



DIDÁCTICA

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



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

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

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

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

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

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

Disponible en Internet el 28 de noviembre de 2016

PALABRAS CLAVE

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

KEYWORDS

Avogadro molecular editor; Chemistry; Teaching innovation;

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

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

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

* Autor para correspondencia.

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

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

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

Introducción

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

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

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

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

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

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

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

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

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

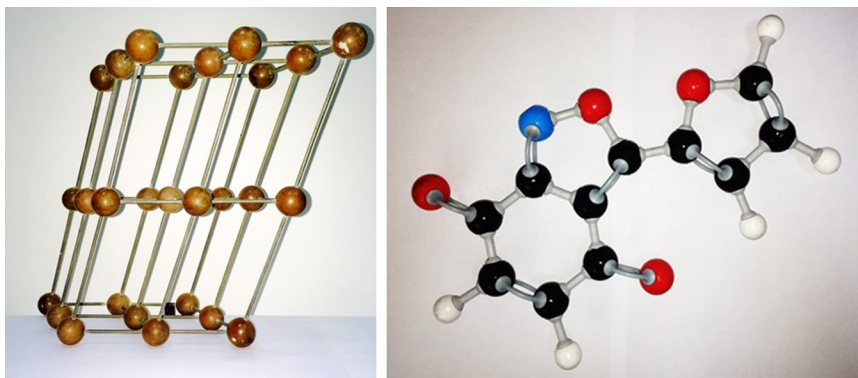


Figura 1 Fotografía de una molécula hecha con bolas de madera y varillas de metal (izquierda) y otra con bolas y barras de plástico (derecha).

Avogadro es un programa de manipulación simple que hace fácil la visualización en 3D de las moléculas, ya que es posible aumentar/disminuir su tamaño, mover y girar la molécula. Estas funciones de perspectiva son especialmente importantes en cursos de Química donde la tridimensionalidad de las moléculas es la piedra angular de los contenidos. Más aún, es vital en cursos de Química Orgánica debido a que las estructuras de estas moléculas son más complejas (como se aprecia en la [figura 2](#)). Además, existe evidencia de que se ha utilizado *Avogadro* para enseñar nomenclatura orgánica en cursos de educación secundaria ([Moreno, 2014](#)). Por otro lado, se ha visto que el uso de estos visualizadores resulta atractivo para los estudiantes y aumenta su rendimiento ([Ugliarolo y Muscia, 2012](#)).

Otro aspecto importante en la Química Orgánica es poder diferenciar 2 moléculas que parecen iguales, pero que una es la imagen especular de la otra y no son superponibles.

Esto origina lo que se conoce como enantiómeros y a los alumnos se les enseña a diferenciar entre moléculas que parecen ser las mismas, pero que no lo son debido a la existencia de centros quirales. La adquisición de esta capacidad de diferenciación se ha enseñado de distintas maneras. A modo de ejemplos didácticos, son interesantes los trabajos de [Arroyo-Carmona y Pérez-Benítez \(2003\)](#) y [Pérez-Benítez \(2008\)](#) en donde se enseña quiralidad utilizando espejos.

Debido a la aceptación que los jóvenes tienen de la tecnología y a la accesibilidad del visualizador *Avogadro*, en este estudio se utilizó dicho programa para enseñarles a los estudiantes a construir y visualizar moléculas orgánicas complejas, y a determinar desde ahí la quiralidad de los carbonos correspondientes.

Para ello, este artículo está estructurado como sigue: después de esta introducción, se presenta el contexto en el cual se desarrolló la investigación para luego exponer los

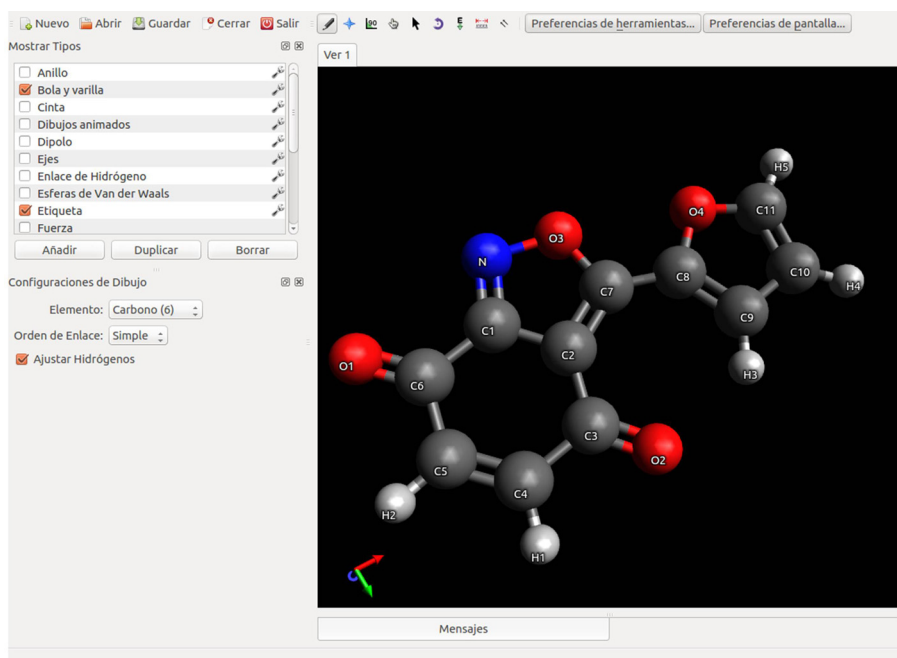


Figura 2 Instantánea del visualizador y constructor molecular *Avogadro*.

antecedentes previos. En seguida, se describe la metodología empleada, posteriormente los resultados y su discusión, para terminar con algunas conclusiones pertinentes.

Contexto del curso de Química General y Orgánica para Odontología

El curso de Química General y Orgánica para Odontología se dicta el primer cuatrimestre de cada año en la Universidad Arturo Prat, Iquique, Chile. Está enfocado en enseñar los tópicos de, en su primera parte, Sistema Internacional de Unidades, Conversiones, Propiedades periódicas, Estequiometría, Estados físicos de la materia, Disoluciones, Cinética, Equilibrio químico y Óxido-reducción. La segunda parte corresponde a Estructura y Clasificación de los compuestos orgánicos y biomoléculas.

Es por esto que el siguiente estudio estuvo centrado en desarrollar en los alumnos la visión en 3D de las moléculas con el programa *Avogadro*, y poder determinar la quiralidad de los carbonos en moléculas simples y complejas. Se creó un manual de uso del programa así como actividades evaluadas que se detallan en el apartado de Metodología.

El objetivo principal fue comparar el tiempo en que estos alumnos de Odontología demoraron en asignar la quiralidad de los carbonos en moléculas planas (2D), versus otras en *Avogadro*.

Antecedentes previos

La incorporación de *Avogadro* se realizó como experiencia piloto para los estudiantes de Ingeniería Ambiental (5 participantes) en el curso de Química General y Orgánica del segundo cuatrimestre del año 2013. A los alumnos se les instruyó en el uso del programa, para lo cual se crearon manuales que les ayudaron a completar un taller con preguntas.

Este taller consistió en determinar la quiralidad de los carbonos en moléculas orgánicas utilizando una molécula en 2D, dibujada con *BkChem* (Kosata y Danne, 2010) y otra en 3D, dibujada con *Avogadro*. El objetivo fue ver cuánto se demoraban los alumnos en determinar la quiralidad de los carbonos entre una figura 2D versus otra 3D. El resultado principal fue que viendo la estructura en 3D el tiempo promedio de asignación de la quiralidad disminuyó.

Esto datos fueron contrastados con una pregunta de la misma índole en una evaluación escrita del curso de Química Orgánica para la carrera de Química y Farmacia (20 participantes) el mismo cuatrimestre y año. Estos alumnos debían asignar la quiralidad a los carbonos de una molécula dada a partir de una figura en 2D representada por cuñas y rayas. El porcentaje de alumnos que acertó la pregunta fue del 0%, mientras que los alumnos de Ingeniería Ambiental, usando *Avogadro*, fueron capaces de asignar correctamente la quiralidad a los carbonos de moléculas más complejas.

En la continuidad de esa investigación, y para validar el estudio, es que se la amplió al curso de Química General y Orgánica de la carrera de Odontología, en el primer cuatrimestre de 2014.

Metodología

Participantes

En este estudio participaron los estudiantes de ingreso en el año 2014 a la carrera de Odontología, de la Universidad Arturo Prat, Iquique, Chile, con edades comprendidas entre los 17 y 20 años. El número total de alumnos de la carrera de Odontología fue de 54, quienes se agruparon en parejas para participar, es decir, un total de 27 parejas. Como grupo control participaron los estudiantes de la carrera de Química y Farmacia (20 estudiantes) quienes el segundo cuatrimestre de 2013 cursaban la asignatura de Química Orgánica (ver la sección Antecedentes previos).

La muestra poblacional fue heterogénea en cuanto a la procedencia del sistema educacional, es decir, los estudiantes vinieron de colegios con distintos regímenes de estudios. La composición étnica de la muestra también fue heterogénea.

Ejecución de las actividades para los estudiantes de Odontología

Para el aprendizaje del programa *Avogadro*, los estudiantes trabajaron en parejas, en una única sesión de 3 h, en una sala de computación disponible en la Universidad. Cada computador ya tenía instalado el programa y cada pareja tenía un manual de este en formato *pdf*. Los estudiantes debían descargar el manual previamente desde la plataforma virtual de la Universidad y leerlo. Sin perjuicio de esto, el docente a cargo explicó los principales menús para dibujar, borrar, girar, mover, rotar átomos o moléculas, e ir construyéndola en el programa.

La primera molécula que debieron construir fue el limoneno. El limoneno es una molécula orgánica presente en los cítricos, lo que les da el olor característico, y que posee un único carbono quiral, con lo cual puede existir el *R*-limoneno o el *S*-limoneno. El objetivo fue que ellos se dieran cuenta cuál de los 2 isómeros habían construido.

Posteriormente los alumnos debieron descargar desde la plataforma virtual de la Universidad 2 moléculas con más de un carbono quiral, y asignar la configuración *R* o *S*. Estas moléculas fueron la *L*-Treosa y *D*-Treosa, 2 azúcares pequeños.

Finalmente, los estudiantes tuvieron que entregar un reporte que consistió en:

- 1) hacer una búsqueda bibliográfica de las moléculas progesterona y testosterona en 2D –con estructura de cuñas y rayas–, asignar la configuración *R* o *S* a cada uno de sus 6 carbonos, y medir el tiempo promedio que se demoraron en hacerlo,
- 2) buscar en Internet las moléculas de sucralosa, ibuprofeno y metilfenidato. Dibujar en *Avogadro* la sucralosa y otra de las moléculas buscadas, a elección. Determinar la configuración *R* o *S* de sus carbonos y medir el tiempo promedio que se demoraron en hacerlo. En este caso el número de carbonos quirales, en promedio, entre las moléculas fue de 11.5.

Este reporte fue evaluado de acuerdo a la escala de calificación empleada en el país de estudio.

El grupo control (estudiantes de Química y Farmacia) jamás recibió instrucción del programa *Avogadro* durante el curso de Química Orgánica. La comparación entre los estudiantes que usaron *Avogadro* (Odontología) y los que no (Química y Farmacia) se hizo midiendo la asertividad en la asignación entre moléculas con el mismo número de carbonos quirales; sucralosa para los estudiantes de Odontología, otra molécula para los de Química y Farmacia. En el caso de estos últimos, la molécula se les preguntó en una evaluación escrita (ver la sección Antecedentes previos).

Tratamiento de datos

El tiempo en que los estudiantes demoraron en asignar la quiralidad de los carbonos de las distintas moléculas se presenta en forma de gráficos de barra.

Por otro lado, se realizó una encuesta (*on line*) con la herramienta *Google Forms* (de la Fuente, Pardo y Delgado, 2009) para medir la percepción de los alumnos respecto a *Avogadro*, y también con el fin de contrastar sus repuestas con los datos obtenidos. La encuesta fue voluntaria, de modo que el número de participantes fue de 21.

Resultados y discusión

Las actividades evaluadas 1 y 2, descritas en la sección *Ejecución de las actividades para los estudiantes de Odontología* (ver el apartado Metodología), arrojaron los siguientes resultados.

Asignación de la quiralidad a moléculas en 2 dimensiones

Considerando la actividad 1, se puede apreciar en la [figura 3A](#) que los estudiantes, para determinar la quiralidad de los 6 carbonos de la progesterona, tardaron un tiempo promedio de 195 s. En cambio, para determinar la quiralidad de los 6 carbonos de la testosterona, tardaron un tiempo promedio de 163 s. Es claro que el tiempo de asignación para la segunda molécula fue más rápido que para la primera. Es probable que el ejercicio con la primera molécula les haya servido de práctica para disminuir el tiempo en la asignación de la segunda.

Asignación de la quiralidad a moléculas en 3 dimensiones

Si ahora se analizan los resultados de la actividad 2, se puede apreciar que los estudiantes se demoraron menos tiempo en determinar la quiralidad de los 9 carbonos para la sucralosa, y mucho menos para el metilfenidato o el ibuprofeno ([fig. 3B](#)). Esto último no es sorprendente, ya que metilfenidato e ibuprofeno poseen 2 y 1 carbono quiral, respectivamente.

Comparación entre la asignación bidimensional y tridimensional

Al comparar ahora el tiempo en que los alumnos de Odontología se demoraron en asignar la quiralidad a los carbonos de moléculas bidimensionales ([fig. 3A](#)) versus las moléculas tridimensionales ([fig. 3B](#)), aparece la [figura 3C](#). Esta figura muestra en la columna «Sin *Avogadro*», el promedio del tiempo de asignación entre progesterona y testosterona ([fig. 3A](#)), mientras que la segunda columna (Con *Avogadro*) muestra el promedio del tiempo de asignación entre sucralosa, metilfenidato e ibuprofeno ([fig. 3B](#)). Es claro que los estudiantes demoraron menos en asignar la quiralidad de los carbonos con *Avogadro* (moléculas tridimensionales) que sin *Avogadro* (moléculas bidimensionales). De hecho, el tiempo se reduce casi a la mitad; 179 s comparados con 88 s.

Si ahora se realiza una comparación de la asertividad en la asignación de los carbonos quirales entre estudiantes de Odontología (que usaron *Avogadro*) y los de Química y Farmacia (que no usaron *Avogadro*), se concluye que los estudiantes de Odontología fueron un 100% mejores en asignar los carbonos quirales que los estudiantes de Química y Farmacia (datos no mostrados). A los alumnos de Química y Farmacia se les hizo una pregunta de asignación de quiralidad para una molécula con cantidad equivalente de carbonos quirales a la sucralosa. Esta pregunta fue hecha en una evaluación escrita (primer cuatrimestre de 2013) y la asertividad fue del 0%. Es decir, ningún estudiante fue capaz de asignar correctamente todos los carbonos quirales.

Esta actividad demuestra que así como antes los modelos de bolas y varillas ayudaban a la comprensión de la espacialidad de las moléculas, y a la determinación de los centros quirales en las mismas, de igual modo un programa computacional como *Avogadro* permite a los alumnos observar el espacio que ocupan las moléculas (es decir, que no son planas). Además, esta herramienta permite a los estudiantes una rápida asignación de los centros quirales al poder mover y rotar la molécula para verla en la perspectiva deseada.

Encuesta hecha a los estudiantes

Una encuesta que consistió en 5 preguntas, se les realizó a los alumnos una vez finalizada las actividades 1 y 2. La encuesta fue anónima y voluntaria de modo que participaron 21 estudiantes. Para esto se usó la herramienta *Google Forms* (de la Fuente, Pardo y Delgado, 2009).

Las preguntas estuvieron enfocadas a medir el grado de satisfacción de los estudiantes, pero también para contrastar los resultados de este estudio con la propia impresión de ellos.

A continuación se exponen los resultados de las preguntas:

1. ¿Había tenido antes alguna experiencia con este tipo de visualizadores moleculares?

La [figura 4A](#) muestra claramente que el 90% de los alumnos nunca antes había trabajado con este tipo de programas, lo que implica que solo 2 alumnos sí lo habían hecho anteriormente. Entonces, *Avogadro* presentó una novedad para la mayoría de ellos.

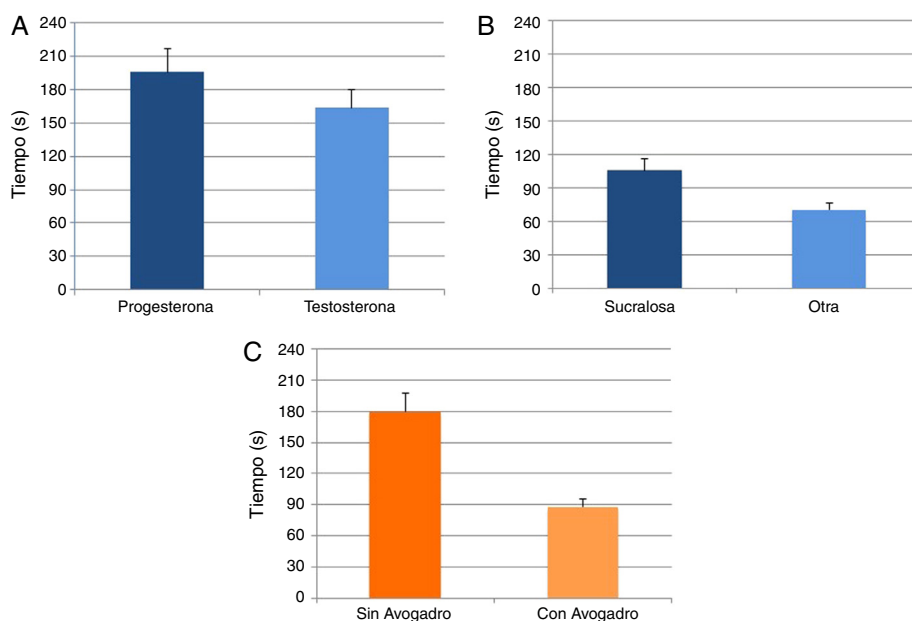


Figura 3 Comparación temporal promedio para la asignación de los carbonos quirales de: 2 esteroides, progesterona y testosterona, A; sucralosa y otra molécula (ibuprofeno o metilfenidato), B; en moléculas bidimensionales (Sin *Avogadro*) versus moléculas tridimensionales (Con *Avogadro*), C. Todos los gráficos tienen incorporada la desviación estándar normalizada.

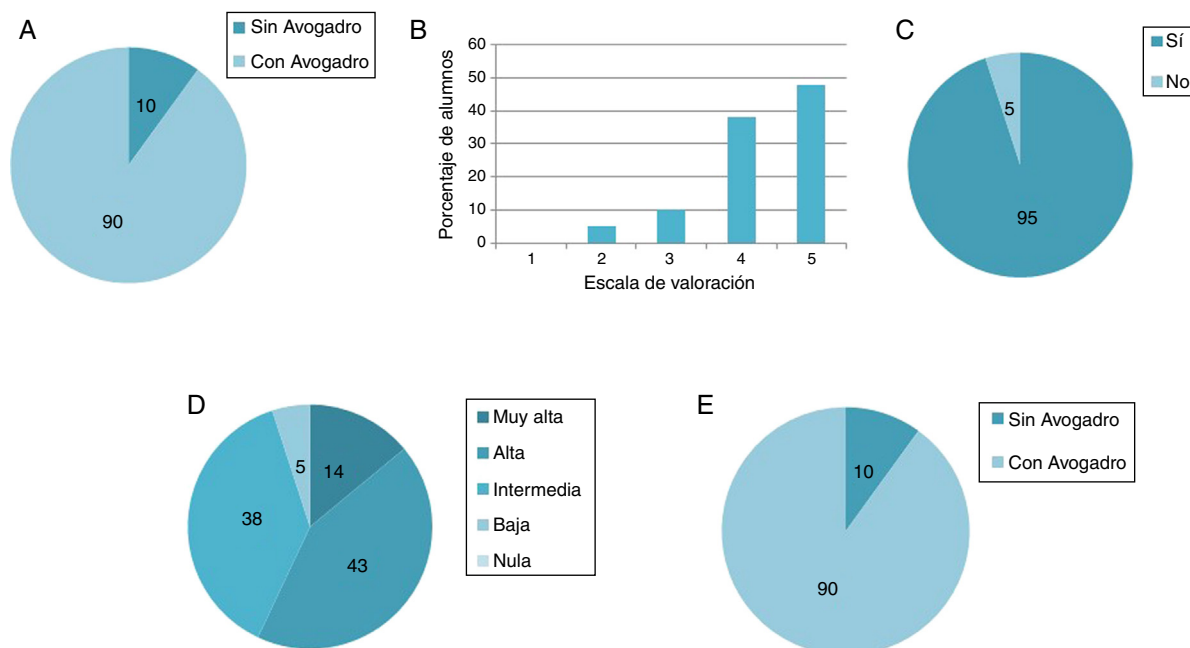


Figura 4 Resultados a las preguntas de la encuesta. Letra A, pregunta 1; letra B, pregunta 2 (1: muy en desacuerdo, 2: en desacuerdo, 3: más o menos, 4: de acuerdo, 5: muy de acuerdo); letra C, pregunta 3; letra D, pregunta 4; letra E, pregunta 5. Todos los valores se presentan en porcentaje.

2. ¿Cuán de acuerdo está con la utilización de este programa en el aula?

Ante esta pregunta, en que 1 significaba muy en desacuerdo y 5 muy de acuerdo, los porcentajes de la [figura 4B](#) indican que el 48% de los alumnos está muy de acuerdo en la incorporación de *Avogadro* en el aula, y un 38% de acuerdo. Se colige que la mayoría de los estudiantes comprendió que es necesario incorporar estos

visualizadores para entender mejor la espacialidad y volumen molecular.

Es importante notar que esta pregunta se hizo en el contexto en que los estudiantes trabajaron, es decir, en sesiones dirigidas por el docente a cargo. Por ende, se colige de las respuestas de los estudiantes que ellos están de acuerdo con el uso de *Avogadro* en la modalidad de sesiones dirigidas.

3. ¿Cree que sería bueno introducir este tipo de programas en otras asignaturas, como por ejemplo, Bioquímica?

Esta pregunta tuvo como objetivo ver si los alumnos eran capaces de reaccionar ante desafíos más grandes, ya que la última unidad del curso, Compuestos orgánicos de importancia biológica, los prepara para la asignatura de Bioquímica. En esta área de la Química es importante observar y comprender la tridimensionalidad de macromoléculas como proteínas y ADN.

Al observar la figura 4C se ve que el 95% respondió que sí estaba de acuerdo con la incorporación de Avogadro en otras asignaturas. En el caso de la asignatura de Bioquímica el desafío de ver proteínas en 3D es mayor, porque son macromoléculas cuyos aminoácidos se superponen en un espacio de 2D. Es por esto que cuando se usan visualizadores para observar estas macromoléculas se hace necesario rotarlas constantemente para ver su tridimensionalidad. Probablemente los estudiantes son conscientes de este desafío (Vella, 1990; Cox, 2000; Richardson, Richardson, Sirochman, Bateman y Booth, 2002; Linenberger y Holme, 2015) y es por esto que se muestran propicios al uso de visualizadores en esta asignatura. Cabe señalar que la utilización de programas para visualizar macromoléculas proteicas con residuos aminoácidos mutados ya se ha realizado con estudiantes universitarios (Rodríguez-Sotres, Rodríguez-Penagos, González-Cruz, Rosales-León, Martínez-Castilla, 2009). En ese estudio los autores emplearon el programa VMD (Humphrey et al., 1996).

4. ¿Cómo describiría su habilidad para ver moléculas en 3D después de utilizar Avogadro?

La figura 4D refleja que un 43% creyó haber desarrollado una alta habilidad para ver moléculas en 3D, mientras que un 38% se consideró en un nivel intermedio. Esto refleja que este primer acercamiento a un visualizador no desarrolla las habilidades moleculares en 3D de manera uniforme. Es probable que la experiencia tridimensional en Química Orgánica con la que los estudiantes vienen desde el colegio sea deficiente para algunos (38%) y mejor para otros (43%), como también es posible que se necesite más de una sesión de práctica con Avogadro. Esto podría subsanarse si se les asignan ejercicios para desarrollar autónomamente, ya que el programa es fácilmente descargable e instalable en cualquier computador personal.

5. En el ejercicio de determinación de quiralidad de los carbonos, ¿con qué método demoró menos en asignarlos?

En este caso el resultado es contundente; el 90% de los estudiantes consideró que demoraron menos usando Avogadro que utilizando una estructura plana a la hora de asignar la quiralidad de los carbonos (fig. 4E). Esto contrasta perfectamente con los resultados de la figura 3C donde el tiempo de asignación se redujo a la mitad.

Conclusiones

La utilización del programa Avogadro para construir y visualizar moléculas en 3D demuestra que los alumnos son capaces de asignar la configuración R/S a carbonos quirales en menor tiempo que si lo hacen con moléculas en 2D. Este tipo de

programas es posible implementarlo en los primeros cursos de Química General así como en los cursos de Química Orgánica.

Los estudiantes, después de aprender el uso del visualizador molecular Avogadro, califican la experiencia como positiva y necesaria en otras asignaturas donde las moléculas que se estudian son más complejas.

Con todo, se puede catalogar como exitoso este primer acercamiento a Avogadro y en el futuro sería aconsejable extender el estudio a más carreras con Química. Esto debe ir acompañado, eso sí, de una planificación más estructurada que logre que la mayoría de los alumnos desarrollen la habilidad de ver moléculas en 3D.

Conflicto de intereses

Los autores declaran no tener ningún conflicto de intereses.

Agradecimientos

Los autores expresan su agradecimiento al proyecto MECE-SUP UAP1199-1299. P. Flores-Morales agradece a Julio Benites, Jorge Vergara y Mario Suwalsky su colaboración.

Referencias

- Arroyo-Carmona, R. E. y Pérez-Benítez, A. (2003). Modelos tridimensionales para la enseñanza de la quiralidad en átomos tetraédricos. *Educación Química*, 14(1), 31–35.
- Burke, K. A., Greenbowe, T. J. y Windschitl, M. A. (1998). Developing and using conceptual computer animations for chemistry instruction. *Journal of Chemical Education*, 75(12), 1658–1660.
- Canning, D. R. y Cox, J. R. (2001). Teaching the structural nature of biological molecules: Molecular visualization in the classroom and in the hands of students. *Chemistry Education: Research and Practice in Europe*, 2(2), 109–122.
- Cox, J. R. (2000). Teaching noncovalent interactions in the biochemistry curriculum through molecular visualization: The search for pi interactions. *Journal of Chemical Education*, 77(11), 1424–1428.
- De la Fuente, L., Pardo, A. y Delgado, C. (2009). Using third party services to adapt learning material: A case study with google forms. En U. Cress, V. Dimitrova, y M. Specht (Eds.), *Learning in the synergy of multiple disciplines* (pp. 744–750). Berlín, Alemania: Springer-Verlag.
- De Jong, W. A., Walker, A. M. y Hanwell, M. D. (2013). From data to analysis: Linking NWChem and Avogadro with the syntax and semanticsof Chemical Markup Language. *Journal of Cheminformatics*, 5, 25–36.
- Dennington, R., Keith, T. y Millam, J. (2009). *GaussView, Version 5*. Shawnee Mission, KS: Semichem Inc.
- Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., et al. (2009). *Gaussian 09, Revision E.01*. Wallingford CT: Gaussian, Inc.
- García-Ruiz, M. A., Valdez-Velázquez, L. L. y Gómez-Sandoval, Z. (2012). Estudio de usabilidad de visualización molecular educativa en un teléfono inteligente. *Química Nova*, 35(3), 648–653.
- Hanwell, M. D., Curtis, D. E., Lonie, D. C., Vandermeersch, T., Zurek, E. y Hutchison, G. R. (2012). Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of Cheminformatics*, 4, 1–17.
- Humphrey, W., Dalke, A. y Schulten, K. (1996). VMD-Visual Molecular Dynamics. *Journal of Molecular Graphics*, 14(1), 33–38.

- Kosata, B. y Danne R. (2010). BKChem-a free chemical drawing program. Obtenido 10 May 2016 desde <http://bkchem.zirael.org/>
- Linenberger, K. J. y Holme, T. A. (2015). Biochemistry instructors' views toward developing and assessing visual literacy in their courses. *Journal of Chemical Education*, 92(1), 23–31.
- Marzocchi, V. A., Marino, L. A., D'Amato, M. A. y Vanzetti, N. (2012). Evaluación preliminar del impacto del uso de software de visualización y modelado molecular en el inicio de carreras de grado. *VII Congreso de Tecnología en Educación y Educación en Tecnología. Red de Universidades con Carreras en Informática (RedUNCI)*. Obtenido 28 Abr 2016 desde <http://sedici.unlp.edu.ar/handle/10915/18448>
- Marzocchi, V. A., Marino, L. A., D'Amato, M. A. y Vanzetti, N. (2013). La potencialidad del software de visualización y modelado molecular en la enseñanza universitaria. *VII Congreso de Tecnología en Educación y Educación en Tecnología. Red de Universidades con Carreras en Informática (RedUNCI)*. Obtenido 28 Abr 2016 desde <http://sedici.unlp.edu.ar/handle/10915/27540>
- Mccrindle, M. (2014). *The ABC of XYZ. Understanding the global generation*. pp. 12–18. New South Wales: McCrindle Research Pty Ltd.
- Moreno, D. S. (2014). Efectividad del uso del software Avogadro en la enseñanza y aprendizaje de la nomenclatura orgánica. Obtenido 28 Abr 2016 desde <http://www.bdigital.unal.edu.co/12698/>
- Pauling, L. y Wilson, E. B. (1935). *Introduction to quantum mechanics with applications to chemistry*. New York and London: McGraw Hill Book Company Inc.
- Pérez-Benítez, A. (2008). La equivalencia entre las paridades de los intercambios de dos sustituyentes y las reflexiones especulares, en la determinación de la quiralidad de átomos tetraédricos: ¡Una demostración con espejos!. *Educación Química*, 19(2), 146–151.
- Pettersen, E. F., Goddard, T. D., Huang, C. C., Couch, G. S., Greenblatt, D. M., Meng, E. C., et al. (2004). UCSF Chimera-A visualization system for exploratory research and analysis. *Journal of Computational Chemistry*, 25(13), 1605–1612.
- Richardson, J., Richardson, D., Sirochman, R., Bateman, R. C., Jr. y Booth, D. (2002). Teaching and assessing three-dimensional molecular literacy in undergraduate biochemistry. *Journal of Chemical Education*, 79(5), 551–552.
- Rodríguez-Sotres, R., Rodríguez-Penagos, M., González-Cruz, J., Rosales-León, L. y Martínez-Castilla, L. P. (2009). Simulated site-directed mutations in a virtual reality environment as a powerful aid for teaching the three-dimensional structure of proteins. *Educación Química*, 20(3), 461–465.
- Schaftenaar, G. y Noordik, J. H. (2000). Molden: A pre- and post-processing program for molecular and electronic structures. *Journal of Computational-Aided Molecular Design*, 14(2), 123–134.
- Schrödinger foundation (2016). The PyMOL Molecular Graphics System, Version v1.8.2.0 Schrödinger, LLC. Obtenido 28 Abr 2016 desde <http://www.pymol.org>
- Ugliarolo, E. A. y Muscia, G. C. (2012). Utilización de tecnología multimedia para la enseñanza de estereoquímica en el ámbito universitario. *Educación Química*, 23(1), 6–10.
- Varetto, U. (2012). MOLEKEL Version 5.4. Obtenido 28 Abr 2016 desde <http://ugovaretto.github.io/molekel/> Y desde <http://www.csuc.cat/es/personal/molekel>
- Vella, F. (1990). Difficulties in learning and teaching of biochemistry. *Biochemical Education*, 18(1), 6–8.
- Wavefunction, Inc. (2014). Spartan '14. Wavefunction Inc. Obtenido 28 Abr 2016 desde https://www.wavefun.com/products/windows/Spartan14/win_spartan.html
- Wegner, P. A. y Montana, A. F. (1993). Dynamic visualization of chemical and instructional concepts and processes in beginning chemistry. *Journal of Chemical Education*, 70(2), 151.
- Wu, H.-K., Krajcik, J. S. y Soloway, E. (2001). Promoting understanding of chemical representations: Students' use of a visualization tool in the classroom. *Journal of Research in Science Teaching*, 38(7), 821–842.