



MEMORIA DE LAS ACCIONES
DESARROLLADAS
PROYECTOS DE MEJORA DE LA CALIDAD
DOCENTE VICERRECTORADO DE



❖ **DATOS IDENTIFICATIVOS:**

Título del Proyecto

MEJORA DE LA VISION TRIDIMENSIONAL DE ESTRUCTURAS MOLECULARES DE COMPUESTOS ORGÁNICOS MEDIANTE EL USO DEL SOFTWARE LIBRE CHEMSKETCH 12 (Nº de Proyecto 092012)

Resumen del desarrollo del Proyecto

Esta comunicación hace referencia al Proyecto de Mejora de la Calidad Docente 092012 aprobado por el Consejo de Gobierno de la Universidad de Córdoba con fecha 08/10/09. El Proyecto se desarrolla con los alumnos de la actual Licenciatura en Biología por la Universidad de Córdoba, dentro de la asignatura Química, de carácter troncal.

Con el desarrollo del presente Proyecto Docente se pretende trabajar las competencias del alumnado relacionadas con las formas de representación, nomenclatura y visión tridimensional de las estructuras moleculares de compuestos orgánicos simples, empleando como herramienta el software libre ChemSketch 12 (de ACDLabs).

Se pretenden alcanzar tres objetivos básicos: i) Dotar al alumno de una herramienta informática básica para la creación y/o visualización de estructuras moleculares, ii) Introducir al alumno en las formas de representación de moléculas orgánicas, y facilitar el proceso de visualización molecular tridimensional y iii) Comprender mediante el trabajo con el software proporcionado, el concepto de isomería y estereoquímica de compuestos orgánicos.

Para la realización de las actividades previstas, contamos con una de las Aulas Interactivas que la Facultad de Ciencias posee en el aula Averroes del Campus de Rabanales, equipada con 24 ordenadores portátiles y pizarra electrónica. La metodología a seguir consiste en la realización de 4 sesiones presenciales de una hora de duración, que se desarrollarán a lo largo del curso, de forma paralela a la impartición de determinados temas del Programa de la asignatura. Una vez finalizadas las actividades correspondientes a este Proyecto, se procederá a realizar una encuesta en la que el alumno valore el grado de mejora en sus competencias.

Coordinador/a:

Nombre y apellidos

FRANCISCO J. URBANO NAVARRO

Código del Grupo Docente

UCO-032

Departamento

Dpto Química Orgánica

Otros participantes:

Nombre y apellidos

M^a ANGELES ARAMENDIA LOPIDANA

Código del Grupo Docente

UCO-032

Departamento

Dpto Química Orgánica

Asignaturas afectadas

<u>Nombre de la asignatura</u>	<u>Área de Conocimiento</u>	<u>Titulación/es</u>
Química	Química Orgánica	Ldo en Biología
Química Orgánica del Medioambiente	Química Orgánica	Ldo en CC. Ambientales
Enlace Químico y Estructura de la Materia	Química Orgánica	Ldo en Química
Química Orgánica	Química Orgánica	Ldo en Química
Química Orgánica	Química Orgánica	Ldo en Veterinaria

MEMORIA DE LA ACCIÓN

Especificaciones

Utilice estas páginas para la redacción de la Memoria de la acción desarrollada. La Memoria debe contener un mínimo de cinco y un máximo de diez páginas, incluidas tablas y figuras, en el formato indicado (tipo y tamaño de fuente: Times New Roman, 12; interlineado: sencillo) e incorporar todos los apartados señalados (excepcionalmente podrá excluirse alguno). En el caso de que durante el desarrollo de la acción se hubieran producido documentos o material gráfico dignos de reseñar (CD, páginas web, revistas, vídeos, etc.) se incluirá como anexo una copia de buena calidad.

Apartados

1. Introducción (justificación del trabajo, contexto, experiencias previas etc.)

Una de las carencias con las que accede el alumnado de primer curso de las licenciaturas en Ciencias Experimentales, desde el punto de vista de los conocimientos en Química, es la dificultad para visualizar correctamente la estructura tridimensional de las moléculas orgánicas.

En este sentido, uno de los primeros bloques temáticos en las asignaturas de Química General consiste en el estudio de la estructura atómica y molecular de compuestos químicos. Los conceptos de orbital (atómico y molecular) hibridación, resonancia y deslocalización son básicos para entender correctamente la estructura de los compuestos químicos, especialmente los orgánicos. En este sentido, aún después de trabajar en clase estos conceptos, algunos alumnos tienen dificultades para dibujar y/o visualizar correctamente la geometría de moléculas simples como la de metano, amoníaco o agua así como de otras algo más “complejas” como el etano, etileno, acetileno o benceno.

Por otro lado, debido a la falta de tiempo, algunos conceptos fundamentales como la isomería (y estereoisomería) y la estereoquímica se suelen abordar, quizás, muy ligeramente en los cursos de Química General de las actuales Licenciaturas. En los nuevos Grados, no es previsible que se disponga de más tiempo en este tipo de asignaturas, en las que, además, se habrá de proporcionar herramientas adecuadas para que el alumno avance en su propia autoformación.

Es cada vez mayor el número de informes, trabajos, presentaciones, etc., que los alumnos han de realizar durante el desarrollo de un curso académico. En la mayoría de los casos estos trabajos se realizan en formato electrónico, por lo que es importante que el alumno disponga de una herramienta que le permita incorporar estructuras químicas a dichos ficheros electrónicos, sin necesidad de navegar por la *web* buscando una imagen que copiar. Existen bastantes programas comerciales (software) que poseen una amplia funcionalidad, aunque hay que pagar la correspondiente licencia. No obstante, existe otro software libre que con unas pequeñas limitaciones, muchas veces indetectables, permite trabajar con estructuras químicas. Este es el caso del software **ChemSketch v.12** de la casa comercial ACDLabs que es una versión gratuita (freeware) aunque completamente operativa de un programa comercial más complejo.

El presente Proyecto Docente pretende abordar los puntos anteriores, dotando al alumno de una herramienta básica para dibujar estructuras químicas, y profundizar en los conocimientos relacionados con la estructura molecular, la isomería y la estereoquímica de compuestos orgánicos simples. El Proyecto se estructura en relación a los alumnos de la actual Licenciatura en Biología por la Universidad de Córdoba, dentro de la asignatura de carácter troncal denominada **Química** [1]. No obstante, los objetivos y la metodología utilizada se pueden ampliar a cualquier curso de Química General o Química Orgánica Básica de las actuales Licenciaturas o de los futuros Grados.

2. Objetivos (concretar qué se pretendió con la experiencia)

Con el desarrollo de este Proyecto Docente se pretenden cumplir tres objetivos básicos:

- 1) Dotar al alumno de una herramienta informática básica para la creación y/o visualización de estructuras moleculares;
- 2) Introducir al alumno en las formas de representación de moléculas orgánicas, y facilitar el proceso de visualización molecular tridimensional y
- 3) Comprender mediante el trabajo con el software proporcionado, el concepto de isomería, (estereoisomería) y estereoquímica de compuestos orgánicos

3. Descripción de la experiencia (exponer con suficiente detalle lo realizado en la experiencia)

Situación Temporal de las Actividades

La metodología a seguir para obtener los objetivos establecidos consiste en la realización de 4 sesiones presenciales de una hora de duración, que se desarrollarán a lo largo del curso, de forma paralela a la impartición de determinados temas del Programa Teórico de la asignatura. Una vez finalizada la explicación del capítulo correspondiente, se procederá a realizar la actividad programada, en forma de *Seminario de Aplicación*.

Desglose de Actividades

En la Tabla 1 se muestra el desglose de actividades realizadas de acuerdo con lo expresado anteriormente.

Tabla 1: Desglose de las actividades realizadas en cada uno de los 4 módulos establecidos.

MODULO N° 1.	<i>Duración</i> , 1 hora
	<i>Capítulo del Programa Teórico Relacionado</i> : El Enlace Químico (Tema 3)
	<i>Actividades a realizar</i> : Estudio de las hibridaciones del tipo sp ³ , sp ² y sp.
	<i>Seminario 1</i> : Estructura de las moléculas de metano, amoníaco, agua, etano, etileno, acetileno y benceno
MODULO N° 2	<i>Duración</i> , 1 hora
	<i>Capítulo del Programa Teórico Relacionado</i> : Estereoquímica (Tema 9)
	<i>Actividades a realizar</i> : Isomería y Estereoisomería: enantiómeros y diasterómeros.
	<i>Seminario 2</i> : Los ácidos tartáricos.
MODULO N° 3	<i>Duración</i> , 1 hora
	<i>Capítulo del Programa Teórico Relacionado</i> : Hidrocarburos No Aromáticos (Tema 10)
	<i>Actividades a realizar</i> : Conformaciones del ciclohexano; Formas silla y bote; Enlaces axiales y ecuatoriales.
	<i>Seminario 3</i> : Estructuras de la α-D-Glucosa y de la β-D-Glucosa.
MODULO N° 4	<i>Duración</i> , 1 hora
	<i>Capítulo del Programa Teórico Relacionado</i> : Derivados Halogenados (Tema 12)
	<i>Actividades a realizar</i> : Estereoquímica de las Reacciones Químicas: Sustitución Nucleófila en derivados halogenados.
	<i>Seminario 4</i> : Sustitución Nucleófila Unimolecular (S _N 1) vs Bimolecular (S _N 2).

4. Materiales y métodos (describir la metodología seguida y, en su caso, el material utilizado)

Para la realización de las actividades previstas, contamos con una de las Aulas Interactivas que la Facultad de Ciencias posee en el aula Averroes del Campus de Rabanales, equipada con 24 ordenadores portátiles, pizarra electrónica, escáner e impresora láser a color. No obstante, se recomendó que cada alumno trajera su propio portátil, de forma que pudiera seguir con el trabajo de forma no presencial.

5. Resultados obtenidos y disponibilidad de uso (concretar y discutir los resultados obtenidos y aquéllos no logrados, incluyendo el material elaborado y su grado de disponibilidad)

Inicialmente se realizó una encuesta para recabar información sobre las intenciones del alumno respecto al proyecto docente. Se le informó del contenido del mismo y se hizo hincapié en que se trataba de materia no evaluable, y que el desarrollo del proyecto sería paralelo al de las clases, en horario no lectivo para el estudiante. La encuesta se pasó en clase el 17 de noviembre de 2009, recogiendo 28 encuestas de los 100 alumnos de nueva matriculación. El reducido número de encuestas es el reflejo de la escasa asistencia del alumnado a las clases de las diferentes asignaturas del curso. Por otro lado, de las 28 encuestas recogidas, sólo 22 alumnos manifestaron interés explícito por asistir a las sesiones.

El primer módulo del proyecto docente se planificó en sendas sesiones para los días 14 (lunes) y 17 (jueves) de diciembre de 2009 en el Aula Interactiva II de la Facultad de Ciencias. La asistencia a dichas sesiones fue de un total de 12 alumnos (4 y 8 respectivamente) lo que sólo supone un porcentaje ligeramente superior al 50% de los alumnos que mostraron interés.

La sesión se inició con la descarga del software desde la página de ACDLabs [2] y la posterior instalación ya fuera en los ordenadores portátiles del Aula Interactiva o en los propios que trajeron algunos alumnos. Posteriormente se realizó por parte del profesor una descripción general del programa, para posteriormente pasar a dibujar diferentes moléculas en 2D, optimizarlas en 3D y analizarlas desde el punto de vista estructural. En concreto se estudiaron:

- Moléculas simples con hibridación **sp³** como las de metano (CH₄), Etano (CH₃CH₃), amoníaco (NH₃) y agua (H₂O).
- Moléculas simples con hibridación **sp²** como las de Etileno (CH₂=CH₂) y Benceno (C₆H₆).
- Moléculas simples con hibridación **sp** como la de acetileno (CH≡CH)

Teniendo en cuenta la escasa asistencia a las sesiones anteriores, el segundo módulo se planificó en una sesión impartida durante una de las horas lectivas asignadas a la asignatura durante el mes de enero de 2010. En este módulo, se introdujo al alumno en la forma de representar estructuras estereoquímicas, especialmente centros quirales. Se hizo distinción sobre la forma de representar los enlaces en moléculas tridimensionales: en el plano del papel (—), hacia fuera del plano del papel (—), hacia adentro del plano del papel (.....) o enlaces con estereoquímica no definida (~~~~). Una vez establecidas las convenciones, se procedió a dibujar los dos enantiómeros correspondientes al 1-aminoetanol. Finalmente, se pasó a la representación en proyección de Fisher de los diferentes estereoisómeros del ácido 2,3-dihidroxiutanodioico (ácidos tartáricos, Figura 1).

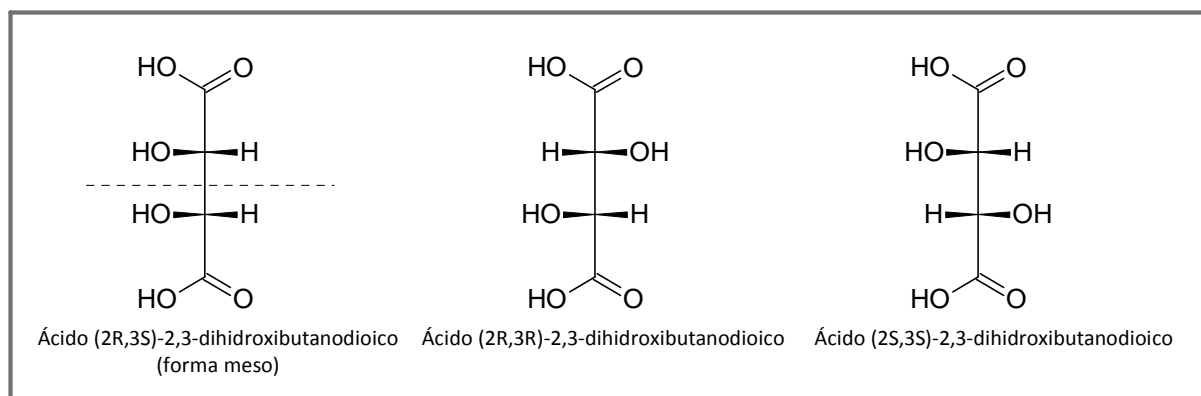


Figura 1: Diferentes estereoisómeros del ácido 2,3-dihidroxiutanodioico (ácidos tartáricos), representados en proyección de Fisher.

El tercer módulo, realizado durante el mes de Abril, de nuevo en horario lectivo, consistió en visualizar las estructuras en forma de *silla* y *bote* correspondientes al ciclohexano con sus correspondientes enlaces axiales y ecuatoriales. Por extensión se estudiaron las estructuras de la α y β -D-Glucopiranososa y de su proceso de interconversión mediante mutarrotación (Figura 2).

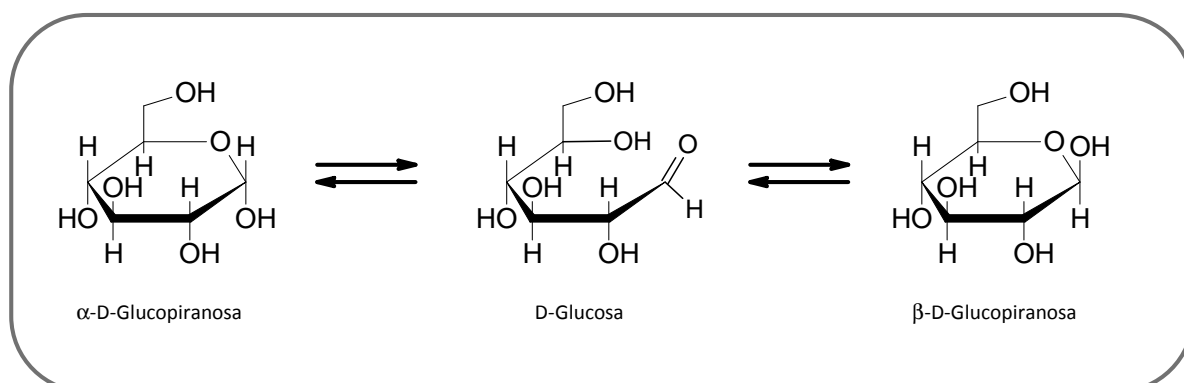


Figura 2: Proceso de mutarrotación de la Glucosa. Interconversión entre la α y la β -D-Glucopiranososa en disolución acuosa.

Finalmente, el cuarto modulo se centró en estudiar la estereoquímica de el mecanismo de sustitución nucleófila en derivados halogenados, en función de que el mecanismo sea *unimolecular* o *bimolecular*. Los mecanismos unimoleculares transcurren con la formación de un carbocatión con la consiguiente pérdida de pureza óptica y posterior racemización del producto de reacción (Figura 3).

Por otro lado, los mecanismos bimoleculares transcurren en un solo paso en el que el reactivo desplazante fuerza la salida del grupo saliente manteniéndose la pureza óptica aunque en configuración invertida (inversión de la configuración , Figura 4).

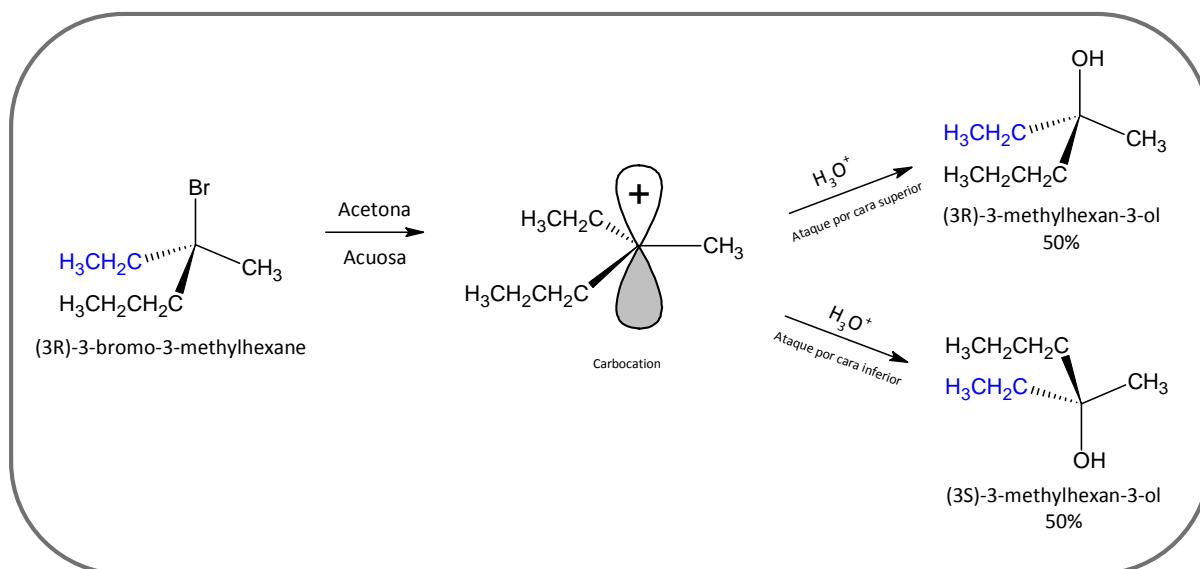
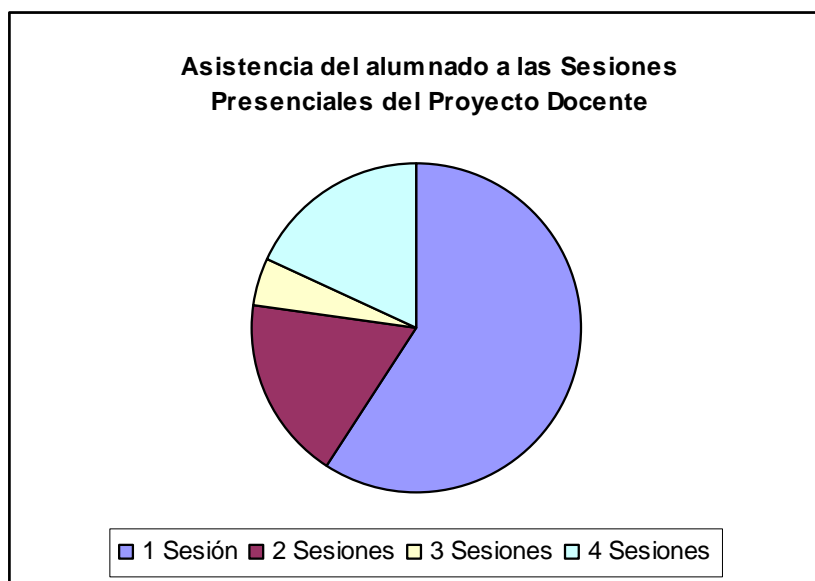


Figura 3: Estereoquímica de la reacción de sustitución nucleófila a través de un mecanismo unimolecular (S_N1). El proceso transcurre con *racemización* del alcohol formado como producto de la reacción tras el ataque del reactivo desplazante al carbocatión formado en el paso lento del proceso.

8. Autoevaluación de la experiencia (señalar la metodología utilizada y los resultados de la evaluación de la experiencia)

Una vez finalizadas las actividades correspondientes a este Proyecto, se procedió a realizar una encuesta en la que el alumno ha valorado el grado de mejora en sus competencias. Los resultados de estas encuestas nos han permitido evaluar el grado de aceptación por parte del alumno del modelo de trabajo y evaluar la posibilidad de incluir este tipo de experiencias en cursos próximos.

Se han recogido un total de 70 encuestas. Solo 44 alumnos (63%) han asistido a alguna sesión presencial del Proyecto Docente, siendo la distribución de la asistencia muy irregular, como se observa en la Figura 5. Entre los alumnos que han asistido a alguna sesión presencial, una gran mayoría han descargado (70%) y usado (68%) en software en sus propios ordenadores. Por otro lado, el 77% de los alumnos que han asistido consideran que los conocimientos adquiridos les serán de utilidad en el futuro y consideran conveniente (un 68%) incluir este tipo de actividades en los grados



9. Bibliografía

[1] Guía Docente de la asignatura *Química* de la Licenciatura en Biología por la Universidad de Córdoba para el curso 2009-2010. Disponible en: <http://www.uco.es/organiza/centros/ciencias/lbiologia/planificacion/documentos/guias/3361.pdf>

[2] Freeware ChemSketch 12 de la casa comercial ACD/Labs. Se inserta el link correspondiente a la página de descarga de freeware de dicha firma comercial: <http://www.acdlabs.com/download/chemsketch/>

[3] *Mejora de la visión tridimensional de estructuras moleculares de compuestos orgánicos mediante el uso del software libre chemsketch 12*. Comunicación presentada a las IV Jornadas de Trabajo sobre Experiencias Piloto de Implantación del Crédito Europeo. Rectorado de la Universidad de Córdoba, 18 de Febrero de 2010. Publicación del libro de resúmenes, pendiente de ISBN.

Lugar y fecha de la redacción de esta memoria

Córdoba a 23 de septiembre de 2010