

# Propuesta de enseñanza para la Fisicoquímica Computacional y Modelización Molecular en tercer año de Polimodal.

Villagra Susana<sup>1</sup>, Guidugli Silvina.<sup>2</sup> y Masman Marcelo<sup>1</sup>

- (1) Dpto. de Química, Bioquímica y Farmacia, UNSL.
- (2) Escuela Normal J.P.Pringles, UNSL, Dpto. de Física, Fac. de Cs. Fís.-Mat. y Naturales, UNSL - Ejército de los Andes 950 – 5700 – San Luis

[villagr@unsl.edu.ar](mailto:villagr@unsl.edu.ar)

## RESUMEN

Este trabajo es parte de una investigación sobre mejoramiento de la enseñanza de la químico-física realizada durante el presente año con alumnos de 3er año Polimodal, de la escuela Juan Pascual Pringles, dependiente de la Universidad Nacional de San Luis.

Se presentan los resultados preliminares de la experiencia, obtenidos luego de aplicar una nueva propuesta de enseñanza, destinada a la comprensión de la química. Tanto el marco teórico como la metodología empleada constituyen aportes originales al estudio de la química en contextos educativos que eran, hasta el momento, altamente tradicionales. Los logros alcanzados nos hacen seguir con estas estrategias didácticas para que los estudiantes progresen desde esta perspectiva.

**Palabra clave:** Modelos y Simulación en la Enseñanza de las Ciencias; Experiencias concretas de la utilización de TICs en la Enseñanza de las Ciencias.

## INTRODUCCIÓN

Las estrategias didácticas que se utilizan para el mejoramiento de la enseñanza ocupan un lugar muy importante en la enseñanza de la física y de la química y son generalmente puestas a prueba en el aula, en una clase de laboratorio o en un práctico de aula, siendo estos los lugares de realización de las actividades científicas. Una de las herramientas que se puede usar es la computadora. Por ello es de vital importancia que la enseñanza de las ciencias se vincule fuertemente a las tecnologías computacionales con las que todos los adolescentes de hoy están altamente familiarizados.

En el campo de la fisicoquímica, son bienvenidas las representaciones que ayuden a entender la estructura de la materia, más aún cuando en términos coloquiales se puede inferir en la información general, temas complejos como genoma humano, DNA, transgénesis, sin tener un mero indicio de los enlaces básicos entre átomos para formar el universo en el que nos movemos.

Esta experiencia apunta a mostrar otra aplicación de las ciencias fisicoquímicas con un gran impacto en el campo de las investigaciones de alto nivel, reconocida como fisicoquímica teórica o química computacional, que cumple la función de brindar el fundamento académico a la ciencia puramente experimental.

A comienzo del año lectivo 2005 se tomó un diagnóstico inicial (pre-test) y se encontró que el rendimiento colectivo de los alumnos era muy bajo en química. Como la instrucción del año anterior (segundo año Polimodal) fue realizada bajo similares condiciones (igual profesor, cantidad de alumnos, distribución por género), se decidió llevar adelante esta experiencia re-estructurando la enseñanza que se abordaría.

Las causas del bajo rendimiento de los alumnos se estimó que eran múltiples y que resultaría

complicado abordarlas todas a la vez. En general el aprendizaje está condicionado por lo que los alumnos *saben* (ideas previas), *creen* (concepciones epistemológicas) y *creen que saben* (metacognición). Cada una de ellas es de suma importancia ya que (Otero, 2000):

- ✓ Los posibles efectos de las experiencias escolares sobre el desarrollo personal del alumno están condicionados en gran medida por *los conocimientos previos* pertinentes con los que llega a la instrucción. El alumno que inicia un nuevo aprendizaje escolar lo hace siempre a partir de los conceptos, concepciones, representaciones y conocimientos que ha construido en el curso de sus experiencias previas (conocimientos de origen no perceptivo), utilizándolos como instrumentos de lectura y de interpretación del nuevo material y que condicionan en un alto grado el resultado del nuevo aprendizaje.
- ✓ Los alumnos no solamente tienen ideas previas sobre los conocimientos sino que también mantienen concepciones y creencias propias sobre la naturaleza de la ciencia y del conocimiento científico y, además, sobre sus propios procesos y productos del aprendizaje, esto es, los alumnos tienen sus propias concepciones epistemológicas
- ✓ La metacognición se refiere a: i) conocimientos propios sobre procesos y productos cognitivos; ii) conocimientos sobre información, datos relevantes para el aprendizaje o cualquier cosa relacionada con los procesos y productos cognitivos. Hablamos de la metacognición cuando, por ejemplo, nos referimos al conocimiento que tiene el que aprende sobre problemas y dificultades para asimilar determinado contenido, sobre los procedimientos cognitivos adecuados para desarrollar una tarea, sobre la aplicación de recursos de comprensión, estrategias de procesamiento, etc..

Siguiendo a Pozo (1987) se puede afirmar que éstos elementos conforman una especie de “conspiración cognitiva” contra el trabajo del profesor y constituyen obstáculos que dificultan enormemente el aprendizaje significativo por parte de los alumnos.

Por ello de esta vasta problemática en la adquisición de conocimientos, en el presente trabajo se aborda el problema planteado teniendo en cuenta la estrecha vinculación con la tecnología computacional, de las matemáticas, la física, la química y la biología, en pos de ayudar a dilucidar el complejo mundo viviente.

## MÉTODOS Y CÁLCULOS

Se trabajó con programas de modelado molecular (paquete Hyper Chem), mostrando aplicaciones básicas del grupo de programas. La tarea se realizó mediante un soporte tutorial de enseñanza básica de manejo de las principales funciones del paquete, intentando además incorporar nociones de distancias interatómicas en la estructura molecular, disposición en el espacio de los átomos que las forman las moléculas con medición de ángulos de enlaces y ángulos diedros, con el fin de encontrar una conformación de menor energía, razón de la estabilización de las moléculas y por ende, de las a veces caprichosas conformaciones que adoptan por ejemplo, proteínas y macromoléculas de los seres vivos.

El grupo de trabajo contaba con una somera información básica sobre estructuras proteínicas como resultado de sus pasos por materias como biología y con una formación química que comprende aspectos elementales de compuestos químicos inorgánicos y orgánicos, estudio de reacciones químicas, características generales de compuestos orgánicos y su importancia, estructura básica de distribución espacial, hibridación, formulación de enlaces y demás conceptos mínimos como para abordar la temática desde la visualización computacional.

Se diseñó un tutorial para ser aplicado en la parte práctica, de manera de indicar paso a paso las mínimas funciones del programa a trabajar (Hyperchem 7.1 Standard)

Se incorporaron definiciones básicas de coordenadas a utilizar por el paquete Hyperchem, así como nociones elementales sobre términos utilizados habitualmente en química computacional (conformaciones, configuraciones, coordenadas moleculares, cartesianas e internas, energías, etc..)

### ***Objetivos docentes***

Con la aplicación de métodos computacionales para el diseño molecular se pretende que los alumnos incorporen conceptos fundamentales de la química para el diseño de compuestos de interés químico y farmacéutico que son importantes para continuar con sus estudios superiores.

Es así que teniendo en cuenta lo anterior se pretende que los alumnos:

- Conozcan al menos el grupo de programas del paquete Hyperchem, para el diseño molecular en química computacional (físicoquímica teórica).
- Diseñen moléculas simples utilizando las herramientas del paquete Hyperchem.
- Utilicen las herramientas del programa para determinar longitudes de enlace, ángulos internos y ángulos diedros.
- Determinen energías mínimas que justifican la disposición espacial de ciertas moléculas orgánicas.
- Visualicen una base de datos donde se muestran las conformaciones preferenciales de macromoléculas como DNA, RNA, proteínas, etc.
- Incorporen situaciones prácticas donde las técnicas de química computacional pueden dar respuestas útiles.
- Se inicien en las técnicas de modelado molecular, dotándolos de los conocimientos básicos de informática que necesitan para utilizar las técnicas de química computacional en la práctica y que son peculiares de este campo.

El proceso de aprendizaje fue controlado mediante pruebas de respuestas múltiples surgidos de la investigación en enseñanza de la química, permitiendo resaltar algunos de los conceptos erróneos y las dificultades características del lenguaje que los alumnos poseen.

## **DESARROLLO**

### ***El aprendizaje***

La propuesta de enseñanza tiene varios aspectos principales: la estrategia seguida para el aprendizaje de la química computacional y el contexto en el cual se propone enseñar. La estrategia educativa presupone que el conocimiento se construye en cada alumno partir de sus experiencias previas y las que le propone la instrucción. Se trabajó en la medida de lo posible con ejemplos y modelos moleculares para la mejor visualización de los alumnos de las características geométricas y física de las mismas. Los alumnos debían con los modelos provistos comparar las nuevas experiencias con sus ideas previas y resolver las contradicciones que aparecían.

En cuanto a la instancia a trabajar con el tutorial, es considerado el momento del proceso educativo en el que se realiza el ideal de la enseñanza grupal-individual mediante el diálogo-discusión directo del grupo y con el profesor. Para los estudiantes, el tutorial les permite consultar sus dudas al grupo, la forma en resolver los problemas planteados, comunicar a sus pares su visión particular de los distintos aspectos del proceso educativo. Para el profesor es una fuente de información de primer orden, para conocer las dificultades de las diferentes partes de la instrucción

y el grado de asimilación de las mismas. El aspecto más relevante del tutorial aplicado fue la conjunción de los conceptos previos-conceptos nuevos aplicados a la química computacional.

### **Metodología**

La tarea de desarrollar y aplicar material curricular de química computacional en el tercer año de escolarización (último de la educación Polimodal, para alumnos de aproximadamente 17 años de edad) fue realizada por docentes del Departamento de Física y Química de la Universidad Nacional de San Luis, en la Escuela que depende de ella.

Las diversas actividades estudiantiles planificadas y elaboradas, fueron desarrolladas en una división del Bachiller Científico. La división tenía dos módulos y medio semanales de 80 minutos cada módulo, desarrollando sus actividades en el aula y en el aula de computación de la universidad. La población era de 29 alumnos.

El aprendizaje fue evaluado a través de tareas personales y grupales y mediante una prueba diagnóstica que los alumnos tomaron al comienzo y al final de la instrucción. Un diagnóstico de seis preguntas de respuestas múltiples fue elaborado en base a los contenidos dados por el profesor del curso. Estas preguntas también son utilizadas en diagnosticar conocimientos y aprendizaje en alumnos de primer año de la universidad. Estas preguntas tiene por objetivos principales los siguientes:

<b>Pregunta N°</b>	<b>Objetivo</b>
<b>1</b>	Seleccionar la distribución espacial de una molécula a partir de varias representaciones
<b>2</b>	Reconocer las características espaciales de las moléculas orgánicas
<b>3</b>	Seleccionar una descripción textual del término <i>mecánica molecular</i>
<b>4</b>	Identificar diferentes isómeros en hidrocarburos
<b>5</b>	Reconocer parámetros de la Energía de activación de un compuesto químico
<b>6</b>	Determinar características de la química computacional

El diagnóstico fue administrado al comienzo (pre-test) y al final de la experiencia (post-test).

En una primera etapa, se implementó un marco teórico acerca de la química computacional, su desarrollo, aplicaciones y ámbito de trabajo. En ese contexto, se mostraron conceptos realizados en Power Point, (herramienta de Microsoft Office) donde se visualizaron diseños moleculares, su estudio y aplicación con los programas de modelado molecular y cálculos conformacionales.

Esta presentación permitió introducir una serie de conceptos básicos, así como generar un intercambio de conocimientos y una idea general del trabajo que se implementaría con las computadoras como soporte principal de la fisicoquímica.

En ese marco se recuperaron con los estudiantes, conocimientos físicos, matemáticos, químicos y biológicos, básicos para poder interpretar el trabajo a realizar con el paquete Hyperchem.

En una primera clase práctica, se instruyó básicamente en lo que hace a aprender a conectarse con la maquina desde una terminal remota e iniciar una sesión, como así también a reconocer las características, elementos y funciones del programa base del Hyperchem. Se desarrolló ésta y las prácticas sucesivas, en el aula de informática de la Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia de la Universidad Nacional de San Luis, que cuenta con alrededor de veinte computadoras conectadas en red.

Se permitió a los estudiantes, familiarizarse con el programa, induciéndolos a trabajar intuitivamente para reconocer elementos básicos del paquete, e ir descubriendo casi accidentalmente, algunas funciones importantes que posteriormente aplicarían con conocimientos explícitos.

A posteriori, se desarrolló paso a paso el tutorial con el que contaban los alumnos, de manera de ir desarrollando en forma secuencial, la tarea objeto del trabajo.

Los alumnos valoraron los datos, dudas, novedades y aprendizajes, en una guía soporte que también fue realizada por el equipo de docentes a cargo del trabajo.

El análisis de los datos y los cálculos corroborativos, fueron realizados en el aula, de manera de interactuar también con los esquemas realizados por el alumnado, la interpretación de datos, la evaluación de los resultados y las modificaciones a tener en cuenta para salvar posibles errores.

Una vez aplicado el tutorial en su totalidad, se instruyó a los estudiantes para que propusieran moléculas a trabajar, diseñando así desde la formación de enlaces simples, múltiples, valores angulares posibles o sugeribles, disposición espacial de compuestos químicos de interés y cálculos de energías mínimas y de transición por métodos de mecánica molecular, semiempíricos y mecánica clásica.

## RESULTADOS Y CONCLUSIONES

En la siguiente tabla se informan los resultados del pre y post test. Se puede apreciar que el conocimiento inicial es muy bajo, mientras que el estado final es muy satisfactorio.

<b>Pre Test</b>	11	25	7	29	43	46
<b>Post Test</b>	46	79	25	93	75	93

Para una más fácil visualización, los valores anteriores se han representado gráficamente en la figura 1.

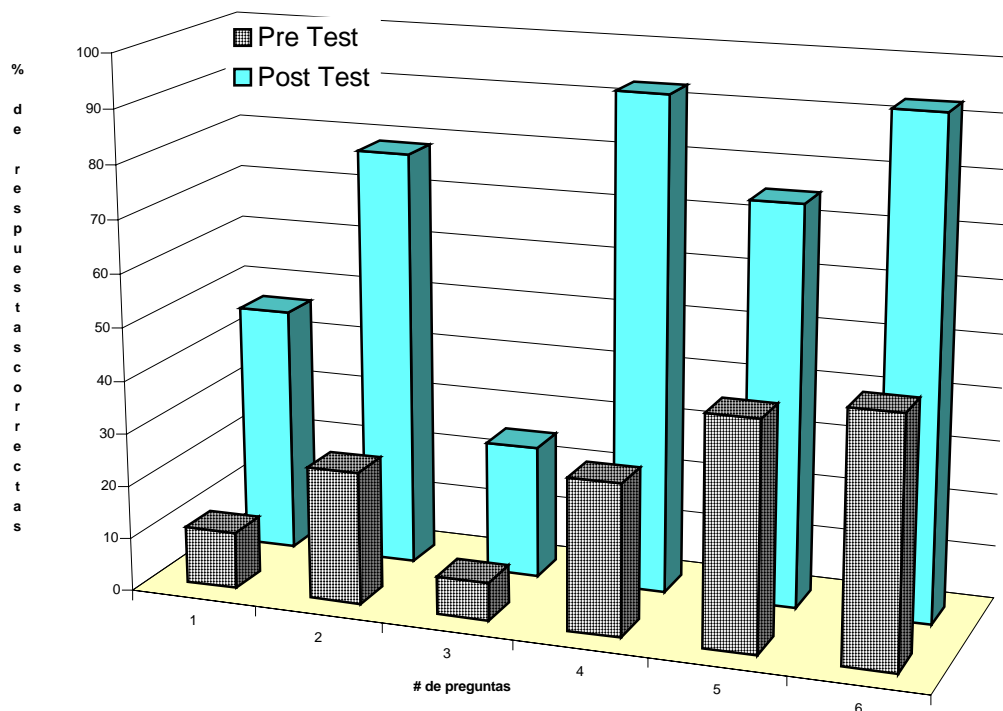


Figura 1: Resultados del diagnóstico tomado Pre y Post instrucción.

Los resultados preliminares de este estudio nos muestra que las dificultades que mostraron lo alumnos en el pre test fueron ampliamente superadas.

En primer lugar la realización de representaciones moleculares, demandan la activación de conceptos aprendidos. No actúan como meros estímulos o modos para incorporar información, sino que su resolución, demanda de procesos cognitivos que se desarrollan en sujetos activos, responsables de su aprendizaje. Tal como decía Piaget, J.(1969) : “...es necesario complementar lo que se ve con lo que se sabe...”.

Observamos que:

- a) los alumnos mostraron mucho interés en aprender el manejo de programas que se les propuso
- b) al diseñar las moléculas (algunas propuestas por los docentes y otras por los alumnos) los estudiantes mostraron alto grado de responsabilidad y aplicación al tener que determinar las longitudes de los enlaces, ángulos diedros, ángulos internos, etc.
- c) luego de determinar e interpretar las energías mínimas de algunas moléculas orgánicas, buscaron datos donde se mostraban las conformaciones preferenciales de macromolécula de gran interés como el DNA y proteínas.

Las dificultades características de aprendizaje de los conceptos de química aparecieron con un alto porcentaje en los distintos items y opciones del pre test, indicando el nivel de dificultad de la población. Al final de la instrucción (post test) aproximadamente un 54% de los alumnos confunde todavía la representación espacial de la molécula mientras que un 11% no sabe reconocer las características espaciales de las mismas. Un 75% presentan dificultad para caracterizar al término mecánica molecular, creyendo la mayoría de los alumnos que se trata de una distribución aerodinámica de los átomos en una molécula.

Los errores y correcciones realizadas internamente por cada grupo de trabajo fueron fruto de las posibilidades reales de aprendizaje y nos estarían indicando los sistemas de interpretación posibles que el alumno ha construido. Señalarían el tiempo lógico de aprendizaje propio de cada alumno, que no siempre coincide con lo planteado en la organización curricular.

Por lo que se ha de tender a una cuidadosa secuenciación del desarrollo psicológico del alumno tanto en el aspecto de sus actitudes hacia las ciencias (sino se quiere aprender ciencia, no se aprende ciencia), como en el desarrollo y complejificación de sus estructuras cognoscitivas (si no hay conocimientos previos de requisito no pueden aprenderse nuevos conocimientos significativos). Estos cuidados se habrán de concretar en el planteamiento y desarrollo de las actividades de enseñanza y de aprendizaje curriculares.

El desafío entonces, desde la enseñanza para nosotros fue realizar un cambio conceptual basado en estrategias que consideren el conflicto cognitivo de los alumnos en contraste con la enseñanza tradicional a que estaban acostumbrados.

## Bibliografía

- 1.- OTERO, J.C. y CAMPANARIO J.M., (2000), *Más allá de la ideas previas como dificultades de aprendizaje: las pautas del pensamiento, las concepciones epistemológicas y las estrategias metacognitivas de los alumnos de ciencias; Enseñanza de la Ciencia, 18 N°2, pp. 155-169,*
- 2.- PIAGET, J. , (1969), (1987), “*Tratado de lógica y conocimiento científico*”. Buenos Aires. Paidós.
- 3 .- POZO, J.I., (1987) *La historia se repite: las concepciones espontáneas sobre el movimiento y la gravedad. Infancia y Aprendizaje., 38, pp. 69-87.*
- 4.- Hyperchem 7.1 Standard-
- 5.-FONTARELLANO, M. Y ROMERO CUEVAS, M., *Manual y Tutorial de “ Prácticas de química computacional aplicada durante 2003-20004” , Fac. de Farmacia- Universidad de Navarra- España.*