

Ideas para el aula

DE LA ESTRUCTURA A LAS PROPIEDADES DE LOS CICLOALCANOS: UNA ESTRATEGIA DIDÁCTICA BASADA EN LA UTILIZACIÓN DE SOFTWARE DE MODELADO MOLECULAR

Lucas Ariel Giraudó

Instituto Politécnico Superior 'General San Martín', Universidad Nacional de Rosario, Av. Pellegrini 250, CP 2000, Rosario. Argentina.

E-mail: lucas.a.giraudó@gmail.com

Resumen: El estudio de los Cicloalcanos es de importancia en el desarrollo curricular de la Química en la escuela secundaria, dada la frecuencia con la que se encuentran en la naturaleza las estructuras cíclicas distintivas de este grupo. Éstas aparecen en muy diversos compuestos tales como hidratos de carbono, esteroides y antibióticos, sustancias que cumplen funciones centrales en los sistemas biológicos, así como también en el petróleo, fuente de combustibles y materias primas para la industria de procesos. En este trabajo se expone una estrategia didáctica para el desarrollo de la unidad conceptual correspondiente a la estructura y propiedades de los Cicloalcanos, basada en la utilización del programa de modelado molecular de acceso libre ACD/Chemsketch v12.01 con el cual los estudiantes pueden generar, visualizar y manipular representaciones tridimensionales de las moléculas de estos compuestos.

Palabras clave: Educación secundaria, Cicloalcanos, TICs, Modelado Molecular, Habilidad espacial.

From the Structure to the properties of Cycloalkanes: A didactic strategy based on the use of molecular modeling software

Abstract: The study of Cycloalkanes is important in the curriculum development of Chemistry in secondary school, given the frequency with which the distinctive cyclical structures of this group are found in nature. They appear in diverse compounds such as carbohydrates, steroids and antibiotics, substances that fulfill central functions in biological systems, as well as in petroleum, source of fuels and raw materials for the process industry. This paper presents a didactic strategy for the development of the conceptual unit corresponding to the structure and properties of the Cycloalkanes, based on the use of the free access molecular modeling program ACD/Chemsketch v12.01 with which students can generate, visualize and manipulate three-dimensional representations of the molecules of these compounds.

Key words: Secondary education, Cycloalkanes, TICs, Molecular Modeling, Spatial ability.

FUNDAMENTACIÓN

La propuesta que se expone en este trabajo fue implementada en el marco de la asignatura Química Orgánica con un grupo de 34 estudiantes que se encontraban cursando el cuarto año de su educación secundaria en el Instituto Politécnico Superior "General San Martín", escuela pre-universitaria dependiente de la Universidad Nacional de Rosario.

Durante el desarrollo previo del cursado de la asignatura, los estudiantes habían trabajado los conceptos de enlace químico, estructuras de Lewis, orbitales moleculares, orbitales híbridos y geometría del átomo de Carbono, geometría molecular de los alcanos de cadena abierta, reacción de combustión, calor de combustión y estabilidad de alcanos.

La estrategia de enseñanza puesta en práctica, centrada en los cicloalcanos, tuvo como objetivo propiciar un proceso en el que los estudiantes, participando activamente, elaboraran modelos mentales complejos que les permitan reconstruir las explicaciones científicas de los fenómenos naturales en estudio.

La misma se enmarca dentro de la propuesta para el Ciclo Orientado de Educación Secundaria de los Núcleos de Aprendizaje Prioritarios (NAP) del Ministerio de Educación de la Nación, donde se establece que la escuela ofrecerá situaciones de enseñanza que promuevan en las y los estudiantes: *"la construcción y utilización de modelos científicos escolares, contextualizados en cuestiones socio-científicas, a partir del diseño y desarrollo de procesos de indagación científica escolar"* para lo cual supone, entre otras cuestiones: *"el uso y/o desarrollo de simulaciones y de modelizaciones en soporte físico y digital"* y *"el uso de las TIC como estrategia de apropiación de saberes..."*.

Específicamente para la Química en el Ciclo Orientado, los NAP establecen como uno de sus ejes: *"la explicación y predicción de propiedades de sustancias y materiales de interés en la vida diaria y/o de relevancia científica-tecnológica... utilizando los diferentes niveles de descripción de la materia – macro, micro y submicroscópico - y modelos científicos escolares, tales como el de enlaces químicos, el de geometría molecular y el de interacciones intermoleculares."*

Asimismo, la propuesta se vincula con los lineamientos presentes en el Diseño Curricular de la provincia de Santa Fe donde se plantea que: *"en el estudio de la Química se pone de manifiesto el importante hecho de que las propiedades observables (macroscópicas) de los materiales son el resultado de estructuras y procesos en los niveles atómico y molecular"*.

Con el objetivo de superar la fragmentación del currículum en asignaturas aisladas, el Ministerio de Educación de Santa Fe generó los Núcleos

Interdisciplinarios de Contenidos (NIC). Entre las temáticas consideradas, se propone como una categoría de análisis la Química Computacional, presentándola como un: *"nuevo campo de estudio que tiene como objetivo crear aproximaciones matemáticas y software específico que permita el cálculo del comportamiento y propiedades de sistemas moleculares, permitiendo el estudio de estructuras tridimensionales, de propiedades de los sistemas, del diseño de nuevas sustancias, etc."*

Como se indica en los NAP, en el estudio y comprensión de las diferentes ramas de la Química, pueden diferenciarse tres niveles de representación: los niveles macroscópico, submicroscópico y simbólico. La macroquímica corresponde a los fenómenos directamente observables, a los que se les da sentido mediante una química representacional, basada en las teorías desarrolladas en el nivel de la submicroquímica.

El aprendizaje de la química requiere, por tanto, entender las relaciones entre ese mundo macroquímico, las explicaciones en el nivel submicroquímico y los sistemas de representación que intentan dar cuenta en términos químicos de esos fenómenos (Lorenzo y Pozo, 2010).

Para esto es necesario el desarrollo de una concepción tridimensional de las moléculas, esto es, comprender cómo se unen los átomos para formarlas, el orden en que lo hacen, las formas y tamaños de las moléculas que generan y el modo de distribución de los electrones a su alrededor, por lo que se torna relevante, entre otras cuestiones, desarrollar la habilidad espacial de los estudiantes, es decir, la capacidad para generar, retener y manipular imágenes espaciales abstractas (Harle y Towns, 2011).

En este proceso, acceder a una imagen clara y precisa del objeto en estudio resulta indispensable, y es por ello que la utilización de imágenes tales como modelos icónicos de las moléculas, basados en la Teoría Estructural, cumple un rol central en el proceso de enseñanza-aprendizaje de la Química.

Teniendo en cuenta lo antes referido, el estudio de los cicloalcanos implica un desafío para docentes y estudiantes dado que, según el modelo aceptado en la actualidad y basado en la teoría originalmente propuesta por Adolf von Baeyer, los anillos formados por los átomos de Carbono en estas moléculas adoptan geometrías tridimensionales complejas en las que se generan tensiones internas que explican las propiedades distintivas del grupo respecto de los alcanos de cadena abierta.

La representación gráfica e interpretación de estas estructuras en soportes bidimensionales como el pizarrón o una hoja de papel implica para los estudiantes una elevada demanda cognitiva en el dominio espacial y constituye, frecuentemente, un impedimento significativo para la comprensión del tema (Chandler y Sweller, 1991).

Por su parte, el resultado de numerosas investigaciones indica que la utilización de herramientas computacionales para crear, visualizar y ma-

nipular estructuras moleculares 3D aliviaría la carga asociada a seguir mentalmente los cambios de configuración y perspectiva, reduciendo significativamente el requerimiento de recursos cognitivos y permitiendo, por lo tanto, que los estudiantes identifiquen con menor dificultad las relaciones espaciales entre átomos (Wu y Sha, 2004).

La presente propuesta supone, en línea con estos resultados, que la posibilidad de visualizar desde diferentes perspectivas las moléculas de cicloalcanos así como también manipularlas y operar sobre ellas utilizando programas de modelado molecular, facilitaría la construcción, por parte de los estudiantes, de representaciones internas complejas y articuladas que conecten los arreglos espaciales de las partículas (átomos, moléculas) con el conocimiento conceptual y simbólico necesario para relacionar adecuadamente dichas estructuras con las propiedades físicas y químicas de estos compuestos.

DESARROLLO DE LA SECUENCIA

En tren de alcanzar el objetivo inicialmente planteado, se propuso a la clase una actividad cuya resolución requirió que los estudiantes construyan y visualicen desde diferentes perspectivas, utilizando el programa, los modelos tridimensionales de las moléculas de diversos Cicloalcanos para relacionar los conceptos de tensión angular y tensión torsional de enlace con su comportamiento químico y estabilidad.

A tal fin, resultaron de especial utilidad los comandos, disponibles en el programa ACD/Chemsketch v12.01, que permiten determinar, a partir de los modelos moleculares generados, los ángulos de enlace entre los átomos de Carbono que forman los anillos y los ángulos de torsión entre átomos de Hidrógeno unidos a Carbonos vecinos.

Estas determinaciones, realizadas sobre los distintos cicloalcanos, constituyeron la clave para reconocer las tensiones internas que explican las propiedades y comportamiento químico de estas sustancias.

La secuencia se desarrolló en dos encuentros, correspondiendo el primero a una clase introductoria de dos horas cátedra, en la que se presentó el programa ACD/Chemsketch v12.01 a los estudiantes, quienes trabajaron en parejas en una sala de informática con la que cuenta la escuela.

El docente a cargo de la sesión explicó la utilización de los principales menús para dibujar, borrar, girar, mover y rotar átomos o moléculas.

El segundo encuentro se desarrolló durante cuatro horas cátedra en la misma sala de informática, comenzando con la presentación de los cicloalcanos y una explicación teórica sobre los conceptos de tensión angular y tensión torsional, indispensables para la comprensión de la estructura y estabilidad de estos compuestos.

En esta instancia, utilizando como complemento y apoyo, proyecciones generadas con el programa, el docente introdujo el tema aclarando su importancia para la asignatura en estudio y diferenciando progresivamente los conceptos centrales. Además, se resaltaron las diferencias y semejanzas relevantes entre los diferentes cicloalcanos y reconciliaron inconsistencias aparentes cuando surgieron.

Completada la introducción teórica, se presentó la actividad principal a desarrollar por los estudiantes, trabajando en grupos de dos integrantes y utilizando el software. Dicha actividad debió completarse durante el encuentro y se solicitó la entrega, para la clase siguiente, de un informe elaborado en base a ésta.

La antes mencionada actividad se desarrolló en dos partes, a saber, una primera cuyo objetivo consistió en que los estudiantes construyan moléculas de diferentes cicloalcanos y visualicen los detalles estructurales de las mismas, operando sobre las representaciones obtenidas con el visualizador molecular. De esta manera, podrían identificar en cada una de ellas las tensiones internas que las caracterizan.

Actividad 1

Utilizando el programa ACD/Chemsketch v12.01 instalado en la computadora que dispones:

- a) Construye los modelos moleculares planos para el Ciclopropano, Ciclobutano, Ciclopentano y Ciclohexano y optimiza sus estructuras para su visualización 3D.
- b) Observa los modelos tridimensionales obtenidos e indica:
 - ¿Los anillos de Carbono, son planos?
 - ¿A qué objetos se asemejan los diferentes anillos?
- c) Haciendo uso de los comandos disponibles en el programa, determina los ángulos de enlace correspondientes a los átomos de Carbono de los diferentes Cicloalcanos que graficaste. ¿Existe Tensión Angular en alguno de ellos? ¿En cuáles adquiere mayor intensidad?
- d) Determina los ángulos de torsión entre Hidrógenos de Carbonos vecinos para los diferentes Cicloalcanos. ¿Existe Tensión Torsional en alguno de ellos? ¿En cuáles adquiere mayor intensidad?

Tabla 1. Primera actividad propuesta durante la secuencia

Posteriormente, la segunda parte de la actividad implicó que los estudiantes, habiendo visualizado los modelos moleculares e identificado sus tensiones angulares y torsionales, relacionen las características de estas estructuras con una propiedad química observable a nivel macroscópico tal como el calor de combustión.

Actividad 2

En unidades anteriores, estudiamos la reacción de combustión de los alcanos de cadena abierta que implica su combinación con Oxígeno para dar lugar a la formación de CO_2 y H_2O y a la liberación de importantes cantidades de energía. La cantidad de energía liberada por mol de alcano se denomina Calor Molar de Combustión y vimos que, para un determinado número de carbonos presentes en la molécula, éste disminuye a medida que la misma se hace más estable.

El examen de los resultados experimentales de la combustión de muchos alcanos ha demostrado que su calor de combustión puede predecirse si se conoce la contribución de cada eslabón $-\text{CH}_2-$ de su cadena. En el caso de los alcanos de cadena abierta, cada grupo $-\text{CH}_2-$ contribuye con un valor de 157,4 kcal/mol al calor de combustión total de su molécula.

En la tabla siguiente, se presentan los calores de combustión experimentales de los grupos $-\text{CH}_2-$ de diferentes cicloalcanos y se los compara con el correspondiente a su homólogo de cadena abierta:

Número de Carbonos	Alcano Lineal	Qc por grupo CH_2 (kcal/mol)	Cicloalcano	Qc por grupo CH_2 (kcal/mol)	Diferencia %
3	Propano	157,4	Ciclopropano	166,6	+5,8
4	Butano	157,4	Ciclobutano	164,0	+4,2
5	Pentano	157,4	Ciclopentano	158,7	+0,8
6	Hexano	157,4	Ciclohexano	157,4	0,0

Tabla 2. Segunda actividad propuesta durante la secuencia.

¿Puedes explicar las diferencias observadas a partir de la geometría molecular de los Cicloalcanos en cuestión?

Con el objetivo de sintetizar e integrar los diferentes modelos y conceptos trabajados durante la sesión, se propuso, luego de finalizada la actividad con el programa, la construcción conjunta entre estudiantes y docente de una red conceptual que permitiera recuperar los conceptos, terminología y representaciones introducidos durante el desarrollo del tema, ordenar las jerarquías de los diferentes conceptos y explicitar sus relaciones.

RESULTADOS

A partir del análisis efectuado sobre los informes entregados por los alumnos y las observaciones realizadas durante el desarrollo de la clase en sus diferentes instancias, puede afirmarse que:

- El trabajo con el programa de modelado representó una novedad respecto del desarrollo tradicional de las clases de Química y constituyó un estímulo para la participación de los estudiantes y la apro-

piación por parte de éstos de los conceptos centrales de la unidad.

- Todos los grupos de estudiantes lograron finalizar, al cierre de la segunda sesión, un borrador del informe correspondiente a las dos actividades, lo cual indicaría que el tiempo destinado a la secuencia (6hs cátedra) fue suficiente para el adecuado desarrollo de la misma.
- La posibilidad de visualizar en tres dimensiones, rotar y operar sobre los modelos moleculares de los diferentes cicloalcanos favoreció significativamente la identificación de las tensiones estructurales presentes en cada uno de ellos, resultado en línea con la hipótesis sobre la reducción en la carga cognitiva que permite el trabajo con software de modelado molecular.
- La semejanza entre las conformaciones de los anillos de los diferentes cicloalcanos y objetos tales como un sobre semiplegado (ciclopentano) y una silla (ciclohexano) surgieron de manera espontánea en varios de los grupos de trabajo.
- En las respuestas elaboradas por los estudiantes a la actividad 1 se detectó, durante la lectura de los informes, que un número apreciable de grupos de trabajo tuvo dificultad para identificar las tensiones torsionales presentes en los cicloalcanos estudiados.
- Por su parte, salvo escasas excepciones, las tensiones angulares fueron correctamente identificadas en aquellas moléculas que las presentan.
- Respecto de las respuestas a la actividad 2, se observó que aquellos grupos que lograron identificar correctamente las tensiones internas de los diferentes cicloalcanos en la primera actividad, fueron también capaces, en su mayoría, de explicar adecuadamente las diferencias observadas en los calores de combustión, relacionándolas con la intensidad de las tensiones internas presentes en cada molécula.
- En la misma actividad, aquellos grupos que presentaron alguna dificultad para identificar las tensiones torsionales en la actividad 1, elaboraron frecuentemente explicaciones parciales como respuesta.

A continuación, se incluyen algunas de las capturas de pantalla utilizadas por los estudiantes para la confección del informe correspondiente a la actividad propuesta y una reproducción de la red conceptual construida como actividad de cierre.

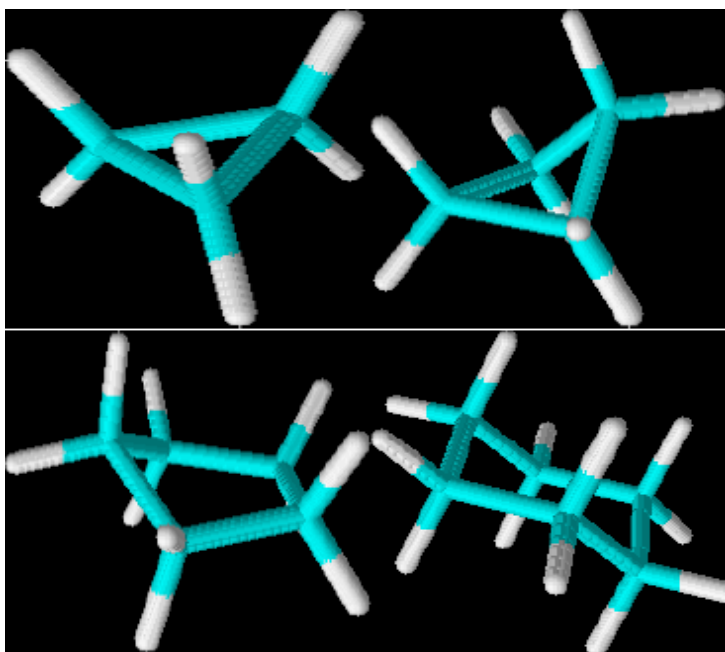


Figura 1. Modelos moleculares de los cuatro cicloalcanos estudiados (ciclopropano, ciclobutano, ciclopentano y ciclohexano) construidos con el software ACD/Chemsketch

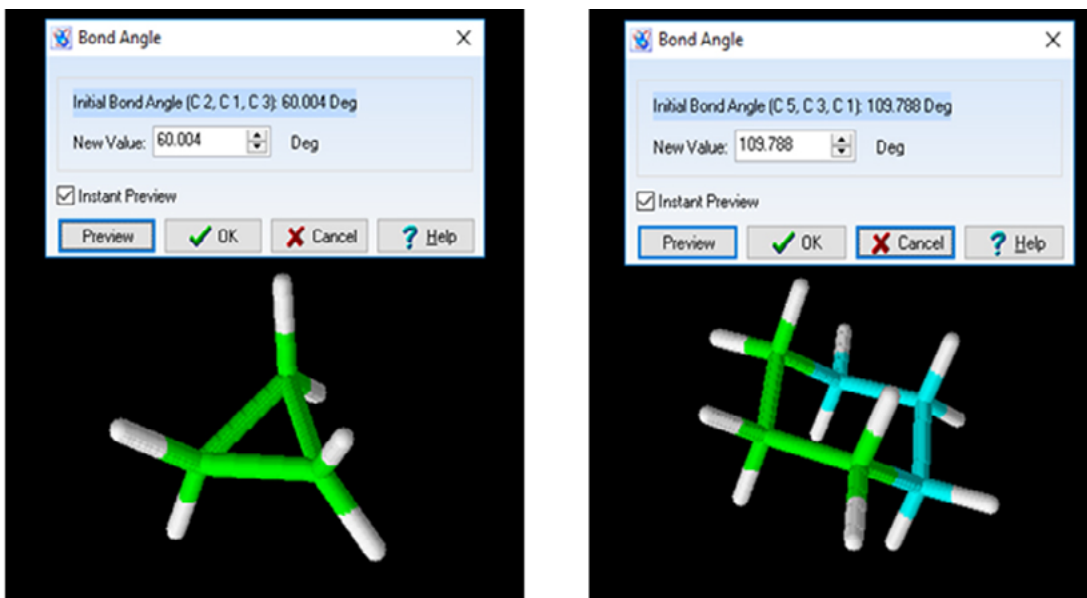


Figura 2. Medición con Chemsketch de ángulos de enlace en dos cicloalcanos. Izq.: Ciclopropano (60° - elevada tensión angular). Der.: Ciclohexano (109° - ángulo teórico de enlace - ausencia de tensión angular)

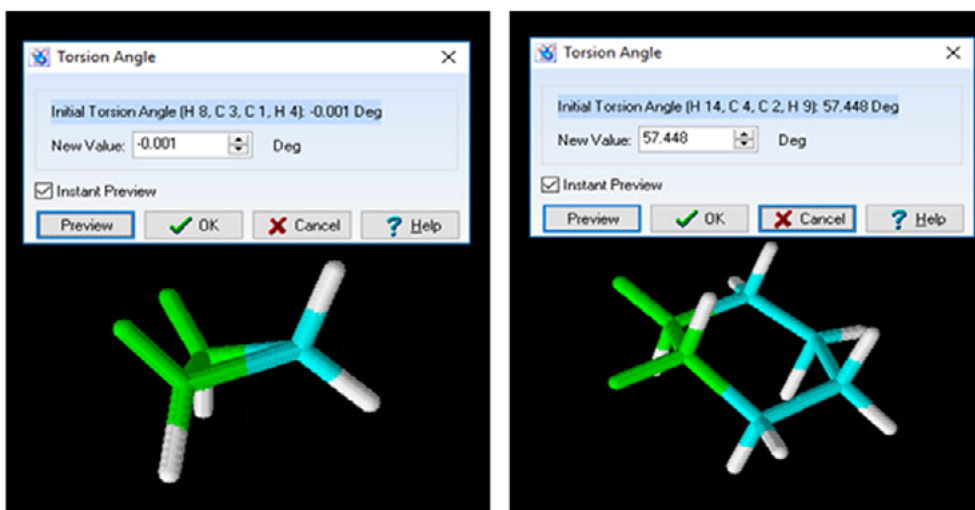


Figura 3. Medición con Chemsketch de ángulos de torsión en dos cicloalcanos. Izq.: Ciclopropano (0° - átomos de Hidrógeno eclipsados - máxima tensión torsional). Der.: Ciclohexano ($57,5^\circ$ - átomos de Hidrógeno en posición alternada - tensión torsional mínima)

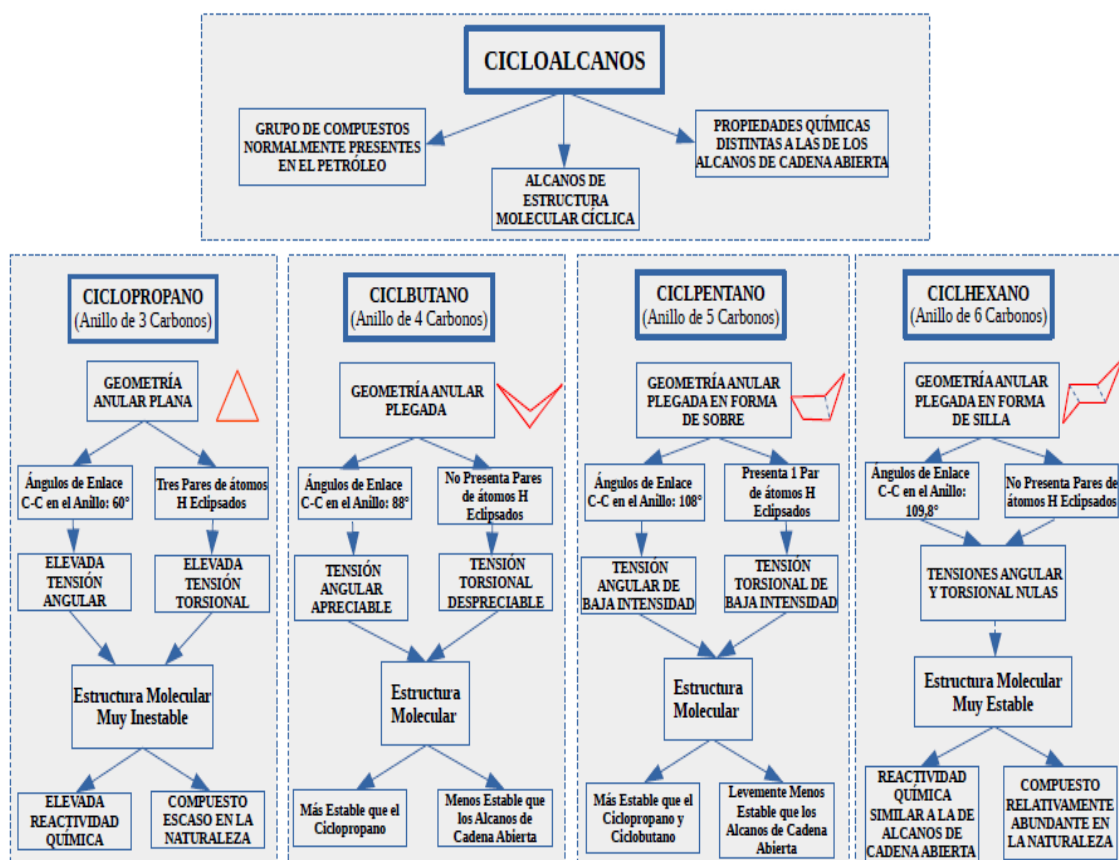


Figura 4. Reproducción de la Red Conceptual construida entre estudiantes y docentes como cierre de la sesión de trabajo

CONCLUSIONES

La propuesta didáctica implementada promovió el involucramiento activo de los estudiantes en la clase, dando lugar a debates e intercambio de opiniones, incentivando la exploración y la indagación, el desarrollo de actitudes de curiosidad y de búsqueda sistemática, la formulación de hipótesis, el intercambio de puntos de vista y la puesta a prueba de distintos argumentos.

Asimismo, el trabajo con el programa de modelado molecular contribuyó apreciablemente a una mejor comprensión de los conceptos centrales del tema Cicloalcanos.

A partir de las respuestas elaboradas por los estudiantes a las actividades propuestas, se pudo reconocer que la identificación de las tensiones torsionales de los cicloalcanos presenta una dificultad cuyas causas, posiblemente relacionadas con la secuencia de operaciones mentales necesarias, podrían ser objeto de futuras investigaciones al respecto.

Al estar elaborada en el marco de los Núcleos de Aprendizajes Prioritarios (NAP) del Ministerio de Educación de la Nación y respetando el Diseño Curricular de la provincia de Santa Fe; su implementación, con las adaptaciones y modificaciones que eventualmente se consideren necesarias, puede replicarse en otros establecimientos educativos.

Finalmente, es relevante mencionar que en la puesta en práctica de esta propuesta fue necesario, además de garantizar la disponibilidad de un número adecuado de computadoras en el aula, realizar convenientes adaptaciones en cuanto al tiempo destinado al desarrollo del tema que, en efecto, excedió al que normalmente se dedica al estudio de los cicloalcanos cuando se implementan estrategias didácticas expositivas.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Chandler, P. y Sweller, J. (1991). Cognitive Load Theory and the Format of Instruction. *Cognition and Instruction*, 8(4), 293-332
- Harle, M. y Towns, M. (2011). A review of spatial ability literature, its connection to chemistry, and implications for instruction. *Journal of Chemical Education*, 88, 351-360.
- Lorenzo, M. G. y Pozo, J. I. (2010). La representación gráfica de la estructura espacial de las moléculas: eligiendo entre múltiples sistemas de notación. *Cultura y Educación*, 22 (2), 231-246.
- Ministerio de Educación de la Nación (2011). *Núcleos de Aprendizajes Prioritarios. Ciencias Naturales. Campo de Formación General. Ciclo Orientado. Educación Secundaria*. Buenos Aires, Argentina.
- Ministerio de Educación de la Provincia de Santa Fe (2014). *Diseño Curricular de Educación Secundaria Orientada*. Santa Fe, Argentina

Ministerio de Educación de la Provincia de Santa Fe (2016). *Núcleos Interdisciplinarios de Contenidos (NIC): la educación en acontecimientos*. Santa Fe, Argentina.

Wu, H-K. y Shah, P. (2004). Exploring visuospatial thinking in chemistry learning. *Science Education*, 88, 465-492.