











© De la presente edición:

Colección:

CUADERNOS DE FORMACIÓN CONTINUA

Publicación:

Recursos TIC para el Laboratorio de Química

Coordinación:

Viceministerio de Educación Superior de Formación Profesional Dirección General de Formación de Maestros Unidad Especializada de Formación Continua Equipo de Diseño Web y Multimedia

Como Citar este documento:

Ministerio de Educación (2015). Herramientas TIC para el Área de Química. Cuadernos de Formación Continua. La Paz, Bolivia.

LA VENTA DE ESTE DOCUMENTO ESTA PROHIBIDA

Denuncie al vendedor a la Dirección General de Formación de Maestros, Telf. 2440815





Recursos TIC para el laboratorio de Química







Índice

Datos generales del cuaderno	/
Ubicación del Curso en el Ciclo	7
Objetivo Holístico del Ciclo	8
¿Qué aprenderemos en esta unidad?	9
Tema 1:. Uso educativo de laboratorios virtuales	
de química	9
Crocodile Chemistry (Yenca Science)	24
Elaboración un test interactivo autocorrectivo con listas desplegables	24
Consignas de aplicación en la práctica pedagógica	32
Tema 2: Infografías educativas	33
Elaboración infografías educativas	
Diseño de la infografía	34
Elaboración de infografías educativas con inkscape	35
Interfaz de trabajo de Inkscape	36
Edición de objetos	37
Inserción de texto	38
Tareas de Aplicación	40
Infografías educativas con imágenes	40
Inserción de imágenes	41
Tareas de aplicación	42
Animación interactiva con el complemento Sozi (alternativa libre al	
programa prezi)	42
Instalación del complemento sozi	42
Desarrollo de una animación	44
Dibliografía	E 0
Bibliografía	
Webgrafía	Э Т



Presentación

En el proceso de la Revolución Educativa con Revolución Docente que encara el Estado Plurinacional de Bolivia en concordancia con el mandato constitucional y la Ley N° 070 de la Educación "Avelino Siñani – Elizardo Pérez", en los últimos años se han alcanzado importantes e inéditos avances y resultados en lo referente a la formación de maestras y maestros como actores estratégicos del proceso educativo, respondiendo a las exigencias de la implementación del Modelo Educativo Sociocomunitario Productivo-MESCP y contribuyendo a la mejora de la calidad educativa con mayor pertinencia, relevancia y equidad.

Entre estos avances se destacan las acciones formativas de maestras y maestros en ejercicio a través de Itinerarios Formativos a cargo de la Unidad Especializada de Formación Continua-UNEFCO; una de ellas es el proceso formativo sobre el uso de TIC en la práctica educativa, ejecutado en los últimos 2 años acompañando la dotación de computadoras KUAA a estudiantes de Educación Secundaria Comunitaria Productiva a cargo del Ministerio de Desarrollo Productivo y Economía Plural.

En la perspectiva de aportar desde esta experiencia al proceso de liberación tecnológica iniciado en el país, bajo la directriz de la soberanía científica y tecnológica con identidad propia expresada en la Agenda Patriótica 2025, se ha priorizado la continuidad de los cursos para maestras y maestros de Educación Secundaria Comunitaria Productiva en el uso de TIC en la práctica educativa bajo el Modelo Educativo Sociocomunitario Productivo, enmarcados en la metodología de los Itinerarios Formativos, promoviendo la profundización de prácticas educativas transformadoras del MESCP y generando condiciones y capacidades en el campo tecnológico y científico que permitan a maestras y maestros y estudiantes de este nivel el uso adecuado de computadoras como herramientas tecnológicas en los campos y áreas de saberes y conocimientos.

La estrategia formativa ajustada de los cursos mencionados comprende las modalidades presencial, virtual y autoasistida, cuya implementación estará a cargo de la UNEFCO como instancia autorizada del Ministerio de Educación, en coordinación con las instancias departamentales y distritales de educación hasta las Unidades Educativas. Estas modalidades responden a las características de las maestras y los maestros en el manejo de herramientas TICs.

En este proceso, es fundamental el rol de las y los Directores de Unidades Educativas como actores que propicien, motiven y dinamicen el uso de herramientas TICs en los procesos educativos.

El presente cuaderno es un material de apoyo para el ciclo formativo, de una serie de cuatro cursos, que incluye objetivos holísticos, actividades prácticas, evaluativas y contenidos. Este material permitirá a maestras y maestros mejorar sus prácticas educativas transformadoras bajo el MESCP.

Roberto Aguilar Gómez MINISTRO DE EDUCACIÓN



Datos generales del cuaderno

ESTRUCTURA CURSOS TIC EN LA PRÁCTICA EDUCATIVA CICLO: Recursos Tecnológicos del Aula en el Modelo Educativo Sociocomunitario Productivo (MESCP) CURSO Interactuando en el Aula a través de las TIC Iniciando el uso de las Tic en el Área de CURSO Iniciando el uso de las TIC en las áreas de Matemática, Física y Química Herramientas Herramientas Herramientas TIC CURSO TIC para el área de TIC para el área de TIC para el para el área de área de Física Biología-Geografía Recursos TIC como herramientas pedagógicas en el Área de Biología-Geografía TIC para el CURSO Laboratorio de Ouímica

Ubicación del Curso en el Ciclo

El contenido de este cuaderno de Formación Continua corresponde al curso "Recursos TIC para el laboratorio de Química" que es parte del Ciclo Formativo "Recursos Tecnológicos del Aula en el Modelo Educativo Sociocomunitario Productivo (MESCP).

En el campo de las TIC existen diferentes recursos que pueden aplicarse al ámbito educativo; recursos tecnológicos (hardware y software), programas, aplicaciones y otras herramientas que resultan muy útiles a la hora de desarrollar los procesos pedagógicos.

En el presente curso, se pone a consideración diferentes herramientas de aplicación para desarrollar los procesos educativos de la Química.

Objetivo Holístico del Ciclo

Fortalecemos nuestros conocimientos y capacidades en el uso de herramientas TIC a través de espacios comunitarios de formación, desde el aprendizaje en el uso y aplicación de programas y recursos específicos, aplicando a situaciones concretas de la práctica pedagógica, contribuyendo a su transformación y mejora.

Objetivo Holístico del curso

Fortalecemos nuestros conocimientos y capacidades en el uso y aplicación de herramientas TIC para el área de saberes y conocimientos de Química a través del análisis y reflexión de diferentes herramientas tecnológicas, contribuyendo a la transformación y mejora de la práctica pedagógica.

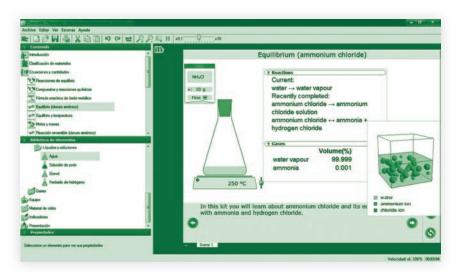


Tema I: Uso educativo de laboratorios virtuales de química

Crocodile Chemistry (Yenca Science)

Crocodile Chemistry (antes) Yenca Science (en el presente). Es un laboratorio virtual con más de 100 elementos y compuestos químicos, donde sus estudiantes pueden simular reacciones químicas con seguridad. Sólo hay que arrastrar al panel de simulación los materiales, equipos y elementos químicos disponibles en la barra de herramientas, indicando las cantidades y concentraciones deseadas. Además de poder representar gráficamente los experimentos, dispone de ejemplos de soluciones y reacciones, así como animaciones atómicas y moleculares en 3D.

Con Yenka Science-Chemistry se pueden simular experimentos de forma fácil y segura, el gráfico siguiente es una captura de pantalla de programa Crocodile Chemistry:



Es un simulador innovador, ya que después de seleccionar los recipientes, matraces, probetas, pipetas y demás elementos, de manera fácil, desde la amplia librería de objetos, se pueden seleccionar las sustancias químicas y los reactivos, iniciando el experimento y simulando con total realismo el proceso. Las reacciones son recreadas de forma precisa, pudiendo ver su evolución a lo largo del tiempo, tan pronto como se mezclan los productos químicos.

Yenca Science es un simulador flexible que permite modificar los parámetros de casi todos los componentes, como por ejemplo: el tamaño de las partículas, la concentración o la tasa de flujo de un gas, etc.

Gracias a su flexibilidad, es posible realizar una amplia gama de experimentos relacionados con ácidos y bases, metales, mezclas y reacciones, compuestos no metálicos y electroquímica. En Yenka Science también se pueden trazar gráficos para analizar los experimentos y examinar el movimiento y los enlaces de los átomos y moléculas utilizando animaciones en 3D.

Como descargar una copia gratuita en versión DEMO de Yenka Science

Para descargar una copia totalmente funcional y gratuita diríjase al sitio web: http://www.yenka.com/es/Downloads/

A continuación haga clic en el enlace **Probar Yenka** y a continuación llene un formulario que habilitará a usted maestra y a usted maestro para su respectiva descarga.



Sin embargo esta copia de prueba, en versión en español, usted la puede usar tan solo por 15 días, en caso de la versión en inglés se puede solicitar una licencia de Estudiante o Maestro para poder usar este simulador por un tiempo

indefinido. Para obtener las indicaciones sobre como adquirir estas licencias diríjase a la siguiente dirección:

http://www.yenka.com/en/Free_Yenka_home_licences/



Por ejemplo para la licencia de Estudiante, primero descargue el instalador, luego instale el programa y siga los siguientes pasos:

- Haga doble clic en el icono Yenka para iniciar su funcionamiento.
- Acepte los términos y política de privacidad, a continuación, en la parte inferior izquierda de la pantalla haga clic en el Selector de producto "Sus licencias Yenka" En "At Home", haga clic en la opción "Usar todos los productos de forma gratuita".
- Inicie la sesión con su dirección de correo electrónico; sólo tiene que hacerlo por una sola vez, es decir, cuando ejecute Yenka por primera vez. Se presenta una imagen de la primera pantalla con la que usted se encontrará al iniciar el programa y en la que debe elegir con qué área quiere trabajar:



En el presente curso documento y a modo de ejemplo elegiremos Inorganic Chemistry (Química inorgánica), en la pantalla que emerja, del panel derecho puede elegir un tema en específico, sin embargo, existe la posibilidad de crear una hoja en blanco y trabajar sobre ésta, para ello haga clic en el menú flotante Edit de la parte superior izquierda:



Con todo lo anterior proceda a realizar una primera práctica:

FÓRMULA QUÍMICA ZNSO₄			
NOMBRE IUPAC (UNIÓN INTERNACIONAL DE QUIMICA PURA Y APLICADA)	TETRAOXOSULFATO (VI) DE ZINC		
Otros nombres	Vitriolo blanco Goslarita Vitriolo de Goslar Caparrosa blanca		
Fórmula semidesarrollada	ZnSO ₄ (anhidro) ZnSO ₄ H ₂ O (monohidrato) ZnSO ₄ 6 H2O		
Fórmula estructural	Zn ₂ +		

PROPIEDADES FÍSICAS				
Estado de agregación	Sólido			
Apariencia	Polvo blanco cristalino, inodoro.			
Densidad	3,74×103 (anhidro) kg/m3; 1,957 (Hep-tahidrato)2 g/cm3			
Masa molar	161,454 (anhidro) 287,55 (heptahidrato) g/mol			
Punto de fusión	373 K (100 °C)			
Punto de ebullición	Se descompone por encima de 773 °K			
PROPIEDADES QUÍMICAS				
Solubilidad en agua	Muy soluble en agua. Soluble en metanol y glicerol. Ligeramente soluble en etanol.			

El sulfato de zinc, vitriolo blanco, vitriolo de Goslar, Goslarita o caparrosa blanca es un compuesto químico cristalino, incoloro y soluble en agua, de fórmula ZnSO4, aunque siempre va acompañado de un determinado número de moléculas de agua de hidratación.

Suele presentarse como sal heptahidratada, ZnSO4·7H2O. A 30°C pierde una molécula de agua y se transforma en ZnSO4·6H2O.3 A 70°C pierde otras cinco moléculas de agua y se transforma en ZnSO4·H2O. Finalmente, a 280°C pierde la última molécula de agua y se transforma en la sal anhidra.

Obtención

En la Naturaleza se presenta formando parte del mineral goslarita (heptahidrato), conocido también como "vitriolo blanco" y de labianchita (hexahidrato). Puede prepararse por reacción del zinc o del óxido de zinc con ácido sulfúrico en disolución acuosa.

Zn+H2SO4 ZnSO4+H2 ZnO+H2SO4 ZnSO4+H2O

O por oxidación enérgica del sulfuro de zinc, componente de la blenda.

7nS+2O2 7nSO4

También puede prepararse añadiendo zinc sólido a disoluciones de sulfato de cobre (II) o sulfato de hierro (II).

Zn+CuSO42 ZnSO4+Cu.

Zn+FeSO42 ZnSO4+Fe.



A continuación se presenta una lista de algunas direcciones electrónicas para acceder a materiales interactivos flash que usted puede utilizar para reforzar el aprendizaje de los contenidos de química:

CONTENIDO DEL PORTAL	DIRECCIÓN ELECTRÓNICA	
Animaciones interactivas para el aprendizaje de las ciencias	http://www.educaplus.org	
Laboratorio virtual de química	http://rabfis15.uco.es/labquimica/ Pagina_Inicio.aspx	
Simulaciones de experimentos químicos	http://group.chem.iastate.edu/ Greenbowe/sections/projectfolder/ simDownload/index4.html	
Leyes de los gases	http://ntic.educacion.es/w3/eos/ MaterialesEducativos/mem2003/ gases/	
Animaciones flash interactivas para aprender química	http://www.fisica-quimica-secun- daria-bachillerato.es/quimica_inte- ractiva.htm	
Prácticas de química	http://fisicayquimicaenflash.es/ quimicapractica.htm	

Aprendizaje de la nomenclatura y formulación química

utilizando animaciones explicativas flash

En el portal de José Carlos Alonso¹ (http://www.alonsoformula.com/) se encuentra un interesante recurso interactivo para el aprendizaje de la formulación y nomenclatura química tanto orgánica como inorgánica, puesto que los actuales planes y programas de estudio del currículo base se inician con el estudio de ambos de manera simultánea (orgánica e inorgánica), esto porque en el pasado sólo se abordaba el estudio de la química orgánica en el último año de secundaria, siendo que en la vida diaria de las personas la química orgánica está presente en casi la mayoría de los objetos y sustancias y no tanto así lo inorgánico (que es la parte de la química en la que más énfasis se hacía). Es en este sentido que ustedes maestras y maestros deben idear estrategias metodológicas que permitirán enseñar la nomenclatura y formulación de compuestos orgánicos e inorgánicos desde el inicio del estudio de la química. Por ello, tener a mano materiales interactivos que además permitan desarrollar procesos de autoaprendizaje debería ser una tarea constante en esta era de las TIC y las TAC.



La siguiente imagen es la página inicial del portal de Carlos Alonso:

Actividades de aplicación

Seleccione cinco ani-maciones interactivas y proceda a elaborar una guía de uso de los mismos que contemple la aplicación de los momen-tos metodológicos (practica-teoría-valoración-producción) para su aplicación en el desarrollo de los contenidos previstos en los planes y programas de educación secundaria comunitaria productiva.

¹ Maestro de educación secundaria en física-química del I.E.S. Ricardo Mella de Vigo, Galicia, España

Uso de applets java en la enseñanza y aprendizaje de la química

En este apartado se abordaran ideas sugerentes para el desarrollo de con-tenidos utilizando este recurso digital.

Así, por ejemplo, en la modelización molecular se tienen programas de diseño y visualizadores. Como primer ejemplo veremos las características y uso de Jmol, que es un programa libre con el cual podemos observar gran cantidad de moléculas químicas en diferentes formatos, el cual sirve para aprender varios conceptos químicos, como: átomo, molécula, enlace simple, doble, triple, orbitales, tamaño comparativo, etc.

Visualizar moléculas químicas con Jmol



Jmol es una mini aplicación (en inglés, applet), es decir, un programa escrito empleando el lenguaje Java y que se ejecuta dentro de una página web. Permite la visualización de modelos moleculares en páginas web a partir de archivos de coordenadas moleculares incluidos en dichas páginas.

Los archivos de coordenadas moleculares que son leídos por Jmol tienen formatos correspondientes a distintos programas de visualización molecular. El formato más corriente para estructuras de proteínas y ácidos nucleicos determinadas experimentalmente es el de la base de datos ProteinDatabank (PDB) mantenida por Re- search Collaborative for Structural Bioinformatics.

Básicamente, todos ellos son archivos en formato de texto donde se encuentran una serie de números y letras que definen los tipos y situación espacial de los átomos y los enlaces que posee una molécula. Estos valores se determinan por resonancia magnética nuclear (RMN) o por difracción de rayos X. La creación de archivos de coordenadas moleculares de biomoléculas a partir de ellos es muy compleja y la llevan a cabo especialistas en macromoléculas utilizando complicados programas informáticos.

Jmol ha sido creado por voluntarios y es de libre distribución y código abierto. Es compatible con el juego de instrucciones de RasMol, un programa de visualización molecular creado por Roger Sayle de la Universidad de Edimburgo y el Departamento de Estructura BioMolecular, Investigación

y Desarrollo de Glaxo, en Greenford, Reino Unido.

Control de moléculas en el visualizador Jmol

Para girar manualmente la estructura, hacer clic sobre el modelo y, manteniendo pulsado el botón principal del ratón, arrastrar el puntero.



Para agrandar o achicar el modelo, mantener pulsada la tecla de Mayúsculas y arrastrar el puntero en vertical. Otros métodos:



si el ratón tiene rueda, solo debemos girarlo;



si el ratón tiene un botón central, arrastrar con él el puntero en vertical.



Para girar la molécula alrededor del eje perpendicular a la pantalla, mantener pulsada la tecla Mayúsculas y arrastra el puntero en horizontal. Otros métodos, sin riesgo de cambiar la ampliación.



Si el ratón tiene un botón central, arrastrar con el puntero en horizontal.



Usando el botón secundario mantener pulsada la tecla Mayúsculas y arrastra el puntero en horizontal.



Para trasladar el modelo, mantener pulsada la tecla Control, pulsar el botón secundario del ratón y arrastrar el puntero.



Si el ratón tiene un solo botón, mantener pulsada la tecla de Mayúsculas, hacer doble clic y, sin soltar el botón del ratón, arrastrar el puntero.



Menús desplegables

Al pulsar el botón secundario del ratón sobre la molécula aparece un menú

desplegable, flotante o contextual como se muestra en la imagen siguiente:



Del menú desplegable puede elegir con el clic del ratón la opción que necesite para visualizar una molécula.

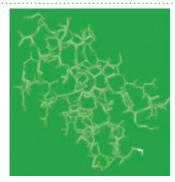
Antes de indicar cómo se pueden seleccionar los distintos modos de representación de las moléculas vamos a tratar brevemente sobre las características principales de los distintos tipos de modelos moleculares.

Las estructuras tridimensionales de las moléculas pueden visualizarse con Jmol siguiendo el siguiente código de representación (originalmente basado en el programa RasMol):



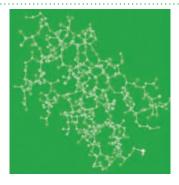
Alambre

Se muestran sólo los enlaces, como líneas delgadas.



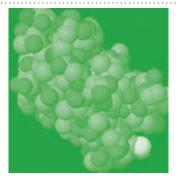
Varillas

Se muestran sólo los enlaces, como líneas gruesas. Este modelo es adecuado para ver la estructura de moléculas grandes.



Bolas y varillas

Los enlaces son varillas y los átomos pequeñas esferas. No refleja ni el tamaño ni la forma real de la molécula, pero permite distinguir claramente los diferentes átomos y enlaces.



Esferas (esferas CPK)

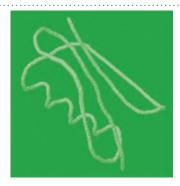
Se representan todos los átomos como esferas sólidas con sus radios de van der Waals (es lo más semejante al volumen real ocupado por el átomo)

Muestra el tamaño y la forma reales de la molécula pero dificulta la percepción de su estructura



Esqueleto

Representa el esqueleto del polipéptido como una serie de varillas que conectan los carbonos alfa consecutivos de cada aminoácido en una cadena (en ácidos nucleicos, se conectan los átomos de fósforo). No se muestran las cadenas laterales. Es una representación interesante para percibir el plegamiento global del polipéptido o ácido nucleico.



Trazo

Es similar al esqueleto, pero suavizado, sin ángulos (un cordón curvilíneo).



Cintas lisas

Visualiza la proteína o ácido nucleico como una superficie de "cintas" densa y lisa que recorre el esqueleto polipeptídico o polinucleotídico de la molécula.



Esquemático

Extiende la representación de cintas para permitir mostrar la representación de Richardson (MolScript).

Es similar al modelo de cintas pero muestra mediante puntas de flecha la orientación de las cadenas en hebras y hélices, y los tramos sin estructura secundaria son cordones en lugar de cintas. Muy útil para visualizar la estructura secundaría de las proteínas.



Cintas en filamentos

Visualiza la proteína o ácido nucleico como una "cinta" que recorre el esqueleto polipeptídico o polinucleotídico, pero la cinta está compuesta de una serie de filamentos (por defecto, cinco) que corren paralelos entre sí.



Bloques

Cada tramo de hélice alfa se muestra como un cilindro con punta (un "cohete") y cada tramo de hebra beta, como una flecha gruesa, recta y plana

Color

Para modificar el color de un modelo molecular:

- Active el menú desplegable: coloque el puntero del ratón sobre el recuadro de la molécula y pulse el botón secundario del ratón (o bien haga clic sobre el logotipo "Jmol", o clic mientras mantenemos pulsada la tecla Control).
- Elija la opción "Color > Átomos > Patrón"



(Use la opción **Átomos** porque los enlaces y el resto de elementos (esqueleto, trazo, cintas...) "heredan" el color de los átomos).

Seleccione una de las posibilidades que a continuación se describen.

Por elemento (CPK): se utiliza el esquema de Corey-Pauling-Koltun.
 Los colores de los átomos más usuales son:



 Aminoácidos: este patrón o combinación colorea los aminoácidos de acuerdo con sus propiedades. Los colores sirven para identificar los aminoácidos en un ambiente inusual o "sorprendente". Las partes externas de una proteína que son polares son colores visibles (brillantes) y los residuos no polares, más oscuros. El esquema de color completo es:

```
Asp, Glu, Cys, Met, Lys, Arg, Ser, Thr, Phe, Tyr,
Asn, Gln, Gly, Leu, Val, Ile, Ala, Trp, His y Pro.
```

- Por estructura secundaria: Se colorean selectivamente las zonas con estructura secundaria en hélice alfa, hoja beta, giros y estructura al azar (en blanco). Este tipo de modelo se suele utilizar para analizar la estructura secundaría de las proteínas.
- **Por cadena:** Cada cadena se colorea de un color. Muy útil para visualizar rápidamente la estructura cuaternaria de las proteínas.

Puentes de hidrógeno y puentes disulfuro

Para mostrar los puentes de hidrógeno de una molécula seguimos estos pasos:

- Activar el menú desplegable: coloque el puntero del ratón sobre el recuadro de la molécula y pulse el botón secundario del ratón (o bien haga clic sobre el logotipo "Jmol", o clic mientras mantenemos pulsada la tecla Control).
- Seleccionar Estilo > Enlaces de hidrógeno

Activo mostrará los enlaces de hidrógeno que estén especificados en el archivo de coordenadas. Normalmente, no hay tales enlaces, por lo que debemos pedir a Jmol que calcule, basándose en la geometría de la

molécula*, qué átomos formarán un puente de hidrógeno.

Calcular hace que Jmol calcule los enlaces de hidrógeno y los muestre como líneas delgadas de trazos (difíciles de ver si la molécula es grande; acércala usando la rueda del ratón o con Mayúsculas+arrastre vertical).

No oculta los enlaces de hidrógeno (si ya están calculados, bastará más tarde usar Activo para mostrarlos de nuevo).

Varias opciones numéricas en **Å** hacen que se muestren los enlaces (como Activo) pero como líneas gruesas (varillas, pero discontinuas).



(*) ¡Atención! Jmol sólo calcula enlaces de hidrógeno entre los grupos peptídicos de una proteína (carbonilo y amino); no calcula enlaces entre las cadenas laterales de los residuos aminoácidos. En consecuencia, no muestra todos los enlaces de hidrógeno existentes en una proteína. En los ácidos nucleicos, sólo calcula los enlaces de hidrógeno típicos de los pares de bases.

Para visualizar los puentes disulfuro, se trabaja de forma análoga pero utilizando el menú Estilo > Enlaces disulfuro.

Modelos en estéreo

Con Jmol es posible visualizar las moléculas en estéreo. Para verlas son necesarias unas gafas de visión estereoscópica, o bien cierta habilidad en desenfocar la vista para ver imágenes tridimensionales, algo no recomendable con los estudiantes.

• Activar el menú desplegable: coloque el puntero del ratón sobre el recuadro de la molécula y pulse el botón secundario del ratón (o bien haga clic sobre el logotipo "Jmol", o clic mientras mantiene pulsada la tecla Control).



Seleccionar Estilo > Estereografía y:

Para verlo con gafas, dependiendo del color de los cristales (aparecen dos imágenes ligeramente desfasadas):

- * Gafas rojo+cian
- * Gafas rojo+azul
- * Gafas rojo+verde

Para verlo sin gafas, desenfocando la vista (aparecen en el recuadro dos moléculas):

- * Visión bizca o
- * Visión paralela (aquélla a la cuales nos adaptemos mejor)

A veces es necesario reducir o alejar las moléculas grandes con la opción Tamaño para poder visualizar correctamente la imagen doble.

• Para eliminar las imágenes en estéreo: Estilo > Estereografía > Nada.

Actividades de aplicación

Busque en internet portales que contengan galerías de moléculas químicas, descárguelas y organice en carpetas según sus funciones o tipo de productos, luego de visualizarlas con Jmol, proceda a la elaboración de una

guía de uso de los mismos para abordar diferentes capítulos del estudio de la química. Esta actividad sería más productiva si la complementa con la construcción de moléculas químicas utilizando esferas (plásticas, plastoformo, goma, plastilina) y palitos de madera u otro material.

Colección de applets del portal Phet para la enseñanza y aprendizaje de la química

En la página Simulaciones interactivas Phet de la Universidad de Colorado², existe gran cantidad de animaciones interactivas muy útiles para trabajar contenidos de química.

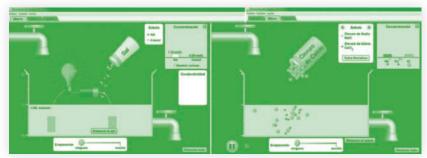


Así, por ejemplo, los constructores de átomos y moléculas son dos interesantes propuestas para entender la estructura de los elementos químicos de la tabla periódica, constituyéndose en animaciones muy motivadoras para que las y los estudiantes comprendan el concepto de enlace y formación de compuestos químicos a nivel molecular y en tres dimensiones.

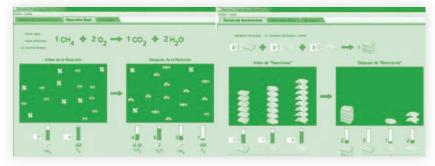


² Cuya dirección electrónica es: https://phet.colorado.edu/es/simulations/cate¬gory/chemistry

Asimismo, el applet de simulación de soluciones salinas y azucaradas nos permite estudiar el comportamiento electrolítico y de conductividad de las sales y el azúcar en diferentes concentraciones:



Otra animación muy ilustrativa y motivadora es en la que se trabaja el concepto de reactivo limitante y/o sobrante dentro del contenido de estequiometría, empleando un ejemplo análogo con la preparación de sándwiches:



Actividades de aplicación

Seleccione un conjunto de applets java y elabore una guía metodológica que contemple los cuatro momentos (practica-teoría-valoración-producción) de uso de los mismos para abordar diferentes contenidod del estudio de la química.



Tema 2: Modelación molecular (geometría molecular) en el aprendizaje de la química

Dibujando moléculas con Avogadro

En el tema anterior vimos cómo utilizar moléculas ya construidas; sin embargo, en este tema se abordaran sugerencias e ideas de cómo construir las mismas con programas especializados; así, por ejemplo, iniciamos con el uso de software libre, en este caso se trata del programa Avogadro, cuya dirección electrónica es:

http://avogadro.cc/wiki/Main_page de la cual descargará la versión 2013-12-11 que es más estable.



A continuación se hace una descripción gráfica acerca de su instalación:

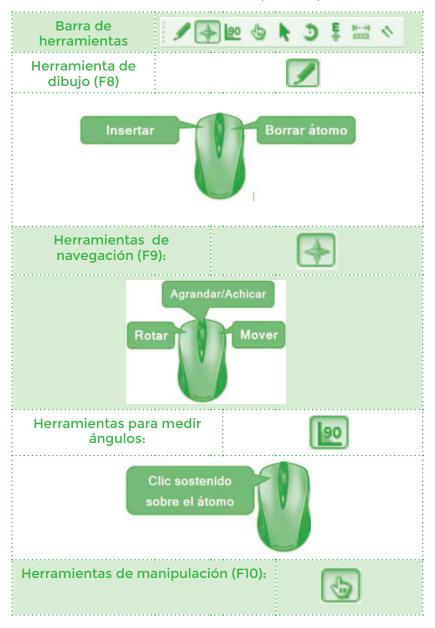


Una vez instalado el programa se procede a construir, como ejemplo, una molécula de dióxido de carbono, etano, ciclohexano y, finalmente, una de ácido sulfúrico. Para ello se iniciará conociendo el entorno de trabajo:

Abra el programa y emergerá la siguiente pantalla:



En esta ventana se describen los elementos que la componen:





Actividades de aplicación

Actividad 1: Crear una molécula de CO2 y optimizar su estructura

1. Para crear el modelo molecular del dióxido de carbono, seleccione la herramienta dibujo, de la paleta Draw Settings del lado izquierdo de la pantalla elija el elemento Carbono (verificar que las casilla Adjust Hydrogens no esté etiqueada) luego solamente haga clic en cualquier parte del área de construcción, luego agregar dos átomos de oxígeno teniendo en cuenta que sean con doble enlace.



2. Optimice la molécula haciendo clic en la herramienta optimizar o bien haciendo clic en la barra de menú Extensions – Optimize geometry o presionando las teclas Control+Alt+O





3. Para concluir con esta molécula puede rotarla en 3D, para ello haga clic en la herramienta de navegación y luego con el ratón puede moverlo en cualquier dirección.



Actividad 2: Dibujar una molécula de C2H6 (etano) y optimizar su estructura.

1. Para dibujar la molécula de etano, sólo agregue dos átomos de carbono con enlace simple, para ello hacemos clic en el botón con forma de lápiz de la barra de herramientas, luego haga clic en el área de construcción y aparecerá una molécula de metano, en seguida haga clic sobre esta y arrastre a un lado, apare¬cerá un segundo carbono que se autocompletará con los hidróge¬nos respectivos, si no se autocompletara, haga clic en la barra de menús Build y a continuación clic en Add hydrogens



Actividad 3: Dibujar una molécula de ciclohexano y optimizar su estructura.

1. Dibujar el ciclohexano, constituye una tarea un tanto compleja, sin embargo no difícil, para ello primeramente haga clic en la herramienta Dibujo (botón lápiz) luego verifique que la casilla Adjust Hydrogens de la paleta Draw settings no esté seleccionada, a continuación sólo hacer clic en el área de construcción para dibujar un nuevo carbono sucesivamente hasta tener el ciclohexano que por supuesto no tendrá las medidas ni distancias exactas ni estará enlazado con los hidrógenos, para que esto suceda será necesario utilizar la herramienta de auto-optimización descrita en las actividades anteriores.



Actividad 4: Dibujar una molécula de ácido sulfúrico y optimizar su estructura.

1. Para dibujar la molécula de ácido sulfúrico, primero elija del panel de dibujo (lado izquierdo) el átomo de azufre, luego dos oxígenos con enlace simple y dos con enlace doble.



2. Luego de completar el dibujo, proceda a optimizarla, como en las actividades anteriores y el resultado final será como el de la siguiente imagen:



3. Finalmente guarde la molécula creada, para ello haga clic en el menú File (archivo) y luego en Save as... se abrirá una ventana donde debe elegir el tipo de formato con el que desee guardar, en este caso elegimos MDL (*.mol)



Dibujando moléculas con Chemsketch

Chemsketch es software propietario de acceso gratuito, es similar al anterior (Avogadro), sin embargo tiene algunas herramientas más desarrolladas, con Chemsketch se pueden dibujar moléculas utilizando líneas y representarlas en tres dimensiones, además una de las características fundamentales es que el programa nombra las moléculas construidas bajo normas IUPAC. Así mismo también permite agregar (importar) imágenes para elaborar informes de laboratorio y por supuesto cuanta con un banco de imágenes con los materiales de laboratorio más utilizados en química.



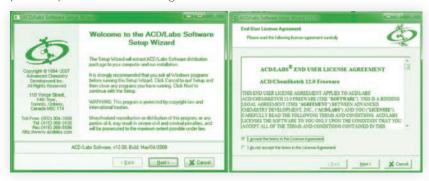
Chemsketch se descarga de manera gratuita previo registro y creación de una cuenta de usuario de: www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/



La última versión gratuita es la 12.0 liberada en febrero de 2009 y a la fecha no existe una versión actualizada puesto que el programa en realidad es comercial.



Una vez descargado se procede a la instalación siguiendo los siguientes pasos explicados de manera gráfica:



Recuerde hacer clic en accept the terms in the License Agreement para proseguir con la instalación.

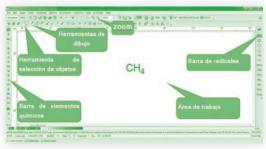


Al finalizar esta acción el asistente de instalación crea varios accesos directos para los diferentes componentes del programa, elegir **Chemsketch** y cuando abra por primera vez el programa visualizará una ventana en la que debe habilitar algunos formatos, dependiendo de sus necesidades, activará las mismas.

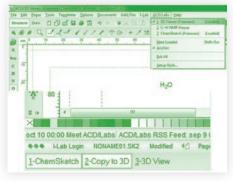


A continuación se presenta una descripción general paso a paso de cómo puede usarla para dibujar, por ejemplo, una molécula de metano:

1. En la ventana de trabajo del programa haga clic en la zona de trabajo y de manera predeterminada aparecerá una molécula de metano:



2. También se puede cambiar de elementos químicos, en este caso en la barra de elementos haga clic en el símbolo del Oxígeno, luego clic en el área de trabajo y esta vez se obtendrá una molécula de agua representada por su fórmula H2O, a continuación puede visualizar en 3D, para ello haga clic en la Barra de Menú ACD/ Labs y de la lista desplegable elegimos 3D viewer (freeware), luego retornamos al programa principal haciendo clic en la opción 1-Chemsketch de la barra de estado en la esquina inferior izquierda de la ventana. Estando ya en Chemsketch, hacer clic en la opción 2-Copy to 3D como se observa en las imágenes siguientes:



3. En seguida aparecerá una esfera que representa al átomo de oxígeno, para que aparezcan los dos átomos de hidrógeno, hacer clic en la herramienta Optimización 3D de la barra de herramientas la cual está representada por el ícono de una molécula de metano

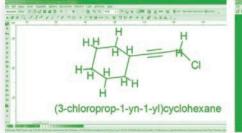


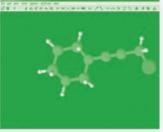
Esta molécula de agua puede ser visualizada en diferentes formatos como ser: líneas, barras y esferas, para ello en la barra de herramientas existen las diferentes acciones:



4. Para dibujar moléculas más complejas utilizando enlaces dobles y triples, además con varios elementos distintos se procede de la siguiente manera: elegir de la Barra de elementos químicos aquellos necesarios, así construye por ejemplo el C9H13Cl.

Primero tome el átomo de carbono y dibuje un ciclohexano, luego de uno de los carbonos desprender una nueva cadena de 3 carbonos más, hacer que los dos últimos tengan triple enlace, para ello solo arrastrar el cursor de ratón dos veces más entre ellos hasta lograr los tres enlaces, de este modo se obtiene una molécula como en la siguiente imagen:

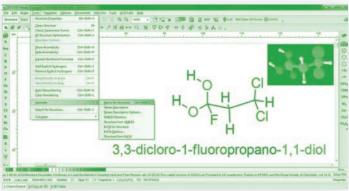




 Ya concluida la molécula proceda a guardarla, para ello se tienen varias posibilidades de formatos; en este caso elegir MDL (*.mol) que es un formato estándar y puede ser visualizado en varios programas como Jmol y Avogadro.



Una de las herramientas sobresalientes de este programa y que no se encuentran en ningún otro similar es la de generar nombre de la estructura. Para ello una vez dibujada la molécula, hacer clic en la Barra de Menú Tools, luego en Generate y finalmente en la opción Name for Structure (de manera abreviada puede acceder presionando las teclas Control+Mayuscula+I) y el resultado es como se muestra en el siguiente gráfico:



De la misma manera el programa posee plantillas que permite insertar varios elementos a los informes de laboratorio porque tiene varias galerías con gráficos, así por ejemplo para acceder a la galería de imágenes de material de laboratorio, seguir los siguientes pasos:

 Hacer clic en la Barra de Menú Templates, luego elegir Template Windows.



Aparecerá una ventana de la cual elegirá la opción Lab Kit que está en el panel izquierdo, sólo hace clic en el gráfico que requiere y lo agrega a la hoja de trabajo.



Actividades de aplicación (A)

Dibuje moléculas, genere sus nombres de manera automática y contrástelas con los ejercicios de for-mulación y nomenclatura química planteadas en la página web de Carlos Alonso, vista anteriormente.

Actividades de aplicación (B)

Construya 28 moléculas. Para ello construirá las estructuras de Lewis con enlaces y pares solitarios. Puede usar una referencia (libro de texto, sitio web) para asignar las geometrías moleculares y electrónicas para las hibridaciones (sp. sp2, sp3, dsp3, d2sp3).

Elemento	н	Ве	В	C, Si,	N, P	o, s	F, CI,	Ne, Ar,
# electrones de valencia	1	2	3	4	5	6	7	8

Tabla 1. Número de electrones de valencia de los elementos que pueden encontrarse en este ejercicio.

En primer lugar prepare una tabla en una hoja de cálculo de siete columnas y 29 filas y nómbrelas como se muestra en la tabla 3. Se recomienda trabajar las estructuras de Lewis (enlaces, pares de electrones) en un papel aparte primeramente, y después construirlas en la computadora. Utilice un programa de dibujo en 2D para construir las estructuras planas de las 28 estructuras.

Realice con sus estudiantes el nivel más sencillo de un análisis teórico (Mecánica Molecular) y la determinación de distancias de enlace y ángulos de enlace de 28 moléculas de uso general.

El modelo de la repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (VSEPR) es un modelo que se usa para predecir enlaces, pares de electrones libres y las geometrías que se derivan de éstos para muchas de las moléculas pequeñas. La Teoría de Orbitales Moleculares (TOM o MOT, en inglés) permite la predicción del orden de enlace y las características paramagnéticas o diamagnéticas de una molécula. Para la construcción de estas especies, resulta muy útil seguir las reglas que aparecen en la tabla 2.

Elemento	Carbono	Nitrógeno	Oxígeno	Flúor	Neón	Hidrógeno
# de enlaces	4	3	2	1	0	1
# de pares de electrones	0	1	2	3	4	0
Total	4	4	4	4	4	1

Tabla 2. Número de enlaces y de pares de electrones libres

Tabla 2. Para la construcción de moléculas no metálicas pequeñas, el número de enlaces y pares de electrones libres sigue las tendencias indicadas (al menos la mayoría de las veces). De acuerdo con las propiedades periódicas, las moléculas de cloro, bromo y yodo a menudo se comportan como flúor, y el azufre se comporta como oxígeno.

• **BeCl2:** La primera molécula a construir es BeCl2. Be es el átomo central y como tal es átomo clave para determinar hibridación y geometrías. Los iones cloruro están unidos al átomo central y sus enlaces y pares solitarios siguen las reglas de la tabla 1. En todas las estructuras que se construyan en este ejercicio, los átomos que están unidos al átomo central seguirán las reglas que se resumen en la tabla 1, pero los enlaces y pares solitarios del átomo central serán determinados por la estructura.

El **Be** dona dos electrones de valencia y cada cloro dona siete electrones de valencia para un total de 16 electrones de valencia. Dos electrones, sean un enlace o un par solitario, se representan por una línea. Siguiendo la tabla 1, poner un simple enlace y tres pares solitarios alrededor de cada átomo de cloro y poner el **Be** en el medio. La suma de todos los electrones debe ser 16. Usando una referencia (ej. Química de Chang) esta estructura clasifica como geometría lineal (AB2) con hibridación sp.

Para construir esta estructura en Avogadro y/o Chemsketch. Asegúrense de guardarlos con un nombre reconocible y en formato *.pdb

Completar la tabla de las moléculas a construir con los siguientes datos que los obtendrá en los programa de modelización molecular:

- a) Mida el ángulo de enlace con el átomo central como el segundo elemento. Mida el ángulo de todos los enlaces en que participa el átomo central.
- b) Mida las distancias de los átomos con relación al átomo central.
- c) Determine si la molécula es polar o apolar
- SnCl2. La segunda molécula a construir es el cloruro de estaño. En la tabla periódica el estaño esta debajo del C por lo que tiene 4 electrones de valencia a donar. Cada átomo de cloro tiene siete electrones de valencia para un total de 18 electrones de valencia entre tres átomos.

Usando la tabla 1, a cada átomo de cloro se le asigna un enlace y tres pares solitarios para un total de 16 electrones. Esto deja un par de electrones que no se usa y se asigna al átomo central Sn como un par solitario de electrones. Esto resulta en un átomo central con hibridación sp2 (AB2L1 o AB2L).

Asegurarse de guardar y cerrar archivo anterior e iniciar uno nuevo.

Siga el mismo procedimiento computacional descrito en la construcción del BeCl2. Copie la estructura y los valores específicos de las magnitudes calculadas en su reporte (tabla 3).

 C2H2. El etileno o acetileno tiene 10 electrones de valencia, cuatro por cada carbono y uno por cada átomo de hidrogeno. Cada átomo de carbono funciona como un átomo central y los hidrógenos solo tienen un simple enlace sin pares de electrones solitarios. La estructura resultante tiene un triple enlace y dos enlaces simples, la cual corresponde con la hibridación sp.

Comparando esta estructura con el BeCl2 se ve que las dos estructuras se corresponden con la hibridación sp pero el BeCl2 tiene solo simples enlaces mientras que el C2H2 tiene triple y simple enlace. La hibridación del átomo central y la geometría no están dadas por el tipo de enlace (simple, doble o triple) del átomo central, lo importante es el número de enlaces y el número de pares solitarios.

Vamos a construir la estructura en Avogadro. El etileno requiere la selección de un átomo de C que tenga un simple enlace y un triple enlace que puede encontrarse en el panel de dibujo. Enlace los dos átomos de C por el triple enlace y adicione los átomos de hidrogeno a los enlaces simples. Una vez construida la estructura, siga el enfoque computacional que se describe líneas arriba y, guarde, copie y pegue la estructura y los datos en su informe.

• XeF4. La cuarta molécula a construir es el tetrafluoruro de xenón. Xe es un gas inerte y contribuye con 8 electrones de valencia a la estructura de Lewis. El flúor contribuye con siete electrones por cada átomo para un total de 36 electrones. Cada átomo de flúor tiene un enlace simple y tres pares solitarios hasta llegar a 32 electrones (8 x 4 = 32). Esto deja un total de 4 electrones (36-32 = 4) que se asignan al átomo central como dos pares solitarios. Esto significa que el Xe, el átomo que determina la geometría tiene cuatro enlaces simples y dos pares de electrones solitarios.

El tetrafloruro de xenón tiene geometría cuadrado plana y simple enlace. El flúor puede seleccionarse del mismo menú y enlazarse a los cuatro enlaces simples que aparecen en el Xe. Optimice la estructura y haga los cálculos como se describió anteriormente. Con esta estructura simétrica, se pueden medir dos ángulos, 90° y 180°.

• I3-. La quinta molécula a construir e insertar en su reporte es el 13-. Cada átomo de yodo dona siete electrones de valencia para un total de 21 electrones. En la mayoría de los casos, usted encontrará un número par de electrones para distribuir, por lo que siempre trate de comprobar sus cálculos si lo que obtiene es un número impar. En este caso la molécula triatómica es además un ión por lo hay que adicionar un electrón para un total de 22 electrones. Uno de los átomos de yodo es el átomo central y los otros dos están enlazados a él (ej. I-I-I). Los dos átomos enlazados tienen un simple enlace al átomo central y tres pares de electrones libres.

Entre estos dos átomos de yodo se colocan 16 electrones, quedando 6 electrones o tres pares sin asignar (22 de valencia – 16 sobre el I = 6 restantes). Estos tres pares de electrones se asignan al átomo central de yodo, quedando con una geometría AB2L3 con hibridación sp3d (o dsp3).

• SF6. La sexta y última estructura que vamos a construir es el hexafluoruro de azufre. El azufre contribuye con 6 electrones de valencia y cada flúor con 7 electrones para un total de 48 electrones (1xS(6 e-) + 6 x F(7e-) = 48e-). Siguiendo la tabla 1, cada átomo de flúor tiene un enlace y tres pares de electrones solitarios para un total de ocho electrones por cada átomo de flúor. Considerando los seis átomos de flúor, se consideran 48 electrones en total en seis enlaces simples y 18 pares solitarios (6F x 3), resultando una geometría octaédrica.

Tabla 3. Configurar su tabla en posición horizontal, con el siguiente formato. Las instrucciones para las primeras seis moléculas se dieron anteriormente. Su tabla debe tener siete columnas y 29 filas. Use los mismos encabezamientos.

Espe- cie	ABxLy	Hibrida- ción, Geo- m e tría electrónica	Geome- tría Mole- cular	Estruc- tura de Lewis	Estructura dibujada en Avogadro	Propiedades Calculadas
BeCl ₂	AB ₂	sp lineal	lineal	CI-Be-CI	000	ángulo=180° Be-Cl (2), 1,36 Å apolar
SnCl ₂	AB ₂ L	sp ² trigonal plana	angular	Sn Cl Cl	^	ángulo=109° CI-Sn=2.32 Å (polar)
C ₂ H ₂	AB ₂	sp lineal	lineal	H-C=C-H	000	ángulo =180° C-H 1.066 Å CC, 1.20 Å (apolar)
XeF ₄	AB ₄ L ₂	sp ³ d ² octaédrica	cuadrado plana	F F Xe F F	+	ángulos =90°,180° Xe-F, 1.924 Å (apolar)
l ₃ -	AB ₂ L ₃	sp ³ d bipirámide trigonal	lineal	14-1	000	ángulo = 180 I-I=1.926 Å (apolar)
SF ₆	AB ₆	sp ³ d ² octaedrica	octaedrica	F S F F	4	ángulos = 180, 90 S-F = 1.660 Å (apolar)



Bibliografia

Chang, R. (2010). Química (Décima ed.). México D.F.: Mc Graw Hill.

Garrido, M. B., & Herráez, Á. (2006). Guía de Jmol. Recuperado el 1 de 10 de 2014, de http://biomodel.uah.es/Jmol/jmolguia/inicio.htm

Ministerio de Educación. (2014). Unidad de Formación Nro. 15 Física - Química "Modelización Matemática e Informática en el aprendizaje de la Física-Química". (E. PROFOCOM, Ed.) La Paz, Bolivia: Cuadernos de Formación Continua.

Tapia, G. (2009). Uso pedagógico de laboratorios virtuales en el aprendizaje de la física y química. Cochabamba.

Tapia, G. (2010). La informática y electrónica como recursos para la enseñanza y aprendizaje de las ciencias. Cochabamba, Bolivia.

