



educación
Química

www.educacionquimica.info

educación
química

DIDÁCTICA

Implementación de *Avogadro* como visualizador y constructor de moléculas con alumnos de primer año de Odontología en la asignatura Química General y Orgánica

Celia Torres Quezada^a, Patricia Varela Gangas^b, María Verónica Frías^c
y Patricio Flores-Morales^{d,*}

^a Facultad de Ciencias de la Salud, Universidad Arturo Prat, Iquique, Chile

^b Dirección General de Docencia, Universidad Arturo Prat, Iquique, Chile

^c Facultad de Ciencias Empresariales, Universidad Arturo Prat, Iquique, Chile

^d Departamento de Polímeros, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Concepción, Concepción, Chile

Recibido el 30 de junio de 2016; aceptado el 13 de agosto de 2016

PALABRAS CLAVE

Visualizador molecular *Avogadro*; Química; Innovación docente; Tecnologías de la información y la comunicación; Química computacional

KEYWORDS

Avogadro molecular editor; Chemistry; Teaching innovation;

Resumen Los visualizadores moleculares son hoy una realidad cada vez más presente en el aula que permite a los estudiantes desarrollar habilidades de espaciado tridimensional de moléculas. Es por esto que en este estudio se utilizó el visualizador molecular *Avogadro* de libre acceso. El programa no solo permitió que los estudiantes se entrenaran en el desarrollo de la capacidad tridimensional, sino que también lograron determinar más rápidamente la quiralidad de carbonos en moléculas con isómeros ópticos. De hecho, la velocidad de asignación se redujo a la mitad comparada con moléculas bidimensionales. Por otro lado, se concluye que los alumnos son proclives a usar este programa no solo en cursos de química, sino en otros más avanzados. © 2016 Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Química. Este es un artículo Open Access bajo la licencia CC BY-NC-ND (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

Using *Avogadro* as molecular viewer and builder with Odontology first year students in a course of General and Organic Chemistry

Abstract Today, molecular viewers are an undeniable reality in the classroom. This type of softwares allow students the three dimensional development. In this study, free access molecular viewer *Avogadro* was used. The using of the program was successful not only in the three

* Autor para correspondencia.

Correo electrónico: patricio.flores@udec.cl (P. Flores-Morales).

La revisión por pares es responsabilidad de la Universidad Nacional Autónoma de México.

<http://dx.doi.org/10.1016/j.eq.2016.08.004>

0187-893X/© 2016 Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Química. Este es un artículo Open Access bajo la licencia CC BY-NC-ND (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

Cómo citar este artículo: Torres Quezada, C., et al. Implementación de *Avogadro* como visualizador y constructor de moléculas con alumnos de primer año de Odontología en la asignatura Química General y Orgánica. *Educación Química* (2016). <http://dx.doi.org/10.1016/j.eq.2016.08.004>

Information and
communications
technology;
Computational
chemistry

dimensional training, but in the pointing out of carbons' quilarity of optical isomers. In fact, the velocity was reduced to a half part in comparison to bidimensional molecules. On the other hand, students were prone to the usage of *Avogadro* in basic and advanced chemical courses. © 2016 Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Química. This is an open access article under the CC BY-NC-ND license (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

Introducción

Con la aparición de la Química Computacional tempranamente en 1935 (Pauling y Wilson, 1935) y su posterior rápido desarrollo, se dio inicio a una nueva área en la química que demandaba visualizar los átomos y sus enlaces en las moléculas. Los primeros programas computacionales que se diseñaron a comienzos de los 70 (ATMOL, GAUSSIAN, IBMOL y POLYATOM) exigían una interfaz gráfica para visualizar las moléculas. En el caso de GAUSSIAN (Frisch et al., 2009) –único programa de los mencionados que existe hasta hoy–, se llama GAUSSVIEW (Dennington, Keith y Millam, 2009). De esta manera, nuevos visualizadores comenzaron a aparecer en demanda de la necesidad de observar no solo la geometría molecular, sino también sus propiedades electrónicas una vez finalizado el cálculo computacional. Algunos ejemplos de estos visualizadores son: VMD (Humphrey, Dalke y Schulten, 1996), Molden (Schaftenaar y Noordik, 2000), Chimera (Pettersen et al., 2004), Molekel (Varetto, 2012), Spartan (Wavefunction, Inc., 2014), *Avogadro* (Hanwell et al., 2012) y PyMOL (Schrödinger foundation, 2016).

El uso de estos visualizadores moleculares en el aula es un proceso medianamente nuevo (Wegner y Montana, 1993) que comenzó como una necesidad de incorporar nuevas tecnologías para hacer más fácil y atrayente el contenido para los alumnos (Burke, Greenbowe y Windschitl, 1998). Con el paso del tiempo, la creatividad de los desarrolladores para incorporar estas nuevas tecnologías fue desde programas para visualizar pequeñas moléculas (Wu, Krajcik y Soloway, 2001) hasta estructuras más complejas (Canning y Cox, 2001). En Latinoamérica también se han realizado algunas experiencias con visualizadores, y solo por nombrar algunos, son interesantes los trabajos de Marzocchi, Marino, D'Amato y Vanzetti (2012, 2013) y García-Ruiz, Valdez-Velázquez y Gómez-Sandoval (2012). Los primeros ponen de manifiesto que es necesario trabajar con un programa visualizador más estable, aumentar las horas en el aula a la enseñanza del mismo y que esté en idioma castellano, pero que aun así los estudiantes son capaces de asimilar el efecto de la tridimensionalidad. Los segundos realizan un estudio de visualización de moléculas en teléfonos celulares y concluyen que el uso de estos dispositivos es adecuado para la comprensión de moléculas pequeñas dadas las tendencias actuales. También arguyen que debido a que los jóvenes en el estudio son nativos digitales (Mccrindle, 2014) podría ser un recurso educativo que capta la atención de los estudiantes. No obstante, es claro para los autores que el tamaño de las pantallas limita la visión detallada de las moléculas, en

comparación con el mismo programa instalado en un computador de escritorio.

En la enseñanza de la Química Orgánica siempre ha sido natural dibujar estructuras moleculares en 2 dimensiones (2D) para mostrar cómo los átomos se enlazan. Esto hace que cada molécula tenga distintas propiedades físicas y químicas. El siguiente paso en la enseñanza es que el alumno pueda llevar las moléculas desde un plano de 2D a otro en 3 dimensiones (3D).

Para tener la oportunidad de ver moléculas en 3D y de algún modo «tocarlas» es que se inventaron modelos de ensamblaje de átomos de bolas y varillas. Los primeros fueron de madera y luego aparecieron los de plástico (fig. 1).

Esto ayudó mucho a las generaciones anteriores (incluidos estos investigadores) a imaginar las moléculas ocupando un volumen en el espacio. No obstante, estos modelos al ser caros o de difícil acceso no siempre estaban disponibles en las aulas universitarias y se recurría a la plastilina y cerillas para formar las moléculas.

Fue así como para suplir estas necesidades nacieron los visualizadores y constructores moleculares ya mencionados. Esto implicó 2 avances en la enseñanza de la química, el primero fue el acceso gratuito o de bajo costo de estos programas, y el segundo, la habilidad innata que las generaciones posteriores adquirieron con la tecnología y los dispositivos móviles (Mccrindle, 2014). «Antes, los químicos creaban modelos de moléculas recurriendo a bolas y varillas de plástico. Hoy, la modelización se hace por computador», señaló el año 2013 la Real Academia de las Ciencias Sueca al otorgar el Premio Nóbel de Química a Martin Karplus, Michael Levitt y Arieh Warshel.

La visualización de moléculas por medio de programas computacionales es un área que ha sido explorada por Ugliarolo y Muscia (2012), por ejemplo, pero dentro de todos los visualizadores y constructores moleculares que cumplen con las características de estabilidad en un computador y que sean de acceso libre, se encuentra *Avogadro* (Hanwell et al., 2012; de Jong et al., 2013). *Avogadro* (fig. 2) es un constructor y visualizador de moléculas en 3D que es de libre acceso, fácil de usar y fácil de instalar. Existe para los sistemas operativos más comunes; Windows, Mac OS y Linux. Además, se encuentra en idioma castellano e inglés.

Brevemente, el programa posee un menú horizontal de construcción (fig. 2, superior, icono del lápiz) y otro de visualización (fig. 2, esquina superior izquierda). Las moléculas se construyen simplemente clicando sobre el espacio en negro el átomo deseado, y luego arrastrando desde este el segundo átomo para así seguir y obtener la estructura deseada.

Download English Version:

<https://daneshyari.com/en/article/7565045>

Download Persian Version:

<https://daneshyari.com/article/7565045>

[Daneshyari.com](https://daneshyari.com)