

La Química Computacional como instrumento para promover el aprendizaje basado en modelos en educación secundaria y bachillerato

Ferran Acuña Parés^{1,*}

¹Universidad Internacional de la Rioja (UNIR), Avda. de la Paz, 137. 26006. Logroño (La Rioja), España
*ferran.acuna@unir.net

unir
LA UNIVERSIDAD
EN INTERNET

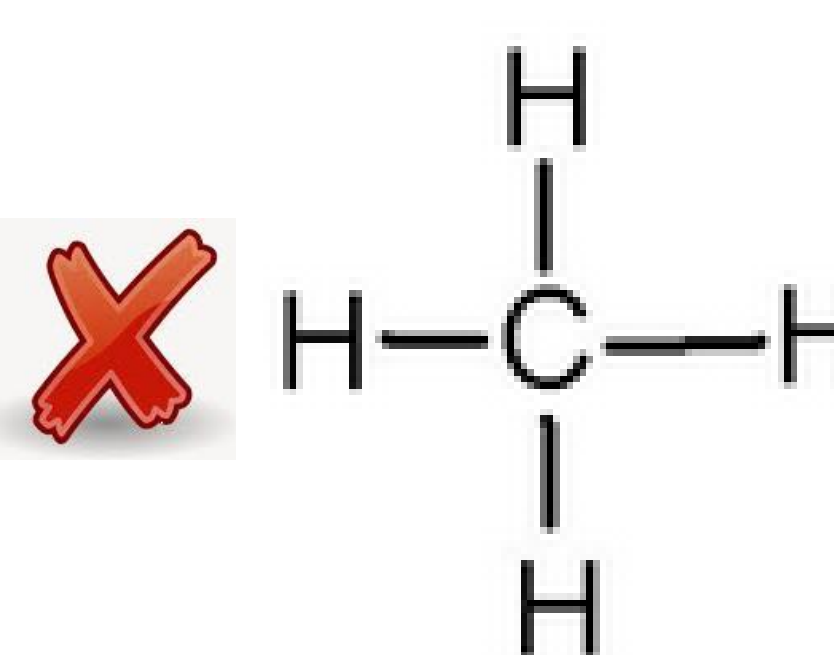
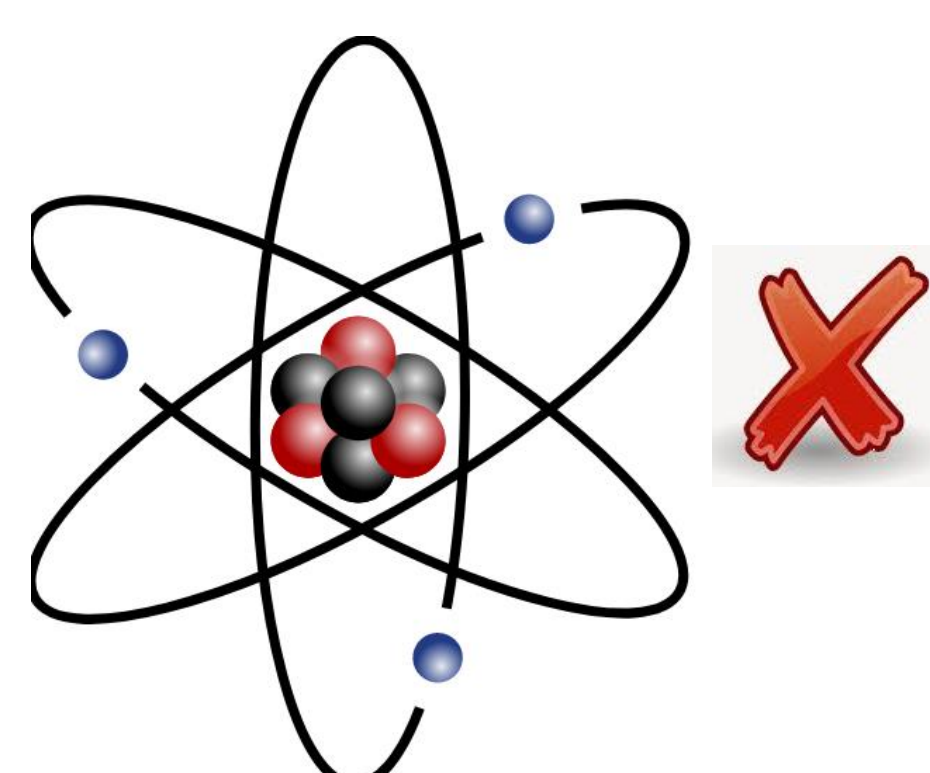
La enseñanza de las ciencias experimentales frecuentemente utiliza modelos científicos/curriculares, pero su aprendizaje puede llevar a malentendidos, especialmente sobre la estructura del átomo¹ y el enlace químico². Se propone un cambio de paradigma donde los estudiantes construyan y apliquen sus propios modelos. Los avances en informática han permitido crear entornos interactivos que facilitan la visualización de fenómenos complejos, aunque muchos programas necesarios son costosos y requieren supercomputación. La propuesta didáctica utiliza la interfaz WebMO,³ accesible y gratuita, para que el alumnado de 4º de ESO y Bachillerato estudien la estructura electrónica del átomo, el enlace químico y la geometría molecular mediante modelos computacionales, mejorando su comprensión de la materia y corrigiendo errores previos.

Propuesta didáctica

Temporalización: Sesión 1 (Cuestionario inicial + Discusión) + Sesión 2 (Actividad) + Sesión 3 (Discusión resultados) + Sesión 4 (examen)

Modelo atómico

4º ESO



Modelo enlace químico

2º Bachillerato

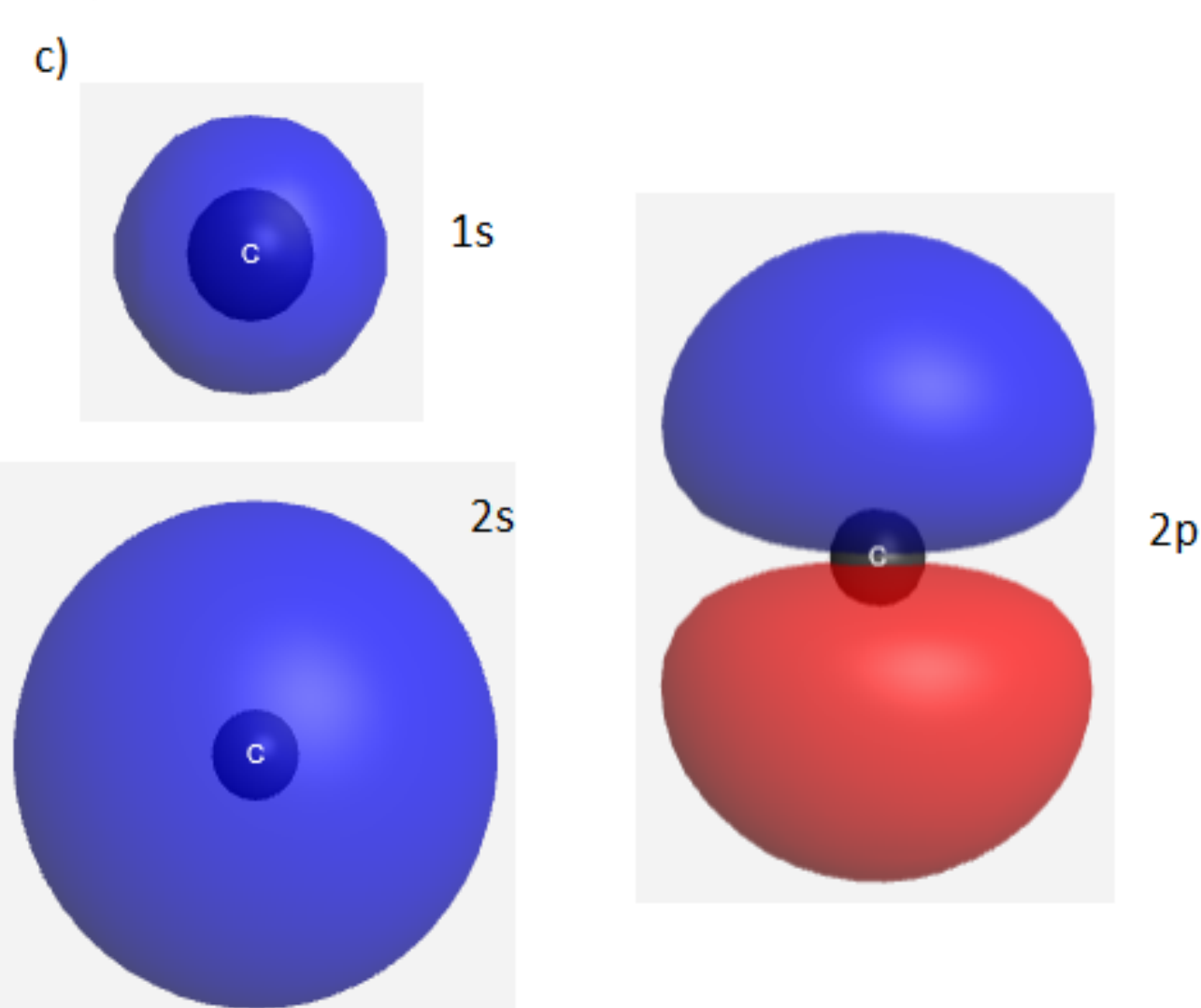
a)

Orbital	Symmetry	Occupancy	Energy	Actions
1	A1G	2	-10.91012 Hartree	
2	A1G	2	-0.59761 Hartree	
3	T1U	2	-0.21922 Hartree	
4	T1U	0	0.27227 Hartree	
5	T1U	0	0.27227 Hartree	



b)

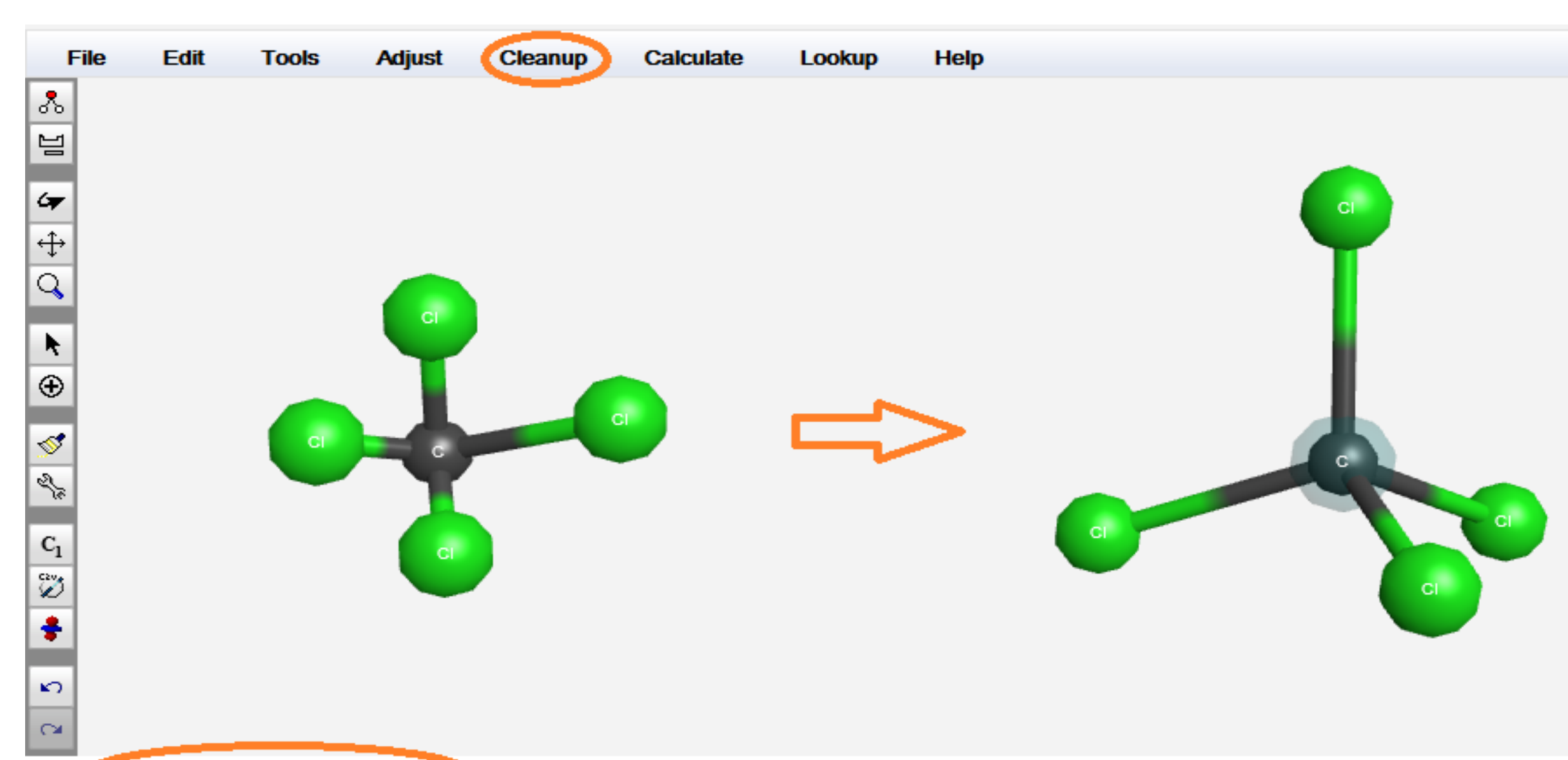
#	Energy	Occ.
1	-10.910 au	2e-
2	-0.598 au	2e-
3	-0.219 au	2e-
4	0.272 au	0e-
5	0.272 au	0e-



- Calcular los orbitales atómicos de H, He, C, O, F, Ne, Ca, S.
- Determinar los tipos de orbitales y su ocupación.
- ¿Los electrones tienen una posición determinada dentro de cada orbital?
- ¿Qué relación existe entre la energía de los orbitales, su tamaño y la distancia electrón-núcleo?
- Representa el diagrama de energía de los orbitales atómicos, ordenándolos de menor a mayor energía e indicando su empleo. De acuerdo con el diagrama, ¿cuál es la configuración electrónica de cada elemento?
- A partir de los resultados anteriores, indica que representa el diagrama de Möeller.

Cualificación final = 50 % Rúbrica informe + 40 % examen + 10 % actitud

- 1) A.G. Harrison, D.F. Treagust, Science Education, 80 (1996), 509.
- 2) M. De posada, Enseñanza de las ciencias, 17(1999), 227.
- 3) W.F. Polik, J.R. Schmidt, WIREs Comput Mol Sci., 12 (2021), e1554.

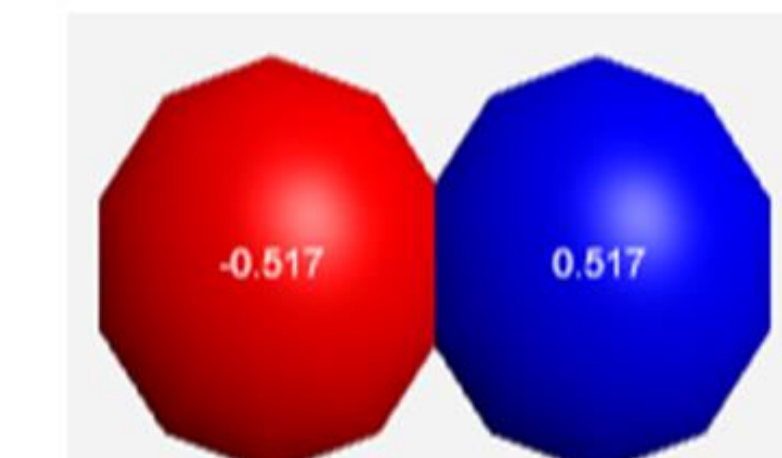
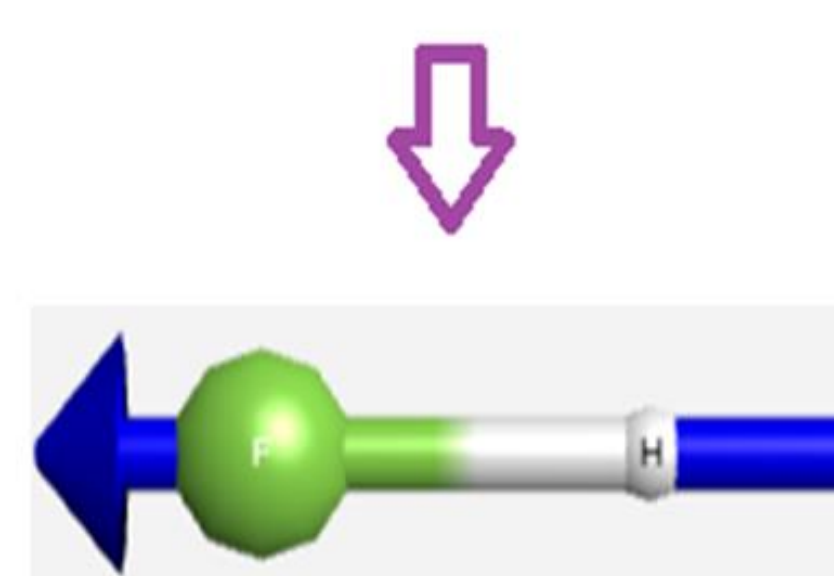


Overview

ZPE	0.009926 Hartree
Dipole Moment	1.9720 Debye

Partial Charges

Atom	Symbol	Charge
1	F	-0.516713
2	H	0.516713



- Determina la estructura de las siguientes moléculas: PCl3, GeH4, CO, BH3, C2H2, H2Se, SbF5, TeBr6.
- ¿Qué influencia tienen los pares de electrones libres sobre la estructura molecular? Compara estructuras.
- Indica el tipo de hibridación de los orbitales de cada átomo. Justifica la geometría de las moléculas.
- ¿Qué tipos de enlace covalente (simple, doble o triple) encontramos en las moléculas anteriores? Justifícalo a partir de la TEV.
- Calcula las cargas parciales para cada molécula. ¿Qué relación existe entre su magnitud y la electronegatividad de los elementos?
- Calcula el momento dipolar. ¿Qué moléculas son polares? A partir de las cargas parciales, justifica la orientación del vector momento dipolar.

Las actividades de modelización son una excelente oportunidad para mostrar la efectividad de trabajar en grupo para resolver un problema, promover el pensamiento crítico y también el uso del método científico, familiarizándose con la forma de presentar la investigación en publicaciones científicas a través de elaboración de un informe de resultados. Además, contribuyen a la consecución de competencias clave como la de aprender a aprender y la digital.

Se ha diseñado una propuesta didáctica donde la química computacional se convierte en el hilo conductor del aprendizaje. Esta propuesta se focaliza en el estudio del modelo mecanocuántico del átomo por parte de los alumnos de 4º ESO, y el enlace químico a 2º de bachillerato. El docente debe vehicular el proceso de aprendizaje, considerando las ideas previas de los alumnos a la hora de corregir los errores conceptuales. La discusión conjunta de los resultados finales promueve la autoevaluación de los estudiantes, ayudándoles a corregir las ideas equivocadas y consolidar su aprendizaje.

