http://bibliotecavirtual.unl.edu.ar:8180/publicaciones/bitstream/1/2960/1/FABICIB_14_2010_suplemento_pag_40_45.pdf
11. Marzocchi, V.A.; Beldoménico, H.R. y Vanzetti, N.A. (2011). *Bifenilos policlorados: relación entre estructura química, parámetros conformacionales y toxicidad efecto-dioxina*. Aceptado para su publicación en *Avances en Ciencias e Ingeniería*: 2 (4), octubre-diciembre. La Serena, Chile.
12. Allouche, A.R. *What is Gabedit?* <http://gabedit.sourceforge.net/>
13. Libro Blanco de la Prospectiva TIC: Proyecto 2020. (2009). .Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva. Buenos Aires, Argentina.