

Empleo de simuladores *Odyssey* y *Spartan* en la enseñanza de la Química Orgánica

María Esther Sara Del Rey y Leñero, Raquel Enríquez García,
Laura Jannet Caballero Martínez, Olivia Anaya de Anda y
Laura Aída Sánchez Ortega.

Colegio de Química. ENP 8 Miguel E. Schulz

Introducción

Los modelos moleculares son ampliamente utilizados en la enseñanza de la Química, ya que permiten visualizar la estructura de las moléculas y con ello comprender la Química de éstas. Desde hace tiempo se han empleado modelos hechos de diversos materiales como unicel, malvaviscos o gomitas, además de los modelos moleculares se cuenta con la tecnología computacional de algunos programas de simulación molecular como *Odyssey* y *Spartan* con los cuales se pueden construir moléculas, rotarlas, visualizarlas, ilustrar tanto modelos de bolas y varillas como representaciones de llenado espacial y, en algunos casos, es posible simular reacciones orgánicas. En la ENP, plantel 8 un grupo de profesores estamos trabajando con el uso de simuladores moleculares como herramienta de enseñanza.

Debido a que la Química Orgánica es una ciencia tridimensional, con frecuencia es crítica la forma para determinar la química que experimenta un compuesto, por tanto aprender a visualizar las formas de las moléculas es una habilidad importante que hay que desarrollar.

Para la enseñanza de temas de Química Orgánica como tipos de enlace carbono-carbono, isomería, grupos funcionales, el uso del programa *Spartan* resultó muy favorable y de gran aceptación por parte de los alumnos, a quienes posteriormente a las actividades mediante el uso de este programa, se les solicitó que respondieran un cuestionario el cual se analiza en el presente trabajo, además de las actividades realizadas.

Objetivo

Describir la técnica del empleo de simuladores moleculares *Odyssey* y *Spartan* en el estudio de estructuras moleculares en la enseñanza de temas de Química Orgánica.

Descripción de la experiencia














La utilización intensiva de la computadora ha transformado la actividad docente y científica. Gracias a la disponibilidad de computadoras de alta potencia y costo relativamente bajo, el uso de programas para construir modelos moleculares se ha hecho común. Aunque la pantalla de la computadora es bidimensional, los dibujos en perspectiva obtenidos de los programas de modelos moleculares suelen ser bastante exactos, la mayoría de los programas ofrece la opción de hacer girar las moléculas con el fin de permitir que la persona observe la estructura desde cualquier ángulo deseado.

Existen varios programas de simulación molecular como *CAChe/fujitsu*, *Rasmol*, *Odyssey Spartan*, este último fue el que se utilizó en la integración de temas de Química Orgánica, debido a que fue el que se pudo obtener con mayor facilidad y posteriormente instalarse en el laboratorio LACE de cómputo del plantel, con lo cual se ponía a disposición de profesores y estudiantes.

A lo largo de los cursos de Química se hacen prácticas relacionadas con los temas que se encuentran en el programa de estudios de la ENP, dentro de las prácticas que se realizan en la parte de química orgánica está “Hibridación del átomo de carbono” en donde los alumnos construyen modelos moleculares con diferentes materiales (palillos, esferas de unicel o gomas), para observar la geometría de diferentes moléculas orgánicas, esta práctica resulta muy importante, ya que en la mayoría de los casos es la primera simulación de los alumnos a la forma tridimensional de las moléculas, puesto que están y estamos muy acostumbrados a representar y observar las moléculas en una sola dimensión.

Para integrar los temas de hibridación del átomo de carbono, tipos de enlaces carbono-carbono, grupos funcionales, nomenclatura, estructura, isomería, además de las prácticas experimentales al final de la revisión de éstos se realizó una práctica computacional en el laboratorio LACE de cómputo del plantel utilizando el programa de simulación molecular *Spartan*.

Procedimiento

- Antes de comenzar con el manejo de la computadora se dirigen algunas instrucciones a los alumnos sobre el manejo del programa, el cual es muy sencillo.
 - Posteriormente con ayuda de un proyector se les da una introducción acerca de lo principal de los temas que se abordarán.
 - Las diferentes propiedades físicas y químicas de las moléculas orgánicas se deben a los diferentes grupos funcionales.
 - Dependiendo del tipo de hibridación de los átomos de cada molécula será la geometría, con frecuencia la forma de la molécula es primordial ayudando a predecir propiedades y reactividad de los compuestos orgánicos. Las moléculas no son planas.
-
-  Construye la molécula del metano
 -  Construye la molécula del eteno
 -  Construye la molécula del etino
 -  Rota las moléculas e indica el tipo de geometría que presenta cada una de ellas
 -  Construye la molécula del n-hexano
 -  Construye la molécula del 2,3-dimetilbutano.
 -  Escribe su fórmula condensada
 -  Compáralas e indica qué tienen en común
 -  ¿Cuál es la diferencia entre ellas?
 -  ¿Cómo se les llama a los compuestos que presentan esta característica?
 -  Construye la molécula del 2-buteno.
 -  ¿Qué isómero geométrico construiste?
 -  Construye el isómero geométrico faltante. Indica el tipo hibridación de los átomos de carbono y la geometría que presenta.

Otra característica que nos ayuda a predecir la química de un compuesto es el grupo funcional que está presente en su estructura, el cual corresponde a un átomo o grupo de átomos responsable del comportamiento químico y de las propiedades físicas de la molécula.

En la siguiente etapa haremos una representación de la molécula de adrenalina la cual es una hormona secretada en situaciones de alerta.

- Aumenta el ritmo cardíaco
- Aumenta la respiración.
- Puede estimular al cerebro para que produzca dopamina, hormona responsable de la sensación de bienestar, pudiendo crear adicción.

Cada una de las preguntas anteriores fue contestada por los alumnos, en donde observamos que la mayoría de las respuestas fueron adecuadas, ya que esta actividad fue integradora de clases y prácticas experimentales realizadas.

Al final se realizó un cuestionario de evaluación de la actividad, las preguntas fueron las siguientes:

Evaluación de Prácticas utilizando simuladores moleculares.

Nombre alumno: _____

- 1.- ¿Qué dificultades encontraste en el desarrollo de la actividad?
- 2.- ¿Consideras que el uso de simuladores moleculares te ayudó a comprender mejor los conceptos manejados en esta materia?
¿Por qué?
- 3.- ¿El simulador te presentó una situación parecida a la que habías imaginado? Explica.

Resultados

Entre las respuestas al cuestionario realizado se encontró que para la mayoría de los alumnos fue sencilla la actividad, no hubo problemas en el manejo del programa, les pareció agradable la realización de las moléculas, resaltaron mucho la diferencia de observar estas moléculas en el pizarrón y en el programa en donde pudieron rotarlas y observar este tipo de estructuras y la geometría que presentan de acuerdo a la hibridación de los átomos. En el caso de los isómeros Geométricos entendieron porqué la existencia de éstos y porqué aunque tienen la misma fórmula condensada presentan propiedades diferentes al tener estructuras diferentes.

Algunos comentarios de los alumnos:

“Esta práctica junto con la que habíamos realizado con palillos y bolas de unicel abrió más mi perspectiva sobre cómo son las moléculas”

“Sí hay diferencias entre las moléculas que se pintan en el pizarrón y las que observamos en la computadora”

Conclusiones

- Es necesario plantear los objetivos que se desean alcanzar para realizar una actividad que contenga programas de simulación molecular, además resulta de suma importancia dirigir muy bien la actividad y dar las indicaciones necesarias a los alumnos para que no se vaya a perder el contexto de lo que se desea alcanzar en cada actividad.
- Resultó muy favorable realizar esta actividad después de haber revisado los temas indicados, ya que integró los conocimientos de los alumnos y les abrió su perspectiva sobre la forma tridimensional de las moléculas, lo cual debe irse desarrollando sobre todo por aquellos alumnos que se dirigen a áreas científicas, pues como se ha mencionado antes la forma molecular de los compuestos es determinante en la química que éste presenta en un laboratorio y en los organismos vivos.
- El manejo de programas de simulación computacional pueden aprovecharse en una gran diversidad de actividades del proceso enseñanza-aprendizaje.

Bibliografía y cibergrafía

Kotz John C., Treichel Paul M. Gabriela C. Weaver *Química y reactividad química* 6° ed., 2005, p 84

McMurry J., Química orgánica. Cengage learning editores, 7° ed., 2008, p. 61

Spartan: <http://www.wavefun.com>

Chimera: <http://www.cgl.ucsf.edu/chimera/>;