



Universidad de Valladolid

EL USO DE LA QUÍMICA COMPUTACIONAL EN EL AULA DE BACHILLERATO

Autora:

SARA GARCÍA MAYO

Tutora:

ANA MARÍA VELASCO SANZ

Facultad de Ciencias

Máster en Profesor de Educación Secundaria Obligatoria y Bachillerato,
Formación Profesional y Enseñanza de Idiomas

Especialidad Física y Química

Junio 2023

Índice general

1. Resumen	1
2. Introducción	3
2.1. Justificación del trabajo	3
2.2. Objetivos	5
3. Contextualización	6
3.1. Contexto educativo	6
3.1.1. Física y Química - 1º Bachillerato	7
3.1.2. Química - 2º Bachillerato	7
3.2. Competencias clave	9
3.3. Objetivos de Desarrollo Sostenible	11
4. Marco teórico	13
4.1. Introducción a la Química Computacional	13
4.1.1. Estructura de la materia. Modelos atómicos	13
4.1.2. Estructura electrónica.	14
4.1.3. Enlace químico	15
4.1.4. Más allá de la TRPEV	16
4.1.5. Química computacional	18
4.2. Experimentación y simulaciones en el aula de Física y Química	18
4.3. Motivación en el alumnado de Física y Química	21
5. Metodología	23
5.1. Metodologías activas	23
5.1.1. Aprendizaje Basado en Problemas	24
5.1.2. Aprendizaje Basado en Proyectos	24

5.1.3.	Aprendizaje colaborativo	24
5.1.4.	<i>Flipped-learning</i> o aula invertida	24
5.2.	La importancia del aprendizaje vivencial	24
6.	Propuesta de implementación en el aula	26
6.1.	Estructura	26
6.2.	Temporalización	27
6.3.	Actividades	27
6.3.1.	Sesión I. El experimento de Rutherford	27
6.3.2.	Sesión II. Tabla periódica. Propiedades atómicas y configuraciones electrónicas	29
6.3.3.	Sesión III. Geometría molecular y la TRPEV	30
6.3.4.	Sesión IV: Visualización de moléculas. Distancias interatómicas . . .	32
6.3.5.	Sesión V: Orbitales moleculares y simetrías	34
6.3.6.	Sesión VI: Cálculo de geometrías	35
6.3.7.	Sesión VII: Estabilidad de una molécula	37
6.3.8.	Sesión VIII. Frecuencias de vibración	40
6.3.9.	Sesión IX: Química orgánica	41
6.4.	Evaluación	44
6.5.	Adaptación a Física y Química de 1º Bachillerato con uso del smartphone .	46
6.6.	Atención a la diversidad	48
7.	Conclusiones y perspectivas	50

Capítulo 1

Resumen

En la enseñanza de la Física y la Química, la experimentación en el aula juega un papel fundamental para que los estudiantes establezcan una relación entre la teoría y el entorno. Sin embargo, esto no siempre es factible, como ocurre en el caso de fenómenos en la escala atómica. Hemos llevado a cabo una propuesta de innovación educativa para introducir el uso de simulaciones en el aula, empleando softwares de Química computacional de alto rendimiento como herramienta para el aprendizaje de la Química en alumnos de Bachillerato. Aprovechando las funcionalidades de estas herramientas, empleadas casi exclusivamente en la investigación, los estudiantes son capaces de calcular y visualizar propiedades de átomos y moléculas en un contexto mecanocuántico, así como de aumentar su motivación al afrontar la asignatura y establecer contacto con las aplicaciones y la relevancia de la Química computacional en la investigación e industria.

Palabras clave: Química computacional, laboratorios virtuales, Bachillerato.

Abstract

When teaching natural sciences, such as Physics and Chemistry, experimentation plays a crucial role in order for the students to establish a link between theory and the reality of their surroundings. However, some experiments are not feasible, as happens with phenomena in the atomic scale. We designed an innovative educational proposal in order to implement the use of simulations in high school education, employing high-performance computational Chemistry packages as a tool for teaching. By making use of their functionalities and capabilities, mainly used in scientific research, we aim to give the students the chance to perform calculations and visualize properties of atoms and molecules within a quantum-mechanical formalism, enhancing their motivation and providing an insight of the state of the art and relevance of computational Chemistry in the context of research and industry.

Key words: computational Chemistry, virtual laboratories, high school

Capítulo 2

Introducción

2.1. Justificación del trabajo

La combinación de clases teóricas y clases prácticas o de laboratorio es un planteamiento fundamental en la enseñanza de la Física y la Química, resultando de gran ayuda a los estudiantes a la hora de comprender los fenómenos abordados de manera teórica en el aula y afianzar conocimientos [1]. Sin embargo, este planteamiento resulta complicado de poner en práctica, debido fundamentalmente a las limitaciones temporales y de recursos, lo que conlleva que el curso académico se centre fundamentalmente en la clase teórica, en detrimento del uso de laboratorios y experimentación, que pasan a un segundo plano o se emplean como recursos muy ocasionales. Esta carencia de experiencias que pongan de manifiesto conocimientos teóricos aplicados provoca que muchos estudiantes no integren los conocimientos y suplan estas carencias recurriendo al aprendizaje memorístico de teorías y conceptos fundamentales de la Física y la Química.

Al abordar el estudio de la Química y la Física en el Bachillerato, encontramos los campos de la mecánica cuántica y la Química atómica y molecular, que resultan especialmente abstractos dentro de la materia por el cambio de paradigma que suponen sus principios [2]. Sumado a esto, las dimensiones nanométricas de los átomos objeto de estudio impiden la realización de experimentos en el aula, por lo que los alumnos carecen de la dimensión experimental que pueda servirles de apoyo a para asimilar los conceptos teóricos involucrados. En este contexto, las herramientas digitales como simulaciones y laboratorios virtuales se presentan como una alternativa de gran utilidad para que el alumno pueda visualizar los átomos, orbitales y enlaces atómicos. Existen numerosos recursos web de uso libre a disposición de docentes y estudiantes. Sin embargo, algunos de ellos se presentan con una

interfaz infantilizada poco atractiva para los adolescentes [3], no profundizan suficientemente en la materia o no proporcionan experiencias de calidad, pues se tratan en realidad de animaciones que dan la sensación de interacción, pero en las que el alumno está limitado a pulsar un botón, no pudiendo variar los parámetros libremente.

Por otra parte, en los últimos años, dentro del ámbito de la investigación científica, los avances en el hardware de los equipos informáticos, así como el desarrollo de softwares de Química cuántica computacional cada vez más sofisticados y optimizados, han supuesto una gran reducción de los tiempos requeridos para realizar simulaciones atómicas de materiales, hasta el punto de poder obtener resultados de alto nivel y precisión para sistemas de varios átomos en apenas unos segundos.

En este trabajo pretendemos aprovechar estas herramientas, que se encuentran, por lo general, alejadas de la enseñanza en institutos, para introducir a los alumnos de Bachillerato al uso de las simulaciones atómicas y modelos mecano-cuánticos avanzados como recurso educativo innovador. Mediante la introducción de estos modelos complejos, adaptados al nivel del alumnado, e incorporando metodologías TIC, pretendemos ampliar la perspectiva de los estudiantes más allá del objetivo de superar la asignatura, provocando un aumento en su motivación en el aprendizaje de la Química [4]. El uso de herramientas de computación avanzada permite realizar en el aula experimentación a nivel atómico, que, por su escala, resultaría inaccesible mediante experimentación directa en este contexto. Para ello, proponemos WebMO [5], una interfaz online para diferentes paquetes de Química computacional disponible vía web y app, complementado con una serie de laboratorios virtuales y recursos online integrados en el transcurso de las clases. Así, empleando sus propios dispositivos, como ordenadores y smartphones, los estudiantes son capaces de realizar simulaciones de moléculas sencillas, optimizando y visualizando sus geometrías y orbitales, midiendo diversos parámetros e interpretando sus propiedades a través de los resultados obtenidos, fomentando el pensamiento crítico, el emprendimiento y la creatividad. Además, de manera paralela, el contacto con estas herramientas sofisticadas les proporciona perspectiva y conocimiento acerca de la importancia que tiene la computación en la investigación e industria para el desarrollo de la sociedad moderna.

Esta propuesta se enmarca dentro del Proyecto de innovación docente *Simulaciones virtuales como herramienta TIC para la enseñanza de la Química Física* (PID-002-2022-23) de la Universidad de Valladolid, cuyo objetivo es utilizar simulaciones y laboratorios

virtuales en la enseñanza de la Química a nivel universitario. En particular, en su planteamiento actual, resulta especialmente adecuada en la asignatura de Química de primer curso de titulaciones como el Grado en Física o en Ingenierías, a las que un porcentaje significativo de estudiantes acceden sin haber cursado la asignatura de Química durante el último curso de Bachillerato, y, ampliando y adaptando las actividades propuestas, para asignaturas de Química Física e Inorgánica del Grado en Química.

2.2. Objetivos

Establecemos los siguientes objetivos como líneas de acción para la presente propuesta:

- I. Conocer el estado del arte del uso de paquetes de Química computacional avanzados en la enseñanza.
- II. Introducir a los estudiantes herramientas de computación avanzada empleadas en el mundo de la investigación.
- III. Desarrollar una propuesta didáctica para integrar dichas herramientas en el aula de Bachillerato, de acuerdo con el currículo de la Comunidad Autónoma de Castilla y León.
- IV. Aumentar la motivación del alumnado mediante el uso de la experimentación en el aula, el aprendizaje significativo y el uso de TIC.
- V. Mejorar el grado de comprensión y afianzar el conocimiento acerca de la estructura de la materia en estudiantes de Bachillerato.
- VI. Incorporar los recursos desarrollados a la enseñanza de la Química en los primeros cursos de titulaciones universitarias, dentro del marco del Proyecto de Innovación Docente *Simulaciones virtuales como herramienta TIC para la enseñanza de la Química Física* (PID-002-2022-23) de la Universidad de Valladolid.

Capítulo 3

Contextualización

A la hora de planificar la integración de una nueva herramienta en el aula resulta imprescindible enmarcarla en un contexto, tanto desde el punto de vista curricular como desde el competencial. En este capítulo realizamos una revisión curricular de las asignaturas de Física y Química, correspondiente al curso de 1º de Bachillerato, y Química, de 2º de Bachillerato, para poner de manifiesto aquellos contenidos curriculares que esta propuesta educativa aborda, de acuerdo con las directrices de la Comunidad Autónoma de Castilla y León. Seguidamente, indicamos su impacto en la adquisición de competencias clave y su relación con los Objetivos de Desarrollo Sostenible de la Agenda 2030.

3.1. Contexto educativo

Relacionamos el contenido curricular de Castilla y León, descrito en el Decreto 40/2022, de 29 de septiembre del BOCYL [6], con los aspectos teóricos que se abordan en el transcurso de esta propuesta innovadora.

Hemos decidido orientar nuestra propuesta hacia la etapa educativa de Bachillerato, pues es en estos cursos cuando se empieza a profundizar en los conceptos que se abordarán utilizando la Química computacional. Además, se trata de una etapa en la que los estudiantes han elegido seguir un itinerario formativo científico, por lo que cabe esperar que sus niveles de interés, predisposición y motivación sean elevados.

En este punto creemos necesario mencionar que, a pesar de que parte del contenido que aborda este proyecto se puede enmarcar en el bloque D: *Física relativista, cuántica, nuclear y de partículas* de asignatura Física de 2º de Bachillerato, hemos decidido plantearlo

como un proyecto interdisciplinar, ya que tanto la Física como la Química son asignaturas optativas en el curso y un porcentaje significativo de alumnos no escoge cursar ambas. No obstante, la investigación en Química computacional involucra tanto a físicos como a químicos. La importancia de ambas disciplinas y su sinergia en este ámbito se pone de manifiesto abiertamente a lo largo de la implementación.

3.1.1. Física y Química - 1º Bachillerato

Dentro del currículo de la asignatura de Física y Química, relacionamos el proyecto con el bloque A: *Enlace químico y estructura de la materia*. De entre los contenidos del curso que indica el texto, abordamos los siguientes:

- *Estructura electrónica de los átomos tras el análisis de su interacción con la radiación electromagnética: explicación de la posición de un elemento en la tabla periódica y de la similitud en las propiedades de los elementos químicos de cada grupo.*
- *Teorías sobre la estabilidad de los átomos e iones: predicción de la formación de enlaces entre los elementos, representación de estos mediante estructuras de Lewis y deducción de cuáles son las propiedades de las sustancias químicas. Comprobación a través de la observación y la experimentación.*

En relación al primer punto, profundizamos en la estructura electrónica de los átomos mediante la visualización de orbitales electrónicos, así como las similitudes entre distintos elementos de un mismo grupo para explicar estas tendencias periódicas. En cuanto al segundo punto, proponemos la realización de comprobaciones de estructuras predichas mediante el modelo de Lewis a partir de la simulación de moléculas sencillas, para después estudiar la naturaleza de los enlaces observando la distribución de cargas en la molécula. Cabe destacar que el texto destaca en este bloque la importancia de la experimentación, a pesar de que, como ya hemos indicado, se trata de una escala nanométrica.

3.1.2. Química - 2º Bachillerato

En cuanto a la asignatura de Química, abarcamos principalmente el bloque A: *Enlace químico y estructura de la materia*. Abordamos los siguientes contenidos curriculares:

2. Principios cuánticos de la estructura atómica:

- *Relación entre el fenómeno de los espectros atómicos y la cuantización de la energía, introducción a la teoría de Planck. Del modelo de Bohr a los modelos mecano-cuánticos: necesidad de una estructura electrónica en diferentes niveles.*

- *Principio de incertidumbre de Heisenberg y doble naturaleza onda-corpúsculo del electrón. Naturaleza probabilística del concepto de orbital.*
- *Números cuánticos y principio de exclusión de Pauli, principio de mínima energía y de máxima multiplicidad. Estructura electrónica del átomo. Utilización del diagrama de Möller para escribir la configuración electrónica de los elementos químicos.*

Abordamos el estudio de los diferentes modelos atómicos empleando como apoyo simulaciones y recursos online que permitan visualizar los conceptos desarrollados en la clase teórica. La visualización de los orbitales atómicos de distintos elementos permite comprender el significado de las configuraciones electrónicas y descartar la asociación de orbital con órbita, asimilando el concepto de probabilidad desde un punto de vista cuántico.

3. *Tabla periódica y propiedades de los átomos:*

- *Naturaleza experimental del origen de la tabla periódica en cuanto al agrupamiento de los elementos según sus propiedades. La teoría atómica actual y su relación con las leyes experimentales observadas.*
- *Posición de un elemento en la tabla periódica a partir de su configuración electrónica.*
- *Tendencias periódicas. Aplicación a la predicción de los valores de las propiedades de los elementos de la tabla a partir de su posición en la misma.*
- *Enlace químico y fuerzas intermoleculares.*
- *Tipos de enlace a partir de las características de los elementos individuales que lo forman. Energía implicada en la formación de moléculas, de cristales y de estructuras macroscópicas. Propiedades de las sustancias químicas.*
- *Describir las características básicas del enlace covalente empleando los Modelos de Lewis, RPECV e hibridación de orbitales. Configuración geométrica de compuestos moleculares y las características de los sólidos.*
- *Modelos de la nube electrónica y la teoría de bandas para explicar las propiedades características de los cristales metálicos.*

Continuamos relacionando la estructura electrónica con las propiedades químicas de los elementos y su posición en la tabla periódica a través de tablas interactivas. Una vez se aborde el estudio del enlace atómico, proponemos a los alumnos diferentes experiencias basadas en el uso de softwares sofisticados, con el fin de comprobar las propiedades de los

enlaces atómicos en relación con las propiedades de los átomos que involucran. Asimismo, mediante la obtención de la geometría de diversas moléculas se constata de forma experimental la validez de las predicciones de los modelos de Lewis, RPECV e hibridación de orbitales.

Finalmente, incorporamos de nuevo el uso de estas herramientas en el último bloque que establece el texto, el C: *Química orgánica*, aplicándolo a los siguientes contenidos:

6. Isomería

- *Fórmulas moleculares y desarrolladas de compuestos orgánicos. Diferentes tipos de isomería estructural.*
- *Modelos moleculares o técnicas de representación 3D de moléculas. Isómeros espaciales de un compuesto y sus propiedades.*

7. Reactividad orgánica

- *Principales propiedades químicas de las distintas funciones orgánicas. Comportamiento en disolución o en reacciones químicas.*

Al igual que en el primer bloque de la asignatura, proponemos la visualización de moléculas en tres dimensiones, así como sus orbitales y distribuciones de carga. En el caso de moléculas orgánicas se emplea además para comparar diferentes isómeros, visualizando el tipo de isomería con ayuda de las simetrías de las moléculas. La distribución de cargas en las moléculas se podrá relacionar con su polaridad y con propiedades como la solubilidad, la temperatura de ebullición y la temperatura de fusión. Finalmente, mediante la obtención de las energías de las geometrías moleculares optimizadas se podrán hacer hipótesis acerca de la estabilidad de distintos isómeros.

3.2. Competencias clave

La recientemente implantada LOMLOE [7] establece que el proceso de aprendizaje se llevará a cabo mediante la adquisición de una serie de competencias clave. En línea con esta metodología de aprendizaje, este proyecto contribuye a su adquisición:

1. **Competencia en Lectoescritura.** Los alumnos desarrollan esta competencia a través de la lectura e interpretación de trabajos científicos, así como a través de su

propia producción escrita y oral, exponiendo resultados y conclusiones de su proyecto de manera ordenada y coherente, y mediante el debate constructivo con sus compañeros.

- II. **Competencia Multilingüe.** Esta competencia resulta imprescindible en el desarrollo científico, dado que el conocimiento se transmite entre centros de investigación de todo el mundo empleando principalmente como lengua común el inglés. Dentro del proyecto, se manejará un programa cuya interfaz se encuentra en este idioma y, adicionalmente, se propondrá a los alumnos la lectura de artículos de investigación de revistas internacionales.
- III. **Competencia Matemática y Competencia en Ciencia, Tecnología e Ingeniería.** Esta competencia es inherente a las asignaturas científicas, como es el caso de la Física y la Química, que permiten al alumnado desarrollar su razonamiento, su pensamiento lógico-matemático e interpretar fenómenos cotidianos a partir de las ciencias fundamentales. En este proyecto incorporamos de manera explícita la importancia de la tecnología a través del uso de TIC en el aula, relacionando además lo aprendido en el aula con su aplicación en el entorno.
- IV. **Competencia Digital.** Se desarrolla de manera explícita en este proyecto, pues se fundamenta en la integración de elementos TIC en el aula. Los alumnos desarrollarán este proyecto empleando smartphones o tablets, así como softwares para la obtención y el tratamiento de datos.
- V. **Competencia Personal, Social y de Aprender a Aprender.** El aprendizaje colaborativo y basado en proyectos fomenta la autonomía, capacidad de planificación y gestión de recursos materiales y temporales por parte de los alumnos, así como la interacción entre pares para reforzar el proceso de aprendizaje mediante una comunicación constructiva.
- VI. **Competencia Ciudadana.** A través de la introducción de la investigación en las aulas de instituto se pone de manifiesto la importancia de la ciencia en el desarrollo de la sociedad moderna. Los alumnos se beneficiarán del acercamiento a los problemas y retos que afronta el ser humano y cómo los conocimientos que adquieren en las aulas se aplican para contribuir a su solución.
- VII. **Competencia Emprendedora.** Uno de los objetivos a la hora de implementar de esta propuesta es que sean los propios estudiantes quienes tomen la iniciativa

para escoger el sistema o propiedades que serán objeto de estudio en sus proyectos, defendiendo su criterio y justificándolo en base a sus resultados.

VIII. **Competencia en Conciencia y Expresiones Culturales.** Finalmente, esta competencia se trabaja de manera transversal a través del desarrollo de la creatividad, de la imaginación y del pensamiento divergente. Tal y como mencionamos en los objetivos del presente trabajo, pretendemos acercar a los alumnos al mundo de la investigación científica. Si bien no se suelen asociar habilidades como la creatividad a la ciencia, resulta evidente la necesidad de emplearlas a la hora de proponer y desarrollar nuevos avances científicos y tecnológicos.

3.3. Objetivos de Desarrollo Sostenible

En el año 2015, los jefes de Estado de distintos países miembros de las Naciones Unidas desarrollaron la llamada Agenda 2030, un plan de acción compuesto de 17 actuaciones u Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) [8], que amplían los Objetivos de Desarrollo del Milenio. Los ODS parten de la idea de que todo país, cualquiera que sea su riqueza o nivel de desarrollo, asuma la responsabilidad de promover la prosperidad y de proteger el medioambiente.

Tal y como planteamos esta propuesta educativa, pretendemos establecer un puente entre los conocimientos en el aula y su aplicación en la vida real. Desde este enfoque, desarrollamos una serie de ODS que se relacionan con aplicaciones directas y de actualidad de campos de investigación donde se emplean herramientas de Química computacional



Figura 3.1: Principales objetivos de desarrollo sostenible abordados en la propuesta educativa.

(Fig.3.1). Entre ellos, destaca el ODS4, Educación de Calidad, pues es imprescindible e inevitable en un contexto educativo. Adicionalmente, los alumnos adquieren conciencia de la relevancia de la investigación en Química y Física en el desarrollo de tratamientos médicos, nuevas energías renovables, materiales sostenibles y poco contaminantes o tratamiento de residuos, entre otras muchas.

Capítulo 4

Marco teórico

Dedicamos este capítulo a describir el marco teórico en el que se ha fundamentado esta propuesta. Cabe distinguir dos enfoques: en primer lugar el marco teórico desde un punto de vista puramente científico, donde introducimos los contenidos químicos que desarrolla el proyecto educativo, y en segundo lugar un marco didáctico, con el que justificamos la elección de metodologías y actuaciones.

4.1. Introducción a la Química Computacional

El estudio de la estructura atómica de la materia se introduce en el currículo de Educación Secundaria Obligatoria, de acuerdo con el Decreto 39/2022, de 29 de septiembre del BOCYL [9], abordándose con mayor profundidad en los cursos posteriores [6].

4.1.1. Estructura de la materia. Modelos atómicos

La palabra átomo procede del griego. Etimológicamente, su significado es *que no se puede cortar*. El concepto de átomo fue introducido por la escuela atomista griega, quienes postulaban su existencia como las partículas indivisibles que constituyen la materia. Este postulado constituye la base del modelo de Dalton del átomo indivisible, propuesto a principios del siglo XIX. No fue hasta el final del siglo cuando la experiencia de Thomson constató que un haz de rayos catódicos puede ser desviado de su trayectoria mediante un campo eléctrico. Así, demostró la existencia de una partícula subatómica cargada, el electrón, dando lugar a su modelo atómico, también conocido como budin de pasas, según el cual los átomos están conformados por una masa esférica con carga positiva en la que se encuentran imbuidos los electrones.

Este modelo fue sucedido por el de Rutherford, quien, apoyándose en la experiencia de la lámina de oro, propuso un modelo atómico planetario en el que se introduce el concepto de núcleo atómico. Mediante esta experiencia, Rutherford comprobó que al hacer incidir un haz de partículas alfa, con carga positiva, sobre una lámina de oro, la mayoría mantienen su trayectoria recta, mientras que una pequeña proporción se desvía en distintos ángulos. A partir de esta experiencia, Rutherford postula que el átomo está constituido mayoritariamente por espacio vacío, contando con un núcleo en el que se concentra toda la carga positiva y alrededor del cual orbitan los electrones.

Sin embargo, este modelo no es capaz de justificar el hecho de que un electrón pueda orbitar de manera estable sin colapsar al núcleo ni la existencia de espectros atómicos. Para responder a estas cuestiones, Bohr presenta un nuevo modelo atómico [10] que incluye la cuantización, postulando la existencia de ciertas órbitas estables con un determinado momento angular, múltiplo de la constante de Planck \hbar , en las que los electrones orbitan sin radiar, pudiendo moverse entre estas órbitas (o capas) al absorber o emitir ciertas cantidades de energía.

A principios del siglo XX, con la llegada de la Física cuántica y el principio de indeterminación, Schrödinger [11] deja atrás los modelos hasta ahora clásicos e introduce un modelo cuántico. En este modelo, el electrón se describe mediante una función de onda Ψ , cuyo cuadrado determina una densidad de probabilidad de encontrarlo en una región del espacio. Esta probabilidad constituye el concepto de orbitales y sustituye a las órbitas de modelos anteriores. En este punto, es importante subrayar que la solución a la ecuación de Schrödinger arroja los números cuánticos n , l y m , pero no incluye la existencia del spin s , pues la deducción matemática de este número cuántico requiere de un modelo relativista como es el de Dirac [12].

4.1.2. Estructura electrónica.

Los diferentes elementos de la tabla periódica se caracterizan por el número de protones de su núcleo, representados por el número atómico Z . Cuando un átomo es eléctricamente neutro, posee esa misma cantidad de electrones, distribuidos en orbitales atómicos caracterizados por los números cuánticos (n, l, m) . De acuerdo con el principio de exclusión de Pauli, no puede haber más de un electrón en el mismo estado cuántico, por lo que, incluyendo el spin, cada orbital puede contener dos electrones. El estado de un electrón queda

completamente definido mediante sus números cuánticos (n, l, m, s) . Así, los electrones se distribuyen en los orbitales en orden creciente de energía. En las aulas de Física y Química, es común recurrir al diagrama de Möller para enseñar este orden a los alumnos, junto con la regla de máxima multiplicidad de Hund. Según ésta, la configuración más estable para un átomo es aquella en que los electrones se encuentran más desapareados, con orientación de spin paralela. En la tabla periódica existen algunas excepciones a estas reglas.

Las propiedades químicas de los elementos vienen determinadas fundamentalmente por el número de electrones que poseen en su capa más externa o de valencia. La tabla periódica ordena los elementos de acuerdo a estas configuraciones electrónicas, de manera que los elementos de cada grupo poseen el mismo número de electrones de valencia y, en consecuencia, propiedades químicas similares.

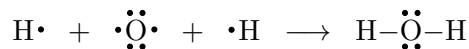
4.1.3. Enlace químico

El enlace químico consiste en la unión de dos átomos mediante un equilibrio de fuerzas entre los electrones de valencia y los núcleos, de tal manera que la energía del sistema enlazado es menor que la energía total de ambos átomos por separado. Distinguimos tres tipos de enlace en función del comportamiento de los electrones:

- Enlace iónico: se produce una transferencia de electrones de un átomo a otro, dando lugar a iones unidos por atracción electrostática.
- Enlace covalente: los átomos comparten electrones de valencia, formando moléculas.
- Enlace metálico: un gran número de cationes comparte sus electrones de valencia como una nube electrónica.

Además, estos átomos no se enlazan de cualquier manera, sino que buscan una configuración electrónica de gran estabilidad similar a la de un gas noble, es decir, que cedan, acepten o compartan electrones hasta contar con ocho en última capa o capa de valencia. Lewis propuso este principio como la regla del octeto y desarrolló un sistema para representar los enlaces conocido como estructuras de Lewis [13]. La estructura de Lewis de un ion o molécula representa la distribución de los electrones de la capa de valencia en pares. Por lo general, su uso en la enseñanza de la Química se utiliza para describir enlaces covalentes. Los pares que no forman parte del enlace se llaman pares solitarios, mientras que los pares compartidos entre átomos se llaman pares enlazantes. El número de pares compartidos entre dos átomos determina el orden simple, doble o triple del enlace.

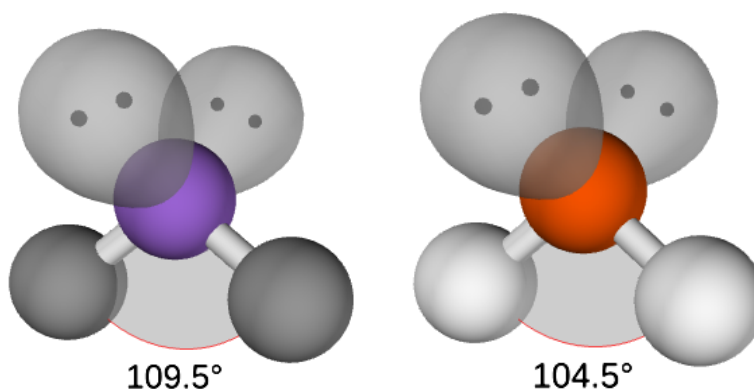
Mostramos el ejemplo de la estructura de Lewis de la molécula de agua, H_2O , con dos enlaces simples y dos pares solitarios:



Las estructuras de Lewis constituyen una herramienta sencilla y práctica para representar la distribución de los pares de electrones en una molécula sobre el papel. Sin embargo, no es capaz de arrojar información acerca de las geometrías moleculares en un espacio tridimensional. Para poder obtener información acerca de la colocación de los átomos en el espacio, la teoría de repulsión de pares de electrones de valencia (TRPEV) [14], desarrollada a mediados del siglo XX, proporciona un modelo sencillo que predice de forma cualitativa las geometrías moleculares. Su postulado principal es que la configuración más estable se alcanza cuando los pares de electrones de un átomo (tanto solitarios como enlazantes) se separan entre sí tanto como les es posible alrededor del núcleo, de forma que se minimicen las fuerzas repulsivas entre ellos.

4.1.4. Más allá de la TRPEV

Dada la sencillez de la TRPEV para predecir estructuras con un grado aceptable de precisión, su uso se ha extendido en la docencia de la Química de instituto [15]. Sin embargo, no deja de ser un modelo: es conveniente, pero no está exento de limitaciones. Sin ir más lejos, podemos recurrir de nuevo a la molécula de agua, empleada a menudo como ejemplo por su sencillez, pero que este modelo no describe cuantitativamente [16], pues el



(a) Ángulo predicho por la TRPEV. (b) Ángulo real de la molécula H_2O .

Figura 4.1: Representación de la molécula de agua H_2O y sus pares solitarios según la TRPEV. La geometría electrónica es tetraédrica, mientras que la molecular es angular.

ángulo predicho difiere unos grados del ángulo real (Fig.4.1).

Además, bajo la premisa de la TRPEV, dos moléculas con igual disposición de pares deberían tener la misma geometría. Tomemos como contraejemplo el caso de las moléculas de H_2O y H_2S (Fig.4.2), donde la similitud es meramente cualitativa, pues la segunda presenta un ángulo casi recto frente a los $109,5^\circ$ predichos por el modelo.

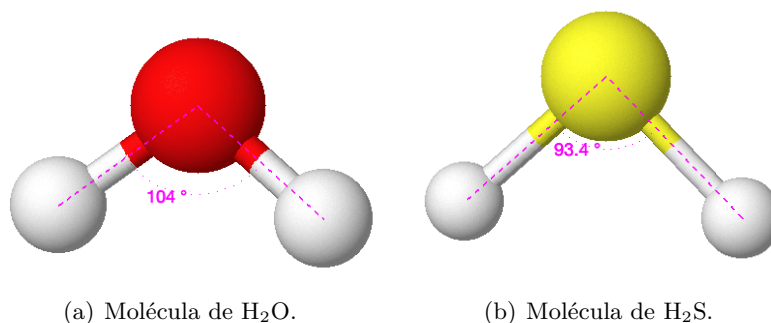


Figura 4.2: Los ángulos de las moléculas de H_2O y H_2S no coinciden entre sí ni con la predicción de la TRPEV.

Llegados a este punto, se suplen las carencias de estos modelos recurriendo a diversas correcciones para explicar las diferentes desviaciones del modelo [17], tales como una diferencia entre la repulsión que ejercen los pares enlazados y los solitarios o la influencia del tamaño del átomo central. No debemos olvidar además que tanto la TRPEV como la representación de Lewis asumen la localización de los pares de electrones. Es necesario por tanto abordar el enlace atómico desde un punto de vista cuántico y dar un salto de las propiedades cualitativas a las cuantitativas.

En el currículo de Bachillerato, este salto se produce mediante la teoría del enlace de valencia, según la cual el enlace atómico se produce por el solapamiento o combinación de dos orbitales atómicos (OA) con un electrón cada uno. Al producirse este solapamiento se forma un orbital molecular de enlace (OM) que abarca los dos átomos. En función de la orientación en que se produzca, se pueden distinguir enlaces σ , por solapamiento frontal, y enlaces π , por solapamiento lateral. En el marco de la teoría cuántica se aborda también el estudio de la hibridación de orbitales atómicos. En ocasiones, un electrón apareado puede promocionar a un orbital desocupado, dando lugar a una configuración electrónica excitada. Así, orbitales atómicos de distintas geometrías se combinan para dar lugar a

orbitales atómicos híbridos e idénticos, con geometrías intermedias. El caso más estudiado, por su relevancia en la Química orgánica, es el del carbono. Su configuración base es $1s^2 2s^2 2p^2$, produciéndose promoción de un electrón 2s al orbital 2p vacío, para dar lugar a la configuración excitada $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$. Estos cuatro orbitales atómicos 2y y 2p se hibridan dando lugar cuatro orbitales sp^3 idénticos.

Existen modelos considerablemente más complejos que describen de forma más precisa las geometrías moleculares, pese a exceder con creces los objetivos de la etapa de Bachillerato. No obstante, es común que el alumno se detenga en este punto, sin plantearse la posibilidad de esta existencia y aceptando los modelos conocidos hasta el momento como una verdad absoluta.

4.1.5. Química computacional

Uno de los objetivos principales de la Química cuántica es la resolución de la ecuación de Schrödinger (ES), que permite determinar la estructura electrónica de átomos y moléculas. En la práctica, dada la complejidad de esta tarea incluso para un ordenador, se recurre a una serie de técnicas y aproximaciones que permiten que sea computacionalmente factible. Existen dos vías a la hora de abordar la resolución el problema electrónico:

- Métodos semiempíricos: emplean modelos sencillos para el hamiltoniano y una serie de parámetros ajustables que se obtienen de datos experimentales. Permiten realizar cálculos en tiempos razonables.
- Métodos *ab initio* o de primeros principios: resuelven el problema empleando tan sólo el número atómico de los núcleos y valores de constantes fundamentales. Son modelos derivados directamente de principios teóricos y su precisión viene dada por lo sofisticado que sea el modelo con el que representan la función de onda del sistema. La Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) es uno de los métodos *ab initio* más empleados, pues reduce drásticamente la complejidad de la ES sustituyendo un sistema de N electrones acoplados por una densidad electrónica global.

4.2. Experimentación y simulaciones en el aula de Física y Química

Experimentar es, según su cuarta acepción en el diccionario de la Real Academia Española, *en las ciencias fisicoquímicas y naturales, hacer operaciones destinadas a descubrir,*

comprobar o demostrar determinados fenómenos o principios científicos [19]. En la enseñanza de la Física y la Química, como ciencias que describen el entorno, la experimentación juega un papel fundamental para que el alumno comprenda la teoría y contextualice el conocimiento, a través de experimentos básicos que permitan inducir teorías de sus resultados [20], y como un proceso de interacción física e intelectual [21]. La experimentación ofrece al estudiante la posibilidad de reflexionar y hacerse nuevas preguntas, además de tener un impacto positivo en su motivación [1].

Sin embargo, en la realidad en nuestro sistema educativo, las clases de laboratorio suponen una serie de complicaciones adicionales que dificultan su uso recurrente, entre las que destacan la falta de tiempo, la complejidad para organizar el aula o la participación desigual de los estudiantes [22], sin olvidar también que requieren de una serie de recursos materiales como equipamiento, instrumental de medida o reactivos, con su correspondiente coste económico.

El uso de las TIC en el aula tiende a percibirse como un fenómeno del siglo XXI. Sin embargo, los docentes llevan valiéndose de las nuevas tecnologías disponibles en su época como herramientas innovadoras desde hace décadas, como lo fue en los años 40 el uso de vídeos para explicar técnicas de laboratorio de Química a grupos numerosos de alumnos previamente a su realización [23]. Ochenta años después, nos encontramos en un escenario en que el desarrollo de las TIC avanza a mayor velocidad y de manera accesible para la mayoría de los individuos de nuestra sociedad, abriendo muchas puertas en todos los ámbitos de nuestras vidas. Resulta lógico y necesario, tal y como quedó claro durante la situación derivada de la reciente pandemia por Covid-19 [24], que, como docentes de ciencias, actualicemos y enriquezcamos las metodologías presentes en el aula con las nuevas herramientas de las que disponemos.

Los laboratorios virtuales o simulaciones constituyen un acercamiento a la experimentación que evita los problemas logísticos de un laboratorio convencional [25]. Mediante modelos matemáticos de fenómenos fisicoquímicos, estas simulaciones permiten interactuar con escenarios de interés científico y observar resultados que imitan los que arrojaría un experimento real. Además, permiten visualizar fenómenos que de otra manera no serían accesibles en el aula, por su complejidad, peligro, coste, escala u otros impedimentos. Es patente que el uso complementario de laboratorios reales y virtuales, teniendo en cuenta las fortalezas de cada uno, resulta más efectivo que utilizar cada uno por separado [26].

Basta una búsqueda rápida en internet para encontrar numerosas webs de simulaciones, muchas de ellas gratuitas. No obstante, no todos estos recursos son científicamente rigurosos. El profesor debe escogerlos cuidadosamente, ya que para que una simulación sea científicamente útil, deben basarse en datos reales o ser consistentes con las ecuaciones que representan [27], o no sólo no contribuirán al aprendizaje, sino que confundirán a los alumnos. Estudios recientes indican que más de la mitad de profesores de educación secundaria y superior de ciencias recurren de forma puntual al uso de simulaciones para complementar sus clases [28] y es de esperar que esta popularidad siga aumentando.

En el ámbito de la Química, las simulaciones ofrecen la posibilidad de visualizar fenómenos a escala nanométrica y experimentar a nivel atómico, permitiendo alcanzar un mayor grado de entendimiento [29]. En el ámbito de la investigación, el uso de softwares computacionales de alto nivel permite modelar nuevas moléculas y materiales prediciendo con precisión sus propiedades en base a la mecánica cuántica. Sin embargo, pese su potencial y a que muchos de estos softwares son gratuitos y/o de código abierto, apenas existen publicaciones acerca de su uso en la enseñanza. Dado que la base teórica en que se sustenta involucra conceptos muy avanzados de mecánica cuántica, y que incluso sus fundamentos resultan complejos de introducir a los alumnos [2], es probable que un docente ni siquiera se plantee la posibilidad de que este tipo de herramientas profesionales pueda tener alguna aplicación en sus aulas. Sin embargo, es posible instruir a los estudiantes en su manejo sin necesidad de profundizar en el fundamento teórico.

Tras revisar la bibliografía existente acerca del uso de softwares de Química computacional en la educación, encontramos reportes a nivel universitario y de instituto. Entre los estudios aplicados en cursos universitarios, Zdanovskaia *et al.* [30] y, posteriormente, Esselman y Hill [31] integran el uso de cálculos computacionales en curso experimental de Química orgánica empleando WebMO como interfaz para las simulaciones, reportando beneficios en los resultados de los alumnos. Bendavid propone recientemente su introducción en un curso de Química física que dote a los alumnos de unas nociones iniciales sobre su funcionamiento [32], con el fin fomentar su uso autónomo en etapas futuras de su formación y carrera.

Respecto a su uso en institutos, considerablemente menos extendido, encontramos que Ochterski [3] implementa el uso de softwares de cálculo y visualización en últimos cursos

de instituto. Entre sus resultados señala que muchos de los recursos online que se enfocan a niveles de instituto tienen una interfaz infantil no acorde con la edad de su público objetivo, lo que desalienta a los alumnos, constatando que el uso de softwares de calidad provoca en los estudiantes un mejor desempeño ante la creencia de que se les toma en serio [3]. Finalmente, con un enfoque diferente a los anteriores, Ericsson *et al.* involucran a un grupo de estudiantes de instituto en cálculos DFT con grafeno [33], en colaboración con investigadores universitarios, con el objetivo de desarrollar un mejor entendimiento de la mecánica cuántica y ganar conciencia de la actividad científica y su impacto en la sociedad.

4.3. Motivación en el alumnado de Física y Química

La Real Academia Española define la motivación como el *conjunto de factores internos o externos que determinan en parte las acciones de una persona* [19]. Al analizar la naturaleza de estos factores subyacentes que determinan la actuación, distinguimos dos tipos de motivación [34]:

- Motivación intrínseca: realización de una tarea por factores internos, como autoexigencia, disfrute o autodeterminación, sin esperar recompensa externa.
- Motivación extrínseca: realización de una tarea en función de factores externos, tanto individuales como colectivos, para conseguir éxito o evitar fracaso.

Cuando la naturaleza de la motivación de una tarea es intrínseca, aumentan tanto el interés como el disfrute en el transcurso de ésta, ya que su mero desarrollo constituye un fin en sí mismo [35]. Es por tanto este tipo de motivación el que, como docentes, debemos tratar de despertar en nuestros alumnos. Sin embargo, el estudio de asignaturas científicas como la Física y la Química no suele gozar de buena reputación entre los estudiantes. La creencia de que son materias complicadas y desafiantes predispone a parte del alumnado a mostrar una baja motivación al afrontar su estudio [36]. Como docentes, es imprescindible abordar esta problemática para cambiar esta percepción.

Estudios señalan que el uso de las TIC y de metodologías cooperativas en la enseñanza de la Física y la Química, frente a las metodologías tradicionales, supone un aumento del interés, la atención, la constancia y el esfuerzo de los alumnos en la asignatura [37], así como se constata también que su uso conlleva un aumento de emociones positivas [38]. Estos factores son a su vez indicadores de una mayor motivación intrínseca. Sin embargo, el mero hecho de incorporar TIC en el aula no implica una mejora en la motivación o en

los resultados académicos [39], sino que se debe entender como un factor más a la hora de enriquecer la docencia. A pesar de vivir en una sociedad dominada por la tecnología, existe un gran desconocimiento de los recursos educativos a los que ésta da acceso, tanto por parte de los alumnos como de los docentes [4]. Finalmente, no debemos olvidar que la actitud y motivación del propio profesor a la hora de implementar nuevas metodologías en el aula cobra gran relevancia en el proceso de aprendizaje de los estudiantes y en cómo reciben su uso [40].

Capítulo 5

Metodología

En esta sección desarrollamos brevemente las principales metodologías de aprendizaje en las que apoyamos nuestra propuesta de innovación educativa.

5.1. Metodologías activas

Las metodologías activas en la enseñanza son enfoques educativos centrados en el alumno. Estos modelos se centran en promover la adquisición de habilidades y competencias involucrando al estudiante en su propio proceso aprendizaje a través de participación activa [41]. Así, el aprendizaje se concibe como proceso constructivo, frente a la concepción receptiva de las metodologías tradicionales.

Estas metodologías comparten varias de sus premisas con las teorías constructivistas del aprendizaje surgidas en el siglo XX. Una de las más relevantes es la teoría el aprendizaje significativo de Ausubel [42], según la cual el aprendizaje se produce de manera eficaz o significativa cuando el alumno es capaz de dotar a la información de una estructura lógica, relacionándola con una serie de conocimientos previamente existentes en su estructura cognitiva que actúan como cimientos para integrar el nuevo conocimiento. Asimismo encontramos la teoría del aprendizaje por descubrimiento, propuesta por Bruner [43], que defiende que el individuo se apropia del conocimiento cuando participa como sujeto activo en el proceso de aprendizaje, empleando sus propias herramientas para construir su cognición. Así, este tipo de aprendizajes se oponen al modelo memorístico en el que el alumno es un agente pasivo.

5.1.1. Aprendizaje Basado en Problemas

El Aprendizaje Basado en Problemas (ABPb) propone integrar en el currículo la resolución de problemas basados en casos reales, mediante los cuales el alumno se plantea una serie de dudas y realiza un proceso de investigación con el fin de hallar una respuesta. Estos problemas se diseñan de manera que hallar su respuesta requiera haber satisfecho una serie de objetivos de aprendizaje [44].

5.1.2. Aprendizaje Basado en Proyectos

El Aprendizaje Basado en Proyectos (ABPy) propone que los alumnos realicen un conjunto de tareas que involucran la resolución de problemas y la investigación autónoma, así como la presentación de sus resultados ante la clase [45]. Se fundamenta en el aprendizaje competencial, de manera que el alumno sea capaz de construir su propio conocimiento [46].

5.1.3. Aprendizaje colaborativo

En este modelo de aprendizaje, los alumnos trabajan en pequeños grupos, de manera conjunta y coordinada, para alcanzar una meta común. La diferencia entre aprendizaje colaborativo y aprendizaje cooperativo es que en el primero los estudiantes pueden diseñar y tomar decisiones acerca de su proceso de aprendizaje como grupo, mientras que en el segundo es el docente quien mantiene fundamentalmente el control de las actividades [47].

5.1.4. *Flipped-learning* o aula invertida

Esta metodología plantea que sea el alumno adquiera los teóricos conocimientos fuera del aula, mediante estudio autónomo, de manera que el aula se transforme en un espacio dedicado a la aplicación de éstos en casos prácticos, resolución de problemas o dinámicas interactivas, guiados por el docente [48]. Para ello, el profesor proporciona a los alumnos recursos de estudio con los que puedan trabajar de manera autónoma, gestionando su propio tiempo, relacionado con la Competencia Personal, Social y de Aprender a Aprender.

5.2. La importancia del aprendizaje vivencial

A pesar de que el uso de nuevas metodologías en las aulas es un tema de actualidad, la realidad de nuestro sistema educativo sigue aferrada al modelo de clase magistral como principal metodología en las aulas. En el contexto del aula de ciencias, este modelo provoca que los contenidos curriculares resulten abstractos, impositivos y carentes de utilidad,

generando una imagen deshumanizada de las ciencias [49]. Es necesario romper con este modelo de enseñanza, pues los alumnos se encuentran en un estado de desconexión entre lo que se les cuenta en el aula y sus experiencias en el mundo real. La consecución de un proceso de enseñanza-aprendizaje de éxito, que contribuya a la formación del alumno como individuo, requiere necesariamente de la relación e interacción con su entorno natural y social [50]. Así, en etapas de educación media y preuniversitaria, resulta evidente que la principal finalidad de la enseñanza de las ciencias debe ser formar ciudadanos con una actitud positiva hacia la ciencia [51].

El aprendizaje vivencial se propone como una metodología alternativa al aula tradicional capaz de contextualizar la ciencia en el entorno. Dotar al aprendizaje de un contexto conocido o atractivo genera en los alumnos curiosidad e interés. Para lograrlo, el proceso de aprendizaje vivencial debe tomar como punto de partida la vida y el entorno del estudiante, llevando al aula situaciones y procesos cotidianos, así como problemas de la sociedad actual [52]. De forma recíproca, esta contextualización de la ciencia en el entorno favorece la creación de una sociedad que valore y promueva la actividad científica, que es motor necesario para el progreso socioeconómico [51].

Capítulo 6

Propuesta de implementación en el aula

En este capítulo desarrollamos nuestra propuesta de implementación en el aula de Química de 2º de Bachillerato. Teniendo en cuenta el contenido curricular de la asignatura, consideramos que este curso resulta idóneo para que los alumnos se beneficien del uso de este tipo de herramientas. Adicionalmente, el curso de 2º de Bachillerato suele limitarse a la preparación de las pruebas de acceso a la Universidad, induciendo a los alumnos un elevado grado de presión y estrés y convirtiendo la asignatura de Química en resolución monótona de problemas. Mediante la introducción de esta propuesta innovadora se pretende romper con dicha dinámica desmotivadora, de manera que el fin último de este curso no se limite a obtener la máxima calificación en una prueba mediante memorística, sino a que los alumnos integren los conocimientos a través de un aprendizaje significativo y motivador.

No obstante, tal y como detallamos en la contextualización, parte del contenido curricular de la propuesta también se aborda en menor profundidad en la Física y Química de 1º de Bachillerato, por lo que describimos también adaptaciones de actividades y recursos que se pueden realizar en este curso a modo de introducción a la materia, de manera que el proyecto pueda tener continuidad a lo largo de ambos cursos de la etapa educativa.

6.1. Estructura

Planteamos este proyecto como un recorrido de la mano con las clases teóricas, que apoye de manera visual y experimental los conceptos a medida que se explican en el aula. En la primera etapa, a medida que avanzamos en este recorrido, el alumno va integrando

conocimientos y estructurando sus ideas de manera lógica y significativa. Seguidamente, una vez comprendan las teorías y modelos abordados en el currículo, comienza una segunda etapa intermedia, donde haremos hincapié en la existencia de otros modelos de mayor complejidad que se emplean en campos activos de la investigación. Los alumnos aprenden a manejar herramientas de Química computacional y las emplean para visualizar propiedades atómicas y moleculares de manera guiada. Finalmente, la propuesta termina con una última etapa en la que el alumno es el principal agente activo. Consiste en la elaboración de un proyecto en el que, basándose en los ejemplos vistos en clase, los alumnos deben plantear una problemática que puedan resolver mediante Química computacional. Además, proponemos la realización de un proyecto de investigación acerca de ámbitos de aplicación de este tipo de herramientas y simulaciones en la ciencia, innovación e industria.

6.2. Temporalización

El proyecto se desarrollará a lo largo de todo el curso académico, a medida que se vayan tratando los diferentes aspectos del currículo susceptibles de interés. A pesar de que estructuramos las actividades en sesiones, éstas no tienen una duración definida, sino que pueden ocupar una fracción de la hora de clase o extenderse a lo largo de dos, en función de su contenido, del progreso durante su transcurso y del feedback de los estudiantes.

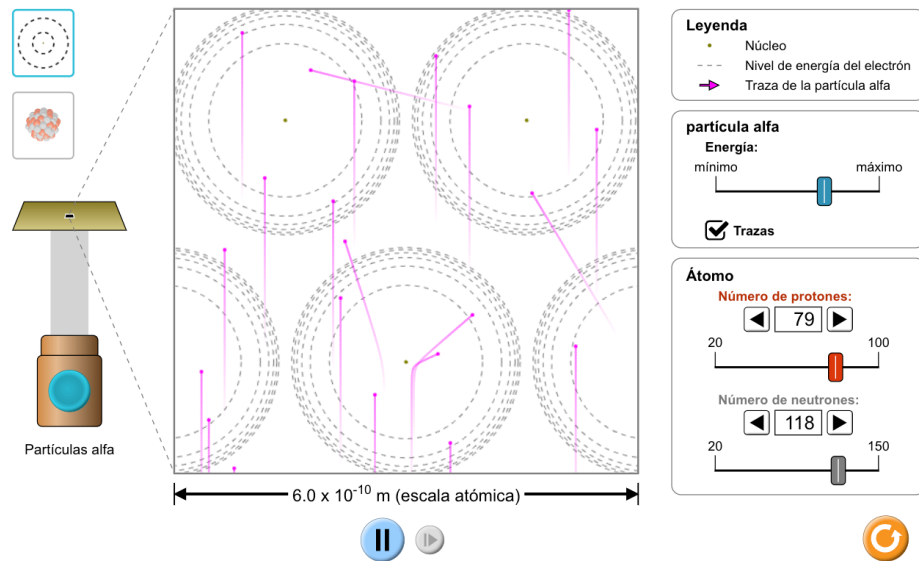
6.3. Actividades

6.3.1. Sesión I. El experimento de Rutherford

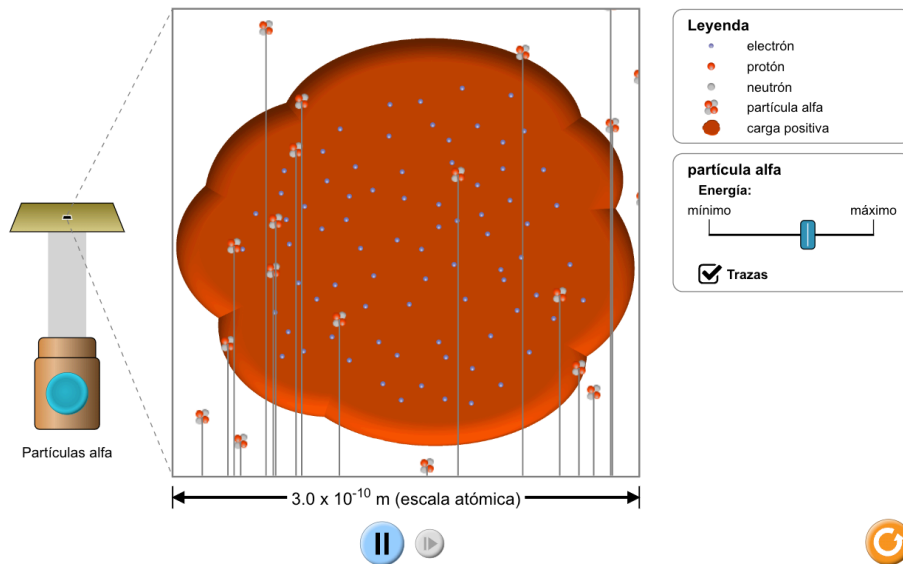
A medida que se introducen los modelos atómicos en el aula, se explica el contexto histórico de los experimentos que han servido para proponerlos o rechazarlos. Incorporamos a estas explicaciones una herramienta que simula el experimento de la lámina de oro de Rutherford. Empleamos la herramienta web [Dispersión de Rutherford](#) [Web.1]. Esta herramienta representa a escala atómica las trayectorias que seguirían las partículas alfa al impactar con una lámina de oro, que podemos escoger representar mediante un modelo de átomo nuclear (Rutherford) o un modelo de budín de pasas (Thomson).

Para manejar la interfaz, debemos pulsar el botón del cañón, situado a la izquierda de la pantalla. En el centro se muestran a escala atómica las trayectorias de las partículas alfa. A la derecha aparecen algunos parámetros variables: en ambos casos podemos escoger la energía cinética de las partículas alfa y si dibujar sus trazas. El modelo de Rutherford

permite además variar el número de protones o neutrones del núcleo atómico.



(a) Simulación en el modelo atómico de Rutherford.



(b) Simulación en el modelo atómico de Thomson.

Figura 6.1: Interfaz de la herramienta web [Dispersión de Rutherford](#).

A través de esta herramienta, se propone que los alumnos realicen una hipótesis inicial

acerca del comportamiento que esperan encontrar en ambos modelos. Posteriormente, con ayuda de la simulación, comprueban si sus hipótesis se verifican y estudian el efecto de variar la energía y los parámetros del núcleo. Se propone una serie de preguntas a contestar al finalizar la experiencia:

- ¿Qué diferencias observas entre el modelo atómico de Thomson y el de Rutherford?
- Varía los parámetros nucleares en el modelo de Rutherford. ¿Cómo afecta a la experiencia el material del que está hecho la lámina?
- Observa el experimento en el modelo de Thomson. ¿Cómo justificas que las partículas alfa no sean desviadas de su trayectoria al pasar cerca de un electrón?

6.3.2. Sesión II. Tabla periódica. Propiedades atómicas y configuraciones electrónicas

A la hora de estudiar las configuraciones electrónicas de los átomos, los estudiantes pueden tener ideas preconcebidas erróneas, como la tendencia a asociar mayor energía a los orbitales con mayor número cuántico principal n , aunque este orden depende tanto de n como de l . Además, ciertos niveles modifican ligeramente sus energías a medida que se llenan, alterando el orden usual y dando lugar a excepciones a la regla de aufbau. Para

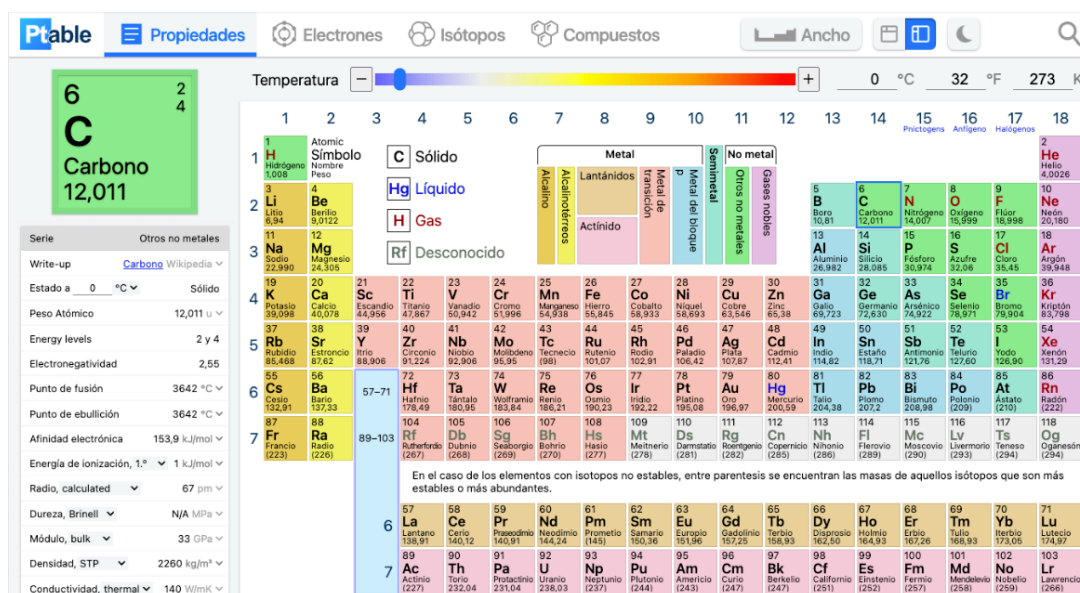


Figura 6.2: Interfaz de Ptable. Pestaña de propiedades atómicas.

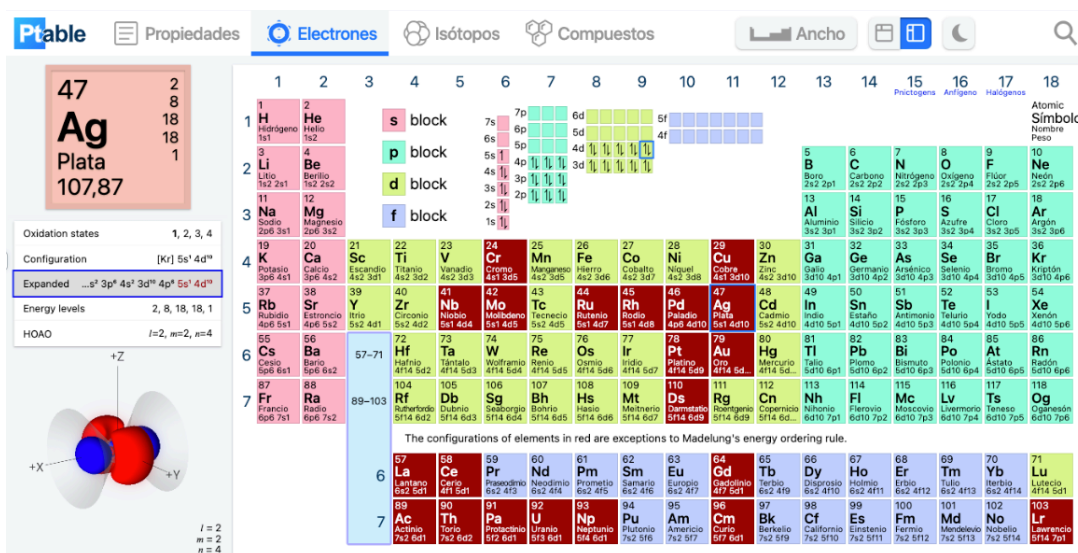


Figura 6.3: Pestaña de configuración electrónica de Ptable.

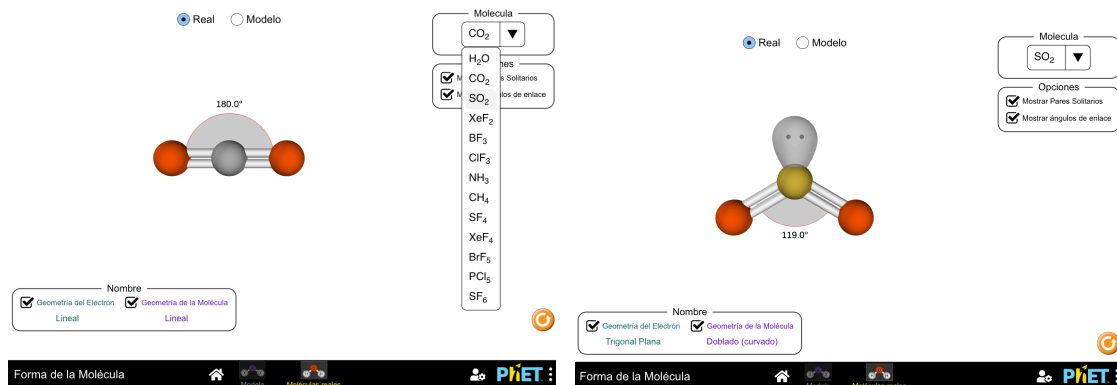
afrontarlo, presentamos a los estudiantes el uso del recurso web Ptable [Web.2], una tabla periódica interactiva que recoge diferentes propiedades de los elementos, tales como la electronegatividad, la afinidad electrónica, el radio molecular y los estados de oxidación.

Este recurso se introduce, más que como una actividad *per se*, como una herramienta de consulta para los estudiantes que puedan emplear a lo largo del curso, de forma que tengan acceso a una tabla periódica completa desde sus dispositivos móviles.

En particular, nos detenemos en el análisis de las configuraciones electrónicas, al que se accede desde el menú superior. En la Figura 6.3 mostramos una captura de la interfaz, que devuelve los estados de oxidación, configuraciones electrónicas y una representación tridimensional del último orbital atómico ocupado (HOAO) del elemento seleccionado. Los elementos destacados en granate son aquellos que presentan alteraciones a la regla de aufbau en el orden de llenado.

6.3.3. Sesión III. Geometría molecular y la TRPEV

El estudio de las geometrías de las moléculas mediante la TRPEV requiere del uso de la visión espacial, una cualidad que no todos los estudiantes tienen igual de desarrollada. Además, la diferencia entre geometría electrónica y geometría molecular induce en ocasiones a confusiones entre los alumnos. Con el propósito de proporcionar apoyo visual



(a) Geometría de la molécula de CO₂.

(b) Geometría de la molécula de SO₂.

Figura 6.4: Interfaz de la herramienta web [Forma de la molécula](#). Representación de moléculas reales.

a estas cuestiones, introducimos la herramienta web [Forma de la molécula](#) [Web.3]. Este recurso permite observar las geometrías electrónica y molecular de diversas moléculas según la TRPEV y compararlas con las disposiciones atómicas reales, observando diferencias cuantitativas.

La interfaz tiene un desplegable con las moléculas disponibles en la parte derecha de la pantalla (Fig.6.4(a)), así como la opción de mostrar los pares solitarios y los ángulos de enlace. En la parte inferior muestra el nombre de las geometrías electrónicas y moleculares,

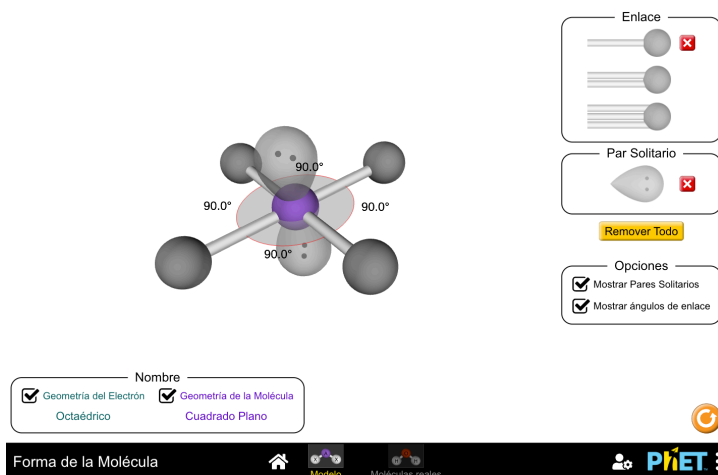


Figura 6.5: Interfaz para la construcción libre de moléculas.

remarcando la diferencia entre ellas. También cuenta con una herramienta para construir moléculas a la carta, añadiendo pares solitarios o enlaces a un átomo central, y observar cómo la repulsión entre pares reordena sus posiciones atómicas (Fig.6.5).

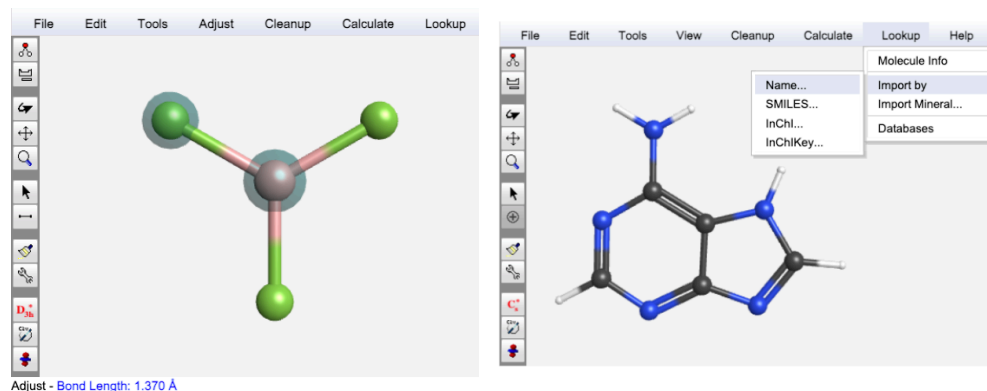
Como actividad, proponemos a los alumnos escoger dos moléculas con fórmulas similares que no compartan geometrías moleculares y justificar esta diferencia. Un ejemplo son el CO_2 y el SO_2 (Fig. 6.4). Ambas moléculas poseen un átomo central enlazado a los oxígenos. Sin embargo, el carbono posee cuatro pares enlazantes que generan una estructura lineal, mientras que el azufre cuenta con un par solitario y dos enlaces dobles, dando lugar a un ángulo. En esta última, el átomo de azufre con cinco pares de electrones es un ejemplo de excepción a la regla del octeto.

6.3.4. Sesión IV: Visualización de moléculas. Distancias interatómicas

Para visualizar moléculas proponemos la interfaz de softwares de computación WebMO [5]. Podemos emplear tanto la [app WebMO](#) [Web.4] en smartphones, que en su versión gratuita permite hacer cálculos de hasta 9 átomos con el software semiempírico MOPAC, como el [servidor Demo de WebMO](#) [Web.5] mediante un navegador web, con las credenciales de acceso *guest* como nombre de usuario y contraseña, en el que no hay límite de átomos, pero sí de tiempo de computación, y permite escoger entre varios softwares de cálculo semiempíricos o *ab initio*. En esta memoria emplearemos el servidor Demo por su mayor versatilidad. Es posible obtener una licencia gratuita para instalar la versión básica, pero el servidor Demo no requiere instalaciones y es suficiente para nuestros propósitos.

Existen dos maneras de emplear WebMO como herramienta de visualización. La primera consiste en emplear la base de datos de la propia interfaz, que se encuentra en la barra superior, pulsando en la pestaña *Lookup* \rightarrow *Import by* \rightarrow *Name*. A continuación escribimos la fórmula de la molécula o su nombre en inglés para que el programa realice una búsqueda. Si tiene éxito, la molécula aparece en pantalla y podemos moverla y manipularla (Fig. 6.6).

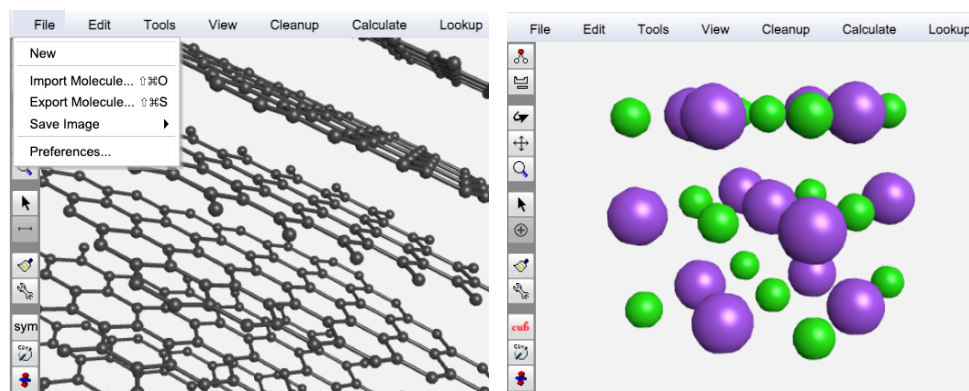
Para manipular la orientación de la molécula pulsamos el tercer icono de la parte izquierda, correspondiente a una flecha, y la movemos haciendo clic en ella. Para seleccionar átomos pulsamos el quinto icono de la parte izquierda, correspondiente a un puntero. Al hacer clic en dos átomos, el programa muestra en la parte inferior la distancia interatómica. Si se clicca un tercer átomo, se muestra el ángulo que forman.

(a) Molécula de BF_3 .

(b) Molécula de adenina.

Figura 6.6: Moléculas representadas en la interfaz [WebMO](#) a partir de su base de datos. Haciendo clic en dos átomos, como en (a), se obtiene su distancia interatómica.

La segunda manera de representar con [WebMO](#) es importar geometrías moleculares. Para ello, podemos recurrir a bases de datos online, como por ejemplo la web [3D Structures](#) de la Universidad de Milán [Web.6], de donde podemos descargar ficheros en formato `.xyz` que [WebMO](#) procesa. Para importarlos, pulsamos en la barra superior en *File* → *Import Molecule* y cargamos el archivo, indicando su formato y si queremos representar o no los enlaces interatómicos. En la [Figura 6.7](#) hemos importado las geometrías del grafito y la sal común NaCl , en las que los estudiantes pueden apreciar una periodicidad.



(a) Estructura del grafito.

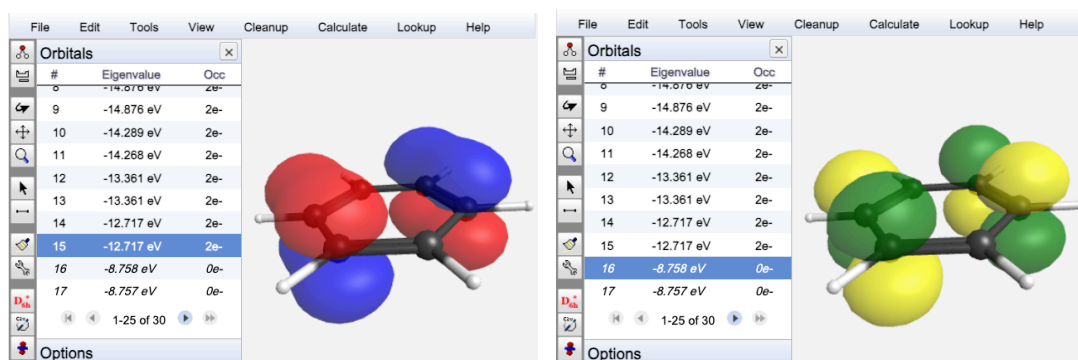
(b) Estructura del NaCl .

Figura 6.7: Estructuras periódicas representadas en [WebMO](#), importadas de una base de datos externos.

6.3.5. Sesión V: Orbitales moleculares y simetrías

Otros parámetros que podemos obtener con WebMO son los orbitales moleculares y las simetrías, empleando tanto el servidor web Demo como la app móvil. Describimos aquí el procedimiento a través del servidor web.

Para visualizar los orbitales moleculares, una vez hemos representado nuestra molécula de interés, escogemos la opción *Calculate* → *Huckel* → *Molecular Orbitals*. En el lateral derecho aparecerá un menú mostrando la energía de los diferentes orbitales (*Eigenvalues*) y sus ocupaciones (*Occ.*). Pulsando en cada energía visualizamos la forma del orbital en el espacio (Fig. 6.8).



(a) Último OM ocupado del benceno.

(b) Primer OM desocupado del benceno.

Figura 6.8: Orbitales moleculares del benceno. La subfigura (a) representa el último orbital ocupado (HOMO), mientras que la (b) representa el primer orbital desocupado (LUMO).

Las simetrías de una molécula tienen gran relevancia en sus propiedades. Existe una relación entre la simetría de una molécula y la forma que toman sus orbitales moleculares, así como con la manera en que sus átomos vibran, que no procede discutir en este nivel educativo. Aun así, representar los elementos de simetría ayuda a los estudiantes a desarrollar una mejor visión espacial y puede emplearse para deducir algunas propiedades, como indicamos más adelante en el documento. Para visualizarlos sobre la molécula, seleccionamos *Calculate* → *Symmetry* → *Display Symmetry Elements*. El programa representa los planos y ejes de simetría sobre la molécula (Fig. 6.9). También podemos representarlos de uno en uno pulsando *Calculate* → *Symmetry* → *Select Symmetry Elements* y escogiendo en el desplegable.

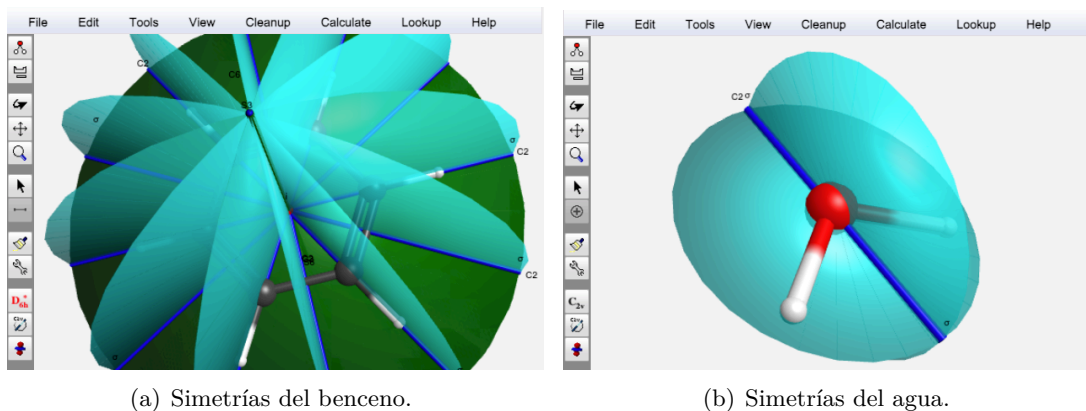


Figura 6.9: Representación de los elementos de simetría de las moléculas de benceno (a) y agua (b). El benceno es más simétrico que el agua.

6.3.6. Sesión VI: Cálculo de geometrías

Hasta ahora hemos trabajado con geometrías moleculares obtenidas de bases de datos, pero los programas de Química computacional permiten optimizar una geometría molecular hasta alcanzar su configuración de energía mínima mediante cálculos autoconsistentes. Instruimos a los alumnos en el cálculo de geometrías empleando WebMO para que puedan obtener sus propios datos e interpretar los resultados obtenidos. Ilustramos el procedimiento obteniendo la geometría de la molécula de agua.

Para construir el input, seleccionamos el segundo icono de la barra lateral, correspon-

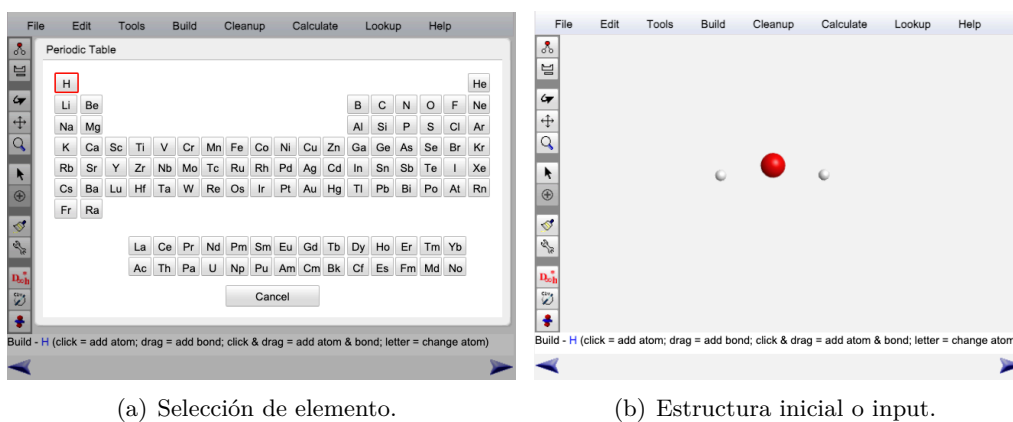


Figura 6.10: Construcción de un input con WebMO.

diente a una tabla periódica, escogemos un elemento y hacemos clic en el área de trabajo para colocar un átomo (Fig. 6.10).

Una vez tenemos listo el input, clicamos en la flecha de la esquina inferior derecha para seleccionar las opciones de cálculo. Escogemos como motor PSI4 (Fig. 6.11(a)). En la siguiente pestaña, escogemos la opción *Geometry optimization* en el desplegable *Calculations* (Fig. 6.11(b)). Dado que es un servidor gratuito y compartido, podemos dar un nombre a la tarea para distinguirla en la lista. No modificamos el resto de parámetros, pues son demasiado complejos para el propósito de esta actividad. Volvemos a pulsar siguiente para iniciar el cálculo, accediendo al gestor de tareas (Fig. 6.11(c)). Para visualizar la geometría optimizada de la molécula, hacemos clic el icono de la lupa (izquierda), mientras que el icono del folio lleva a un fichero con diversos datos de salida y del cálculo autoconsistente.

Engine	Description
<input type="radio"/> Gamess	Ab initio and semi-empirical calculations
<input type="radio"/> Gaussian	Ab initio and semi-empirical calculations
<input type="radio"/> Molpro	Ab initio calculations
<input type="radio"/> Mopac	Semi-empirical calculations
<input type="radio"/> NWChem	Ab initio calculations
<input type="radio"/> ORCA	Ab initio calculations
<input checked="" type="radio"/> PSI4	Ab initio calculations
<input type="radio"/> Quantum Espresso	Periodic plane wave DFT
<input type="radio"/> QChem	Ab initio calculations
<input type="radio"/> TeraChem	GPU-accelerated ab initio calculations
<input type="radio"/> Tinker	Molecular mechanics calculations
<input type="radio"/> XTB	Tight binding calculations

Job Options	Advanced	Preview	Notes
Job Name	H2O		
Calculation	Geometry Optimization		
Method	Hartree-Fock		
DFT Functional	B3LYP		
Basis Set	Routine: 6-31G(d)		
Charge	0		
Multiplicity	Singlet		
Reference	Restricted		

(a) Selección de motor de cálculo.

(b) Selección de parámetros de cálculo.

Number	Name	Description	Date	Status	Time	Actions
1286189	H2O	Geometry Optimization - PSI4	6/13/2023 15:22	Complete	1.0 sec	

(c) Gestor de tareas.

Figura 6.11: Opciones de configuración en el cálculo y gestor de tareas.

Clicamos en la lupa para visualizar nuestra molécula y su geometría. Podemos medir su distancia de enlace ($0,974 \text{ \AA}$) y su ángulo de enlace ($105,49^\circ$) haciendo clic en dos o en tres átomos respectivamente. Debajo del área de trabajo aparecen una serie de resultados del cálculo con iconos de lupa. Haciendo clic en las lupas podemos visualizar sobre la molécula propiedades como la distribución de cargas (Fig. 6.12(b)) o el momento dipolar que presenta la molécula (Fig. 6.12(c)).

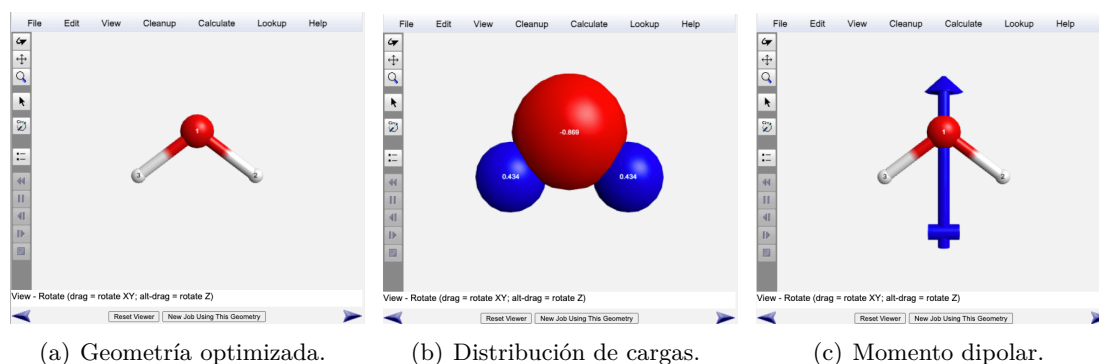
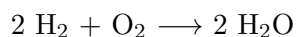


Figura 6.12: Resultado de la optimización.

6.3.7. Sesión VII: Estabilidad de una molécula

La energía molecular es uno de los parámetros que se pueden calcular mediante WebMO. Aprovechando esta información, proponemos a los alumnos determinar si la reacción de formación de una molécula es favorable desde el punto de vista energético, comparando la del producto con la de los reactivos por separado. Los alumnos deben escoger una molécula y su reacción de formación. Ilustramos con el caso de la formación de agua a partir de oxígeno e hidrógeno:



Accedemos al [servidor Demo de WebMO](#) mediante un navegador web. En primer lugar calculamos la energía molecular de las especies involucradas en la reacción. En este caso, no hemos realizado el cálculo de las geometrías, sino que las hemos buscado en la base de datos de WebMO.

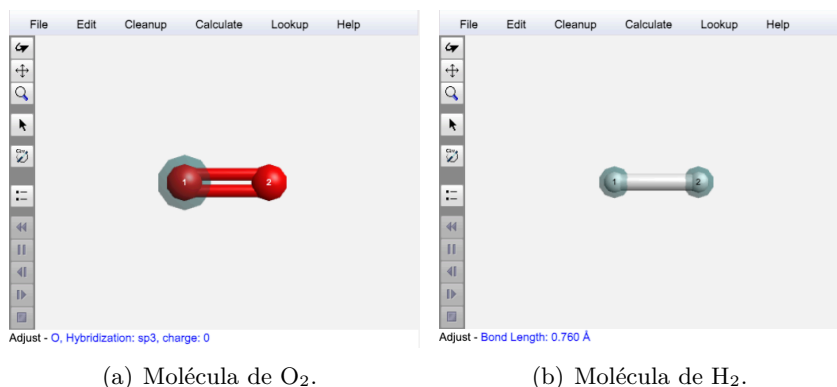


Figura 6.13: Moléculas de O₂ y H₂ representadas en la interfaz WebMO.

Para realizar el cálculo pulsamos en la flecha de la esquina inferior derecha, escogemos el programa Gaussian y, en la siguiente ventana, la opción *Molecular Energy* en el desplegable *Calculations* (Fig. 6.14).

Engine	Description
<input type="radio"/> Gamess	Ab initio and semi-empirical calculations
<input checked="" type="radio"/> Gaussian	Ab initio and semi-empirical calculations
<input type="radio"/> Molpro	Ab initio calculations
<input type="radio"/> Mopac	Semi-empirical calculations
<input type="radio"/> NWChem	Ab initio calculations
<input type="radio"/> ORCA	Ab initio calculations
<input type="radio"/> PSI4	Ab initio calculations
<input type="radio"/> Quantum Espresso	Periodic plane wave DFT
<input type="radio"/> QChem	Ab initio calculations
<input type="radio"/> TeraChem	GPU-accelerated ab initio calculations
<input type="radio"/> Tinker	Molecular mechanics calculations
<input type="radio"/> XTB	Tight binding calculations
Select Server	buchner.chem.hope.edu ▼

Job Options

Advanced

Preview

Notes

Job Name

Calculation

Theory

Basis Set

Charge

Multiplicity

Unrestricted

(a) Selección de motor de cálculo.

(b) Selección de parámetros de cálculo.

Figura 6.14: Opciones de selección de cálculo.

Una vez finalizados los cálculos, pulsamos la lupa y, consultando en la parte inferior al área de trabajo, anotamos la energía molecular *RHF Energy* (Restricted Hartree-Fock)

expresada en Hartree (Fig.6.15). Esta información también se puede consultar en el fichero de output (Fig.6.16).

Overview	
Quantity	Value
Job History	1286610
Route	#N HF/6-31G(d) SP Geom=Connectivity
Method	HF
Stoichiometry	H ₂ O
Symmetry	C2V
Basis	6-31G(d)
RHF Energy	-75.9914343671 Hartree
Dipole Moment	2.2006 Debye
Server	buchner.chem.hope.edu (31740)
CPU time	1.1 sec

Figura 6.15: Resumen de los resultados del cálculo de la molécula H₂O.

```
Requested convergence on MAX density matrix=1.00D-06.
Requested convergence on energy=1.00D-06.
No special actions if energy rises.
SCF Done: E(RHF) = -1.12620565382 A.U. after 4 cycles
NFock= 4 Conv=0.81D-09 -V/T= 2.0185
```

Figura 6.16: Fragmento de un output, con la energía molecular (Hartree) en amarillo.

Teniendo en cuenta la estequiometría de la reacción, verificamos que, en este caso, nuestra hipótesis inicial se verifica y la suma de la energía de los productos es menor que la de los reactivos por separado:

Molécula	Energía (Ha)
H ₂	-1,13
O ₂	-149,40
H ₂ O	-75,99
2 H ₂ + O ₂	-151,66
2 H ₂ O	-151,98

Cuadro 6.1: Energías moleculares.

6.3.8. Sesión VIII. Frecuencias de vibración

Los enlaces interatómicos de las moléculas no son fijos, sino que oscilan en torno a sus posiciones. Estos movimientos se pueden describir como combinación de una serie de vibraciones, con unos movimientos interatómicos determinados, a los que se llama modos normales de vibración. El número de modos normales de vibración que posee una molécula es $3N-6$, siendo N el número de átomos, salvo en el caso de moléculas lineales, que es $3N-5$. Cada modo normal tiene una frecuencia de oscilación característica, de manera que si se representan todas en una gráfica se obtiene el espectro vibracional de la molécula. Cuando una molécula se somete a sus frecuencias normales, se produce un fenómeno de resonancia y sus átomos comienzan a vibrar. Este es el fundamento físico del funcionamiento de un microondas, que aprovecha los modos normales de la molécula de agua para generar calor por medio de vibraciones y calentar los alimentos.



























Mode	Symmetry	Frequency (cm ⁻¹)	IR Intensity	Raman Intensity	Actions
1	A	851.63 (947.3085)	0.0194	0.0000	 
2	A	980.88 (1091.0788)	105.8637	0.0002	 
3	A	995.74 (1107.6089)	0.0022	3.6884	 
4	A	1057.86 (1176.7045)	0.0000	0.0003	 
5	A	1241.71 (1381.2072)	0.0000	1.5463	 
6	A	1354.73 (1506.9252)	0.0000	41.6914	 
7	A	1436.08 (1597.4174)	6.4796	0.0001	 
8	A	1688.83 (1878.5610)	0.0000	21.0554	 
9	A	2942.99 (3273.6318)	25.9008	0.0007	 
10	A	2965.08 (3298.1982)	0.0000	182.5522	 
11	A	3023.96 (3363.6876)	0.0000	119.4329	 
12	A	3049.58 (3392.1927)	37.2071	0.0005	 
Frequency Scale Factor					<input type="text" value="0.899"/>
Normal Mode Amplitude					<input type="text" value="1.0"/>
Animation Speed					<input type="text" value="50"/>
IR Spectrum					
Raman Spectrum					

Figura 6.17: Lista de las doce frecuencias de los modos normales de vibración de la molécula de etileno e intensidad de sus picos en los espectros infrarrojo y Raman.

Para visualizar las frecuencias de vibración a través del [servidor Demo de WebMO](#), es preciso realizar un cálculo previo. De manera similar a como procedimos en la sección anterior, una vez obtengamos una geometría molecular mediante cálculos o bases de datos, pulsamos la flecha inferior derecha. Escogemos como motor de cálculo Gaussian y, en el desplegable *Calculations*, la opción *Vibrational frequencies*. Una vez la tarea finaliza, pulsamos la lupa para ver los resultados.

Debajo de la ventana de trabajo encontramos una lista con las frecuencias o modos de vibración de la molécula (Fig. 6.23). WebMO ofrece dos formas de visualización. La lupa señala con flechas la dirección de movimiento de cada átomo (Fig. 6.18). El vídeo muestra una animación del movimiento de los átomos en ese modo. También es posible visualizar en una gráfica los espectros infrarrojo y Raman de la molécula.

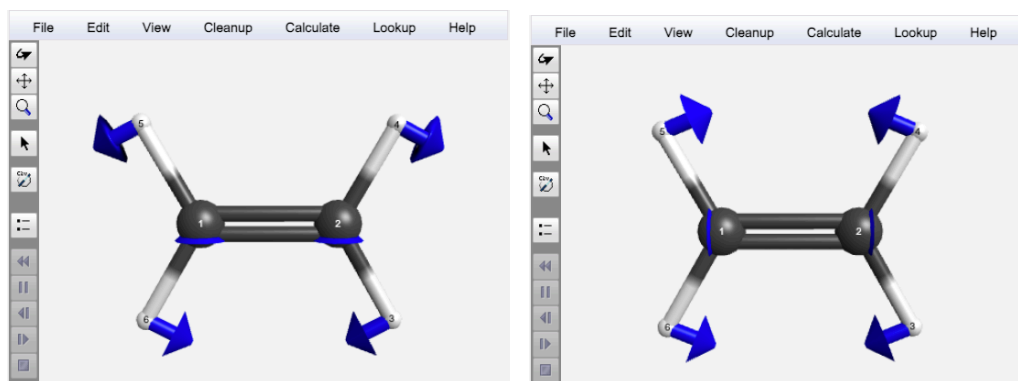


Figura 6.18: Algunos modos de vibración del etileno representados con flechas.

Como tarea de aplicación, proponemos a los alumnos estudiar las frecuencias de vibración de la molécula de agua para encontrar, con la ayuda del manual de instrucciones de un microondas, qué frecuencia es la que se emplea para calentar los alimentos.

6.3.9. Sesión IX: Química orgánica

Según la distribución que se sigue en la mayoría de centros, la Química orgánica se sitúa en el tercer trimestre, cerca del final del curso, por lo que es este momento los estudiantes ya estarán familiarizados con las funcionalidades de WebMO y tendrán mayor capacidad de trabajo autónomo. Proponemos a los alumnos un proyecto libre, en el marco

de la Química orgánica, en el que simulen una o varias moléculas de su elección y justifiquen alguna de las propiedades estudiadas en las clases teóricas en base los resultados que obtengan. Proporcionamos a los alumnos algunos ejemplos a modo de orientación e inspiración, que describimos aquí con fines de documentación para ilustrar algunos de los proyectos susceptibles de ser escogidos en el aula.

Isomería

Al igual que ocurre en el caso de las geometrías TRPEV, la visión espacial juega un papel importante en la Química orgánica y en el estudio de isómeros. Es frecuente que los estudiantes del Grado en Química empleen maquetas atómicas para ayudarse, pero los alumnos de instituto no suelen tener estas herramientas a su disposición.

Una alternativa es representar diferentes isómeros a través de la base de datos de WebMO, que permite rotar y mover los átomos y mostrar sus elementos de simetría, como apoyo a la hora de identificar tipos de isomería. A partir de las geometrías y el grado de simetría de los diferentes isómeros se pueden establecer relaciones entre algunas de sus propiedades, como el punto de fusión o ebullición.

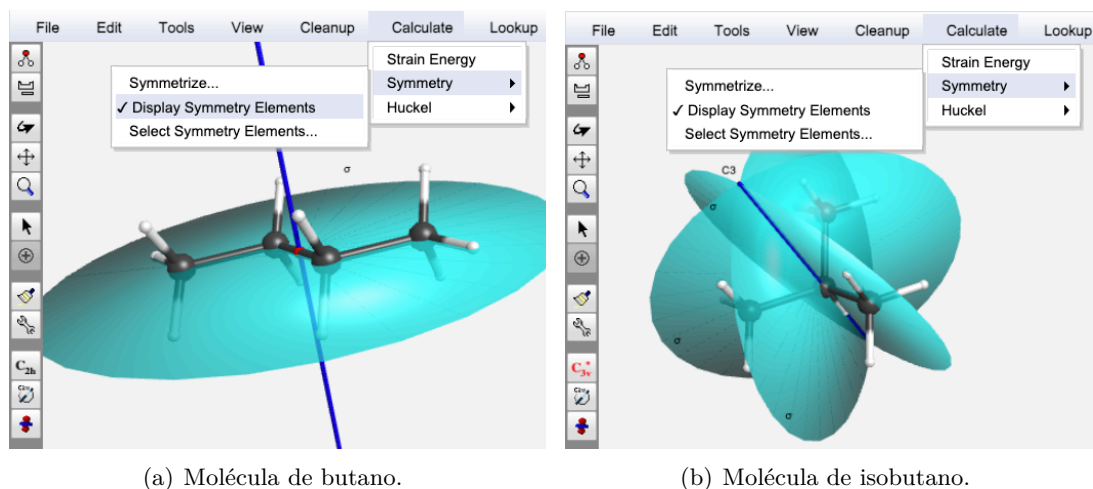


Figura 6.19: Isómeros estructurales del C_4H_{10} , representados con sus elementos de simetría.

Asimismo, podemos representar los orbitales moleculares de ambos isómeros para observar que la diferente distribución atómica cambia tanto sus formas como sus energías.

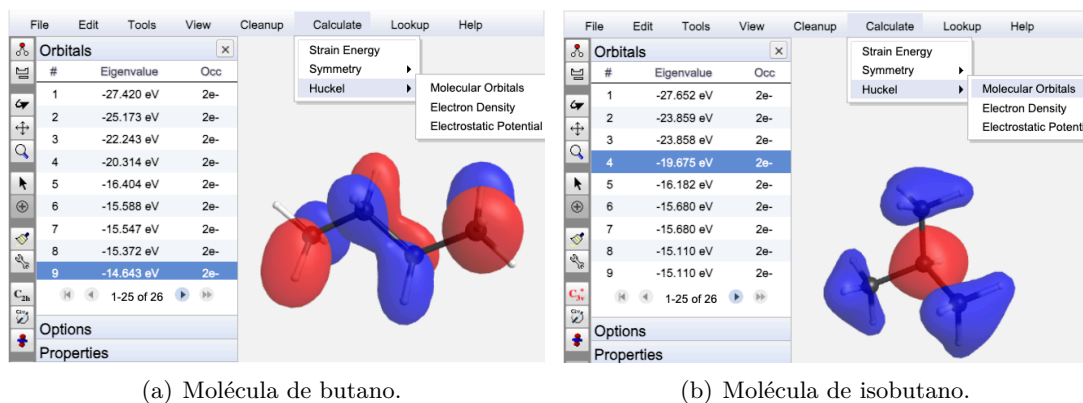


Figura 6.20: Isómeros estructurales del C_4H_{10} , representados con uno de sus orbitales moleculares (c,d).

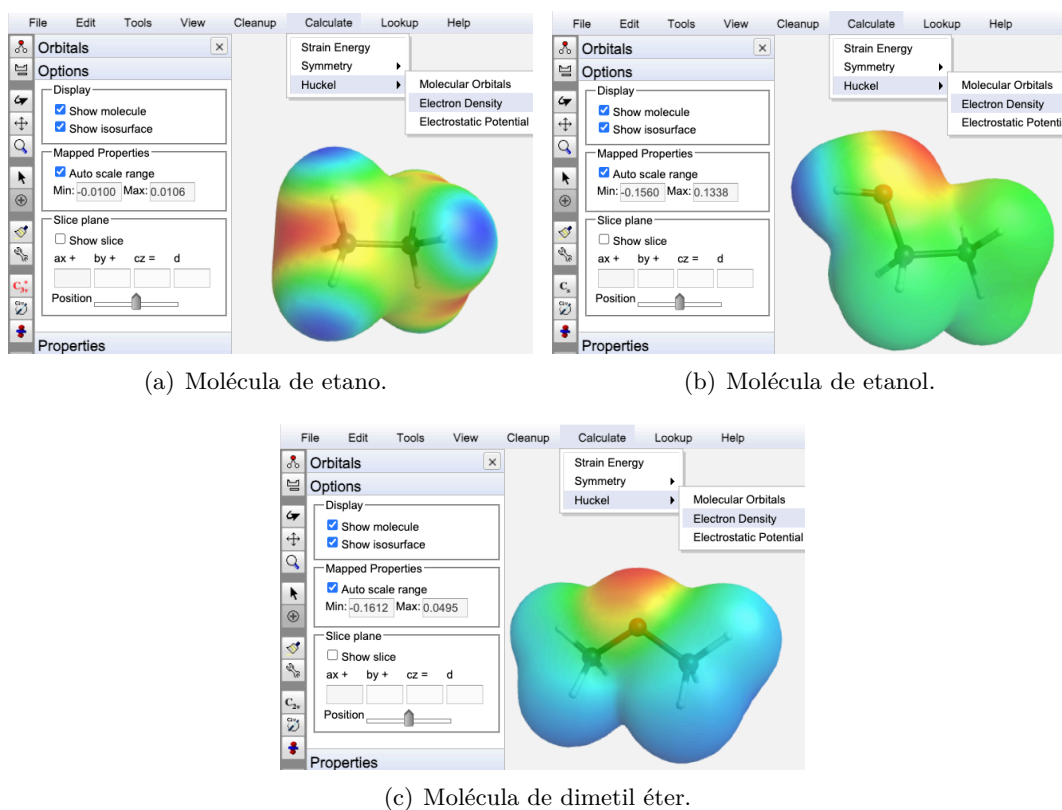


Figura 6.21: Representación del potencial electrostático de las moléculas de etano (a), etanol (b) y dimetil éter (c). Las dos últimas (b,c) son isómeros de función del C_2H_6O .

Polaridad

Otra propiedad interesante que podemos observar es el potencial electrostático, que se deriva de la distribución de cargas a lo largo de la molécula. Para ello, pulsamos en la pestaña *Calculate* → *Huckel* → *Electrostatic potential*. Este potencial nos permite obtener información sobre la polaridad de la molécula. La presencia de un dipolo afecta a los enlaces intermoleculares que puede formar una molécula, y esto, a su vez, a propiedades como la solubilidad.

En el ejemplo de la Figura 6.21 representamos el potencial electrostático para las moléculas de etano, etanol y dimetil éter. Podemos observar que el etano no presenta momento dipolar, pues las cargas se compensan a lo largo de toda la molécula. La adición del oxígeno, que es muy electronegativo, genera una redistribución de cargas, de manera que el etanol y el dimetil éter sí presentan dipolos. El dipolo del etanol se localiza en el grupo –OH, mediante el que puede formar puentes de hidrógeno. En el caso del dimetil éter, la forma angular de la molécula induce un dipolo global.

6.4. Evaluación

La evaluación es el conjunto de herramientas que permite determinar si un estudiante ha satisfecho una serie de requisitos en su proceso de aprendizaje. Para ello, el profesor se vale de una serie de métodos de evaluación, así como de unos criterios de evaluación que se establecen mediante una rúbrica. En esta sección describimos cómo se evalúa a los alumnos en esta propuesta de innovación.

A pesar de ser un proyecto que se alarga durante todo el curso, su evaluación se plantea con distintos enfoques en cada trimestre, pues tiene una carga desigual en sus currículos.

Durante el primer trimestre evaluamos la realización de las actividades en el aula y el desarrollo de un proyecto de libre elección. Este proyecto se elabora en grupos reducidos de 3 o 4 alumnos con orientación del tutor. Se entregará una memoria con extensión máxima de 8 páginas y se realizará una exposición ante la clase de entre 5 y 10 minutos. El proyecto supondrá un 20 % de la nota trimestral, distribuida de la siguiente manera:

Actividades en el aula	Memoria del proyecto grupal	Exposición
5 %	5 %	10 %

En el segundo trimestre se plantea un proyecto de investigación de carácter voluntario en el que, mediante la revisión de noticias y artículos científicos, se ponga de manifiesto la utilidad de la Química computacional en la sociedad. Se realizará en grupos reducidos de 2 o 3 alumnos. Se entregará una memoria con extensión máxima de 4 páginas y se realizará una breve exposición de 5 minutos ante la clase seguido de 5 minutos de debate con el resto de compañeros. Participar activamente en todos los debates será también valorado. Los alumnos que realicen esta tarea podrán optar a un máximo de un punto extra, que se sumará a la nota del trimestre, distribuido de la siguiente manera:

Memoria del proyecto grupal	Exposición	Participación en los debates
hasta 0,4 puntos	hasta 0,4 puntos	hasta 0,2 puntos

Finalmente, en la tercer trimestre se plantea un proyecto en el que se apliquen los recursos aprendidos a estudiar un problema en el área de la Química orgánica. Se realizará en grupos reducidos de 2 o 3 alumnos. Se entregará una memoria con extensión máxima de 8 páginas y se realizará una breve exposición de 5 minutos ante la clase. Al igual que en la evaluación anterior, los alumnos que realicen esta tarea podrán optar a un máximo de un punto extra, que se sumará a la nota del trimestre, distribuido de la siguiente manera:

Memoria del proyecto grupal	Exposición en el aula
hasta 0,4 puntos	hasta 0,6 puntos

Para evaluar cada parte el profesor se vale de una rúbrica, elaborada en base a la adquisición de competencias específicas de la asignatura que se regulan en el Decreto 40/2022, de 29 de septiembre del BOCYL [6]. El grado de adquisición de las competencias se determina a través de una serie de indicadores de logro. En líneas generales, los aspectos a tener en cuenta serán el orden y la coherencia, el uso de un vocabulario científico adecuado, el uso de magnitudes científicas y de sus correspondientes unidades y la justificación de los resultados obtenidos en base a teorías científicas.

De igual manera, al incorporar propuestas educativas innovadoras en el aula es importante realizar una evaluación de la actividad y del profesor que la lleva a cabo con el fin de corroborar su eficacia y si satisface los objetivos planteados. Para ello, además de contar con los materiales entregados por los alumnos y la observación en el aula, prevemos realizar un cuestionario entre los estudiantes en el que expliquen brevemente sus impresiones y va-

loren en una escala numérica su grado de satisfacción con aspectos como la adecuación de los contenidos, el equilibrio entre explicaciones y prácticas, la variedad de las actividades, la organización y el papel del profesor como guía.

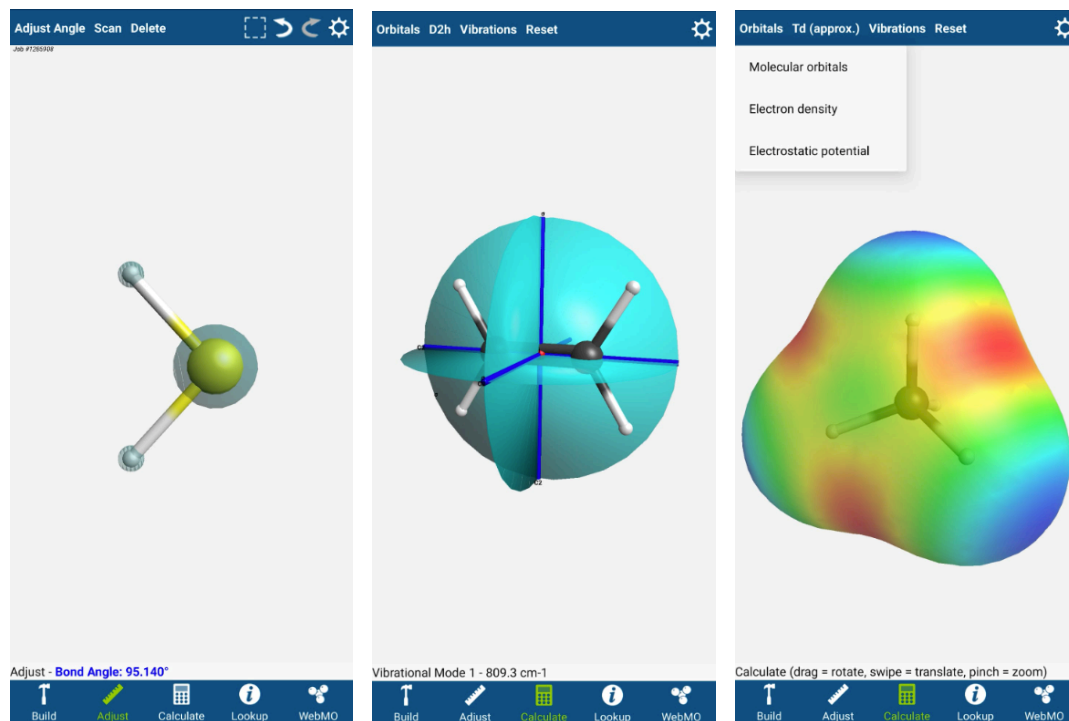
6.5. Adaptación a Física y Química de 1º Bachillerato con uso del smartphone

De acuerdo con el calendario académico de nuestra comunidad autónoma, las evaluaciones ordinarias de los alumnos se deben completar a principios del mes de junio, lo que provoca que los alumnos que han superado las asignaturas se encuentren con alrededor de tres semanas en las que no hay temario que impartir. Aprovechando este periodo, se plantea que los alumnos de 1º de Bachillerato realicen algunas de las actividades descritas anteriormente, que no serán evaluables, de forma que quienes continúen estudiando Química en 2º cuenten con una introducción a la propuesta que desarrollarán en el curso siguiente y, quienes no cursen la asignatura, adquieran algunas nociones de la materia.

Para esta adaptación proponemos el uso de la app [WebMO](#) en dispositivos móviles. A pesar de que tiene más limitaciones que el servidor web, su interfaz es más sencilla y el uso de smartphones resulta atractivo para los alumnos. Abordamos de manera simplificada las sesiones IV, V, VIII y IX, pues consideramos que son las más visuales y atractivas para que el alumno desarrolle motivación de cara al curso siguiente o, en caso de no continuar, conserve un buen recuerdo de su paso por la Química y una actitud positiva hacia la ciencia.

El uso de la aplicación WebMO es análogo al del servidor web, con una interfaz simplificada. En la parte inferior de la pantalla se encuentra el menú principal y en la superior el submenú de cada apartado.

La pestaña *Build* permite construir moléculas escogiendo elementos de la tabla periódica (*P-table*). La pestaña *Adjust* permite manipular las distancias interatómicas y ángulos al pulsar en los distintos átomos. La pestaña *Calculate* permite mostrar en pantalla propiedades como los orbitales moleculares, el potencial electrostático y las simetrías. En la pestaña *Lookup* se pueden importar estructuras (*Importar*) y obtener información de la molécula representada (*Info/Databases*) mediante bases de datos. La pestaña *WebMO* permite iniciar cálculos (*Submit*) y acceder al gestor de tareas (*Job Manager*).



(a) Medida y manipulación del ángulo de H_2S . (b) Elementos de simetría del etileno. (c) Potencial electrostático del metano.

Figura 6.22: Capturas de algunas funcionalidades de la app WebMO.

Para calcular frecuencias vibracionales, representamos nuestra molécula y comenzamos un cálculo pulsando *Submit*. En el caso de la app, hay menos parámetros variables que en el servidor web. Escogemos *Optimize + Vib Freq* en el desplegable para asegurar que la geometría molecular está optimizada y obtener las frecuencias. El gestor de tareas es idéntico al de la versión web. Pulsando en la lupa se muestra la molécula optimizada. En la esquina superior izquierda, pulsando *Results*, accedemos a un resumen de las propiedades calculadas, entre las que encontraremos la lista de modos normales de vibración y las intensidades de sus picos. Al igual que en la web, podemos ver los modos indicados con flechas, una animación de cada modo de vibración y el espectro IR de la molécula.

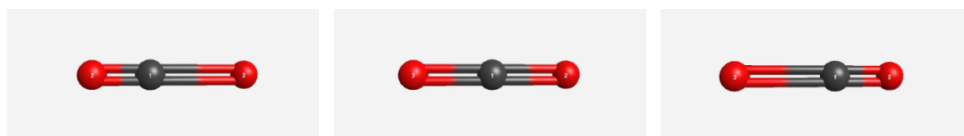
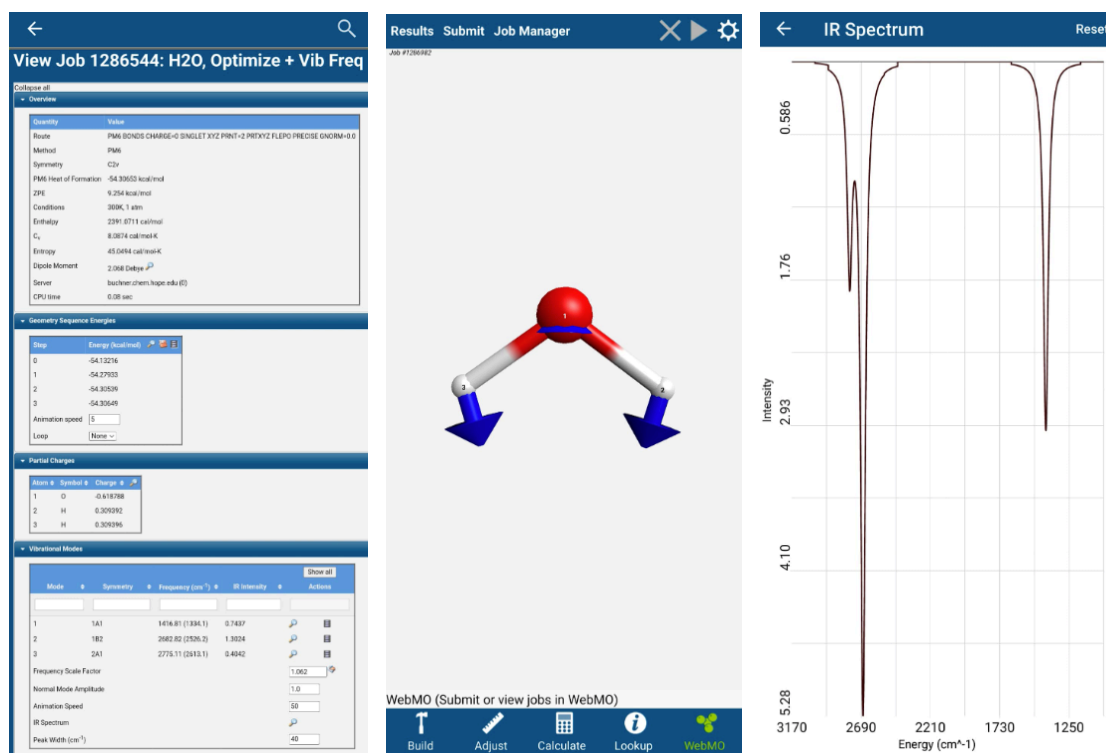


Figura 6.23: Capturas de la animación de un modo de vibración del CO_2 .



(a) Resultados del cálculo.

(b) Representación de un modo.

(c) Espectro IR del agua.

Figura 6.24: Capturas del cálculo de frecuencias vibracionales para el H₂O.

6.6. Atención a la diversidad

Dada la diversidad y unicidad de cada estudiante, es frecuente encontrar uno o varios casos de alumnos con necesidades especiales en las aulas. Los recursos TIC y las metodologías activas proporcionan una gran flexibilidad a la hora de realizar adaptaciones a las circunstancias de cada uno.

El uso de laboratorios virtuales a través de ordenadores y smartphones resulta muy positivo a la hora de integrar a aquellos alumnos que presenten limitaciones motrices, ya que no requieren una manipulación como es el caso de los laboratorios convencionales. En el caso de existir alumnos con hipoacusia se les proporcionará un guión de las presentaciones que el docente hace previamente a la realización de las actividades, de manera que puedan revisarlo con antelación y seguir las explicaciones sin problema. En relación a trastornos de déficit de atención e hiperactividad (TDAH), el uso de las TIC reduce los síntomas y actividades distractorias [53]. De igual manera, facilitan la integración de

los alumnos con trastorno del espectro autista (TEA) en el desarrollo de una actividad [54].

A la hora de abordar la diversidad intelectual en el Bachillerato, la versatilidad de estas herramientas y la libertad en la elección de una temática permite adaptar el nivel de profundización. Un abordaje más superficial y divulgativo, en la línea de la adaptación al primer curso de Bachillerato, consistiría en representar de moléculas obtenidas a partir de un banco de datos y visualizar sus propiedades cualitativamente, mientras que aumentar el nivel para una adaptación a altas capacidades podría abordar el estudio del fundamento cuántico de la Química computacional, la simulación de sistemas de complejidad, como sólidos cristalinos y sus estructuras de bandas o el análisis de los distintos parámetros de salida en mayor profundidad.

Capítulo 7

Conclusiones y perspectivas

Hemos desarrollado una propuesta innovadora para llevar al aula de Química de Bachillerato el uso de herramientas sofisticadas de Química computacional, que se integran en el desarrollo del curso académico, aportando una nueva perspectiva experimental a un área de la Química en la que los alumnos de instituto no tienen posibilidad de realizar experiencias de laboratorio. El apoyo visual y la posibilidad de manipular estructuras de átomos y moléculas contribuyen a la mejora de la visión espacial de los alumnos, que desarrollan una mayor sensibilidad para predecir geometrías moleculares a través de la interacción directa con diferentes sistemas. A pesar de que existen pocos precedentes de su uso, creemos que la introducción de softwares de computación en la Química de instituto se plantea como un campo prometedor entre las metodologías de aprendizaje innovadoras.

Nuestra propuesta tiene un carácter motivador, basándose en el uso de metodologías activas y TIC, que fomentan la adquisición de competencias y hacen de los estudiantes los protagonistas de su proceso de aprendizaje. Ofreciendo al alumno las herramientas necesarias para resolver problemas de manera autónoma, fomentamos su creatividad y emprendimiento. Además, el uso de softwares de investigación contribuyen a educar en un contexto global que ponga de manifiesto los desafíos de las sociedades modernas y cómo, a través de la ciencia y la investigación, avanzamos hacia un futuro tecnológico y sostenible.

Como perspectivas para la continuación de este proyecto planteamos la implementación de las propuestas desarrolladas en un aula de instituto, el análisis de su impacto en el alumnado y la adaptación y ampliación de las actividades realizadas en función de su desempeño. Asimismo, se prevé su integración en aulas universitarias como parte del proyecto de innovación PID-002-2022-23 de la UVA.

Bibliografía

1. Heering, P., & Wittje, R. (2012). *An historical perspective on instruments and experiments in science education*. *Science & Education*, 21, 151-155.
2. Krijtenburg-Lewerissa, K., Pol, H. J., Brinkman, A., & Van Joolingen, W. R. (2017). *Insights into teaching quantum mechanics in secondary and lower undergraduate education*. *Physical review physics education research*, 13(1), 010109.
3. Ochterski, J. W. (2014). *Using computational chemistry activities to promote learning and retention in a secondary school general chemistry setting*. *Journal of chemical education*, 91(6), 817-822.
4. Amores-Valencia, A. & De-Casas-Moreno, P. (2019). *El uso de las TIC como herramienta de motivación para alumnos de enseñanza secundaria obligatoria estudio de caso Español*. *Hamuttay*, 6(3), 37-49.
5. Polik, W. F., & Schmidt, J. R. (2022). *WebMO: Webbased computational chemistry calculations in education and research*. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 12(1), e1554.
6. Boletín Oficial de Castilla y León (B.O.C.Y.L.). Decreto 40/2022, de 29 de septiembre, por el que se establece la ordenación y el currículo del bachillerato en la Comunidad de Castilla y León.
7. Boletín Oficial del Estado (B.O.E.). Ley Orgánica 3/2020, de 29 de diciembre, por la que se modifica la Ley Orgánica 2/2006, de 3 de mayo, de Educación.
8. Naciones Unidas (2018), *La Agenda 2030 y los Objetivos de Desarrollo Sostenible: una oportunidad para América Latina y el Caribe* (LC/G.2681-P/Rev.3), Santiago
9. Boletín Oficial de Castilla y León (B.O.C.Y.L.). Decreto 40/2022, de 29 de septiembre, por el que se establece la ordenación y el currículo de la educación secundaria

obligatoria en la Comunidad de Castilla y León.

10. Bohr, N. (1913). *On the constitution of atoms and molecules*. Philosophical Magazine, 26, 1-25.
11. Schrödinger, E. (1926). *An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules*. Physical Review, 28, 1049.
12. Dirac, P. A. M. (1927). *The quantum theory of the emission and absorption of radiation*. Proceedings of the Royal Society A, 114, 243-265.
13. Lewis, G. N. (1916). *The atom and the molecule*. Journal of the American Chemical Society, 38(4), 762-785.
14. Gillespie, R. (1963). *The valence-shell electron-pair repulsion (VSEPR) theory of directed valency*. Journal of Chemical Education, 40(6), 295.
15. Gillespie, R. J. (2004). *Teaching molecular geometry with the VSEPR model*. Journal of Chemical Education, 81(3), 298.
16. Esselman, B. J., & Blovk, S. B. (2019) *VSEPR-Plus: Correct Molecular and Electronic Structures Can Lead to Better Student Conceptual Models*. Journal of Chemical Education, 96, 75-81.
17. Laing, M. (1987). *No rabbit ears on water. The structure of the water molecule: What should we tell the students?* Journal of Chemical Education, 64, 2, 124.
18. Heitler, W., & London, F. (1927). *Wechselwirkung neutraler Atome und homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik*. Zeitschrift für Physik, 44(6-7), 455-472.
19. Real Academia Española: Diccionario de la lengua española, 23.ª ed., versión 23.6 en línea. (<https://dle.rae.es>).
20. Lakatos, I. (1974). *The role of crucial experiments in science*. Studies in History and Philosophy of Science Part A, 4(4), 309-325.
21. Hofstein, A., & Lunetta, V. N. (2003). *The laboratory in science education: Foundations for the twenty-first century*. Science Education, 88(1), 2854.
22. de Jong, O. (1998). *Los experimentos que plantean problemas en las aulas de química: dilemas y soluciones*. Enseñanza de las Ciencias. Revista de investigación y experiencias didácticas, 16(2), 305-314.

23. Durban, A. (1941) *Teaching weighing technic with the aid of a motion picture film* Journal of Chemical Education, 18, 11, 520.
24. de los Reyes, R. G. (2021). *Desafíos de la educación virtual en tiempos de pandemia laboratorios de física utilizando las TIC*. Latin-American Journal of Physics Education, 15(2), 1.
25. García, M. L., & Ortega, J. G. M. (2007). *Las TIC en la enseñanza de la Biología en la educación secundaria: los laboratorios virtuales*. Revista electrónica de enseñanza de las ciencias, 6(3), 562-576.
26. Wörner, S., Kuhn, J., & Scheiter, K. (2022). *The best of two worlds: a systematic review on combining real and virtual experiments in science education*. Review of Educational Research, 92(6), 911-952.
27. Blake, C., & Scanlon, E. (2007). Reconsidering simulations in science education at a distance: features of effective use. Journal of Computer Assisted Learning, 23(6), 491502.
28. Stinken-Rösner, L. (2020). *Simulations in science education Status Quo*. Progress in Science Education (PriSE), 3(1), 26-34.
29. Silva, F. D. et al. (2015). *Computational chemistry programs as a facilitating tool in the teaching and learning process*. British Journal of Education, Society & Behavioural Science, 8(2), 134-146.
30. Zdanovskaia, M. A. et al. (2018). *Access to computational chemistry for community colleges via WebMO*. Journal of Chemical Education, 95(11), 1960-1965.
31. Esselman, B. J., & Hill, N. J. (2016). *Integration of computational chemistry into the undergraduate organic chemistry laboratory curriculum*. Journal of Chemical Education, 93(5), 932-936.
32. Bendavid, L. I. (2023). *High-Performance Computational Chemistry in Undergraduate Physical Chemistry: Exercises in Homonuclear Diatomic Molecules*. Journal of Chemical Education, 100(1), 389-394.
33. Ericsson, J. et al. (2016). *Involving high school students in computational physics university research: Theory calculations of toluene adsorbed on graphene*. PLoS ONE, 11(8), e0159168.

34. Ryan, R. M., & Deci, E. L. (2000). *Intrinsic and extrinsic motivations: Classic definitions and new directions*. Contemporary educational psychology, 25(1), 54-67.
35. Fishbach, A. & Woolley, K. (2022). *The structure of intrinsic motivation*. Annual Review of Organizational Psychology and Organizational Behavior, 9, 339-363.
36. Mahdi, J. G. (2014). *Student attitudes towards chemistry: An examination of choices and preferences*. American Journal of Educational Research, 2(6), 351-356.
37. Coca, D. M. (2015). *Estudio de las motivaciones de los estudiantes de secundaria de física y química y la influencia de las metodologías de enseñanza en su interés*. Educación XX1, 18(2), 215-235.
38. Colás Bravo, M. P., Reyes de Cózar, S., & Conde Jiménez, J. (2018). *Los usos de las TIC en las aulas como factor predictivo del estado emocional de los estudiantes*. Currículum: Revista de Teoría, Investigación y Práctica Educativa, 31, 9-30.
39. Huang, S., Jiang, Y., Yin, H., & Jong, M. S. Y. (2021). *Does ICT use matter? The relationships between students' ICT use, motivation, and science achievement in East Asia*. Learning and Individual Differences, 86, 101957.
40. Prieto-Andreu, J. M., Gómez-Escalonilla-Torrijos, J. D., & Said-Hung, E. (2022). *Gamificación, motivación y rendimiento en educación: Una revisión sistemática*. Revista Electrónica Educare, 26(1), 251-273.
41. Konopka, C. L., Adaime, M. B., & Mosele, P. H. (2015). *Active teaching and learning methodologies: some considerations*. Creative Education, 6(14), 1536.
42. Ausubel, D. P. (1962). *A subsumption theory of meaningful verbal learning and retention*. The Journal of general psychology, 66(2), 213-224.
43. Bruner, J. S. (1961). *The act of discovery*. Harvard educational review, 31, 21-32.
44. Coronilla, A. S. (2010) *ABP y TICs adaptados a los laboratorios de prácticas de química física: su inserción e implementación*. Pixel-Bit. Revista de Medios y Educación, 37, 29-42.
45. Sánchez, J. (2013). *Qué dicen los estudios sobre el Aprendizaje Basado en Proyectos*. Actualidad pedagógica, 1(4).
46. Rodríguez, I. R., & Vílchez, J. G. (2015). *El Aprendizaje Basado en Proyectos: un constante desafío*. Innovación educativa, (25), 219-234.

47. Collazos, C. A., & Mendoza, J. (2006). *Cómo aprovechar el aprendizaje colaborativo en el aula*. Educación y educadores, 9(2), 61-76.
48. Seery, M. K. (2015). *Flipped learning in higher education chemistry: emerging trends and potential directions*. Chemistry Education Research and Practice, 16(4), 758-768.
49. Lemke, J. L. (2006). *Investigar para el futuro de la educación científica: nuevas formas de aprender, nuevas formas de vivir*. Enseñanza de las Ciencias. Revista de investigación y experiencias didácticas, 24(1), 5-12.
50. Silva, A. G. (2014). *El aprendizaje significativo vivencial en las Ciencias Naturales*. EduSol, 14(49), 1-13.
51. Velasco Sanz, A. M. (2017). *Monográfico Aprender viviendo la ciencia: Presentación*. Tabanque: Revista pedagógica, 30, 29-34.
52. Alvarado, M. A. C., Delgado, J. C. S., & Barrantes, I. G. V. (2017). *Diseño de situaciones educativas innovadoras como estrategia didáctica para fortalecer el proceso de enseñanza-aprendizaje*. Didasc@lia: Didáctica y Educación, 8(2), 99-116.
53. Domínguez, M. A. (2020). *Actividades tradicionales y actividades con TIC en la enseñanza y el aprendizaje de la física. El caso de un estudiante con TDA*. Revista de Educación Inclusiva, 13(1), 241-257.
54. Muñoz Rubio, A. F. (2018). *El futuro de las TIC en TEA*. Publicaciones didácticas, 94, 237-244.

Recursos web

1. Dispersión de Rutherford. Phet Interactive Simulations. Universidad de Colorado Boulder. (<https://phet.colorado.edu/es/simulations/rutherford-scattering>)
2. Ptable. Tabla periódica interactiva. Michael Dayah. (<https://ptable.com/>)
3. Forma de la molécula. Phet Interactive Simulations. Universidad de Colorado Boulder. (<https://phet.colorado.edu/es/simulations/molecule-shapes>)
4. Servidor Demo WebMO. WebMO, LLC. (<https://www.webmo.net/demo/>)
5. App móvil WebMO. WebMO, LLC. (<https://play.google.com/store/apps/details?id=net.webmo.android.moledit>)
6. 3D Structures. Base de datos de geometrías moleculares. Universidad de Milan. (<http://materia.fisica.unimi.it/manini/dida/structures.html>)