

VISUALIZACIÓN DE MODELOS MOLECULARES

CON SMILES™ ChemSketch® Y Jmol

A. Lucas, C. Giménez
Col·legi Sant Gabriel de Viladecans

INTRODUCCIÓN

La presencia masiva de las nuevas tecnologías (TIC) en nuestras aulas representa un reto para el profesorado, especialmente por el hecho de que el nuevo escenario supone una relativa autonomía del alumno en el acceso a la información y, por tanto, un inevitable cambio de rol del profesor.

Presentamos una secuencia didáctica apoyada en el uso de software gratuito (**SMILES™ – ChemSketch® – Jmol**) que permite generar y manipular de forma virtual modelos tridimensionales de moléculas orgánicas, con el objetivo de facilitar la comprensión por parte de los estudiantes de algunos aspectos de química estructural.

OBJETIVOS

- ❑ Dar a conocer las normas básicas de escritura del lenguaje químico SMILES™.
- ❑ Enumerar recursos online donde se utiliza de manera habitual el lenguaje químico universal SMILES™.
- ❑ Presentar herramientas de software gratuito que permiten generar y manipular modelos moleculares, así como describir su uso.
- ❑ Proponer una secuencia didáctica, experimentada con nuestros alumnos de las materias de Química y Biología de primero de bachillerato, para aplicar estas herramientas.

DESARROLLO DE LA EXPERIENCIA

La gestión de aula se organiza en forma de seminario con dos sesiones de una duración de una hora y media aproximadamente, realizadas en horario extraescolar.

En la primera sesión se explican los aspectos prácticos necesarios para la descarga, instalación y manipulación de los diferentes programas informáticos necesarios; los alumnos reciben un dossier con una pequeña introducción a las normas de escritura de SMILES™, una serie de ejercicios resueltos y otra de ejercicios propuestos.

Por otra parte, se intenta mostrar a los alumnos la universalidad y versatilidad del lenguaje SMILES™; para ello se les invita a visitar diversas páginas web donde este lenguaje se utiliza de forma habitual.

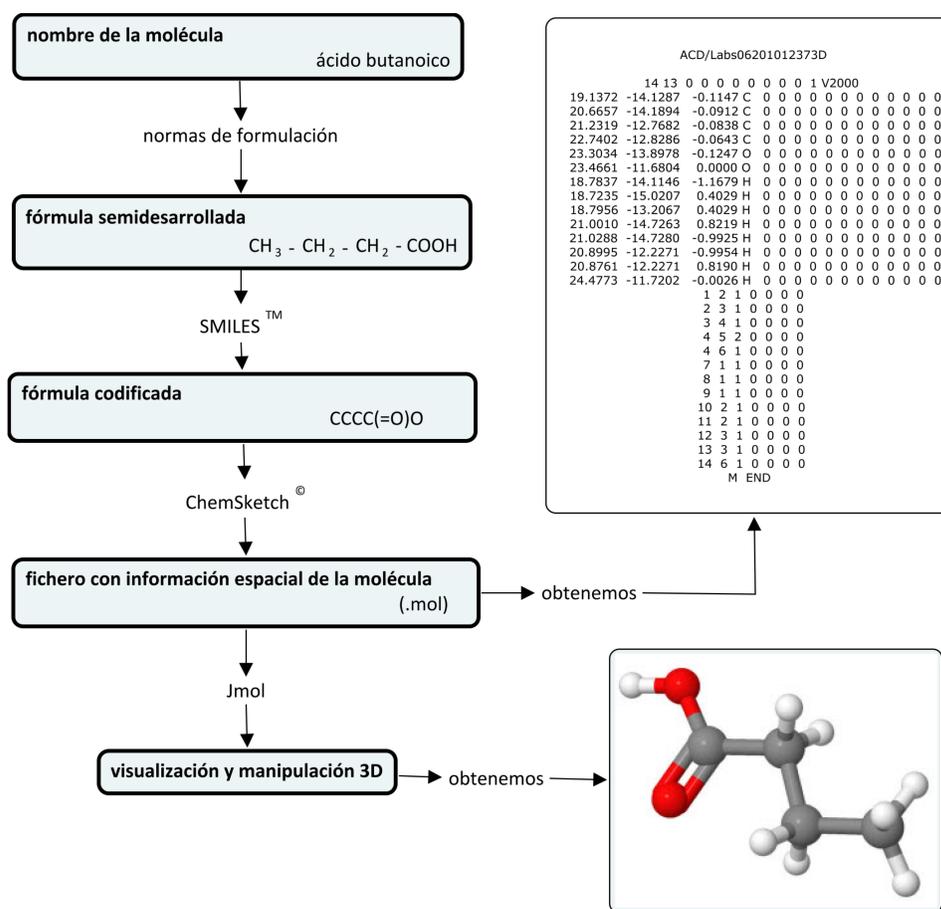
La segunda sesión del seminario sirve para revisar el trabajo realizado, resolver las posibles dudas y afianzar los conocimientos y habilidades adquiridos, así como para realizar una ampliación de las posibilidades que ofrece el procedimiento descrito para trabajar un concepto más complejo como las isomerías geométricas.

CONCLUSIONES

- ❑ La secuencia de trabajo resulta fácil de implementar para el profesor y de asimilar para el alumnado; no requiere un aprendizaje complejo ni desembolso alguno, por lo que se puede incorporar a cualquier aula de química o biología de bachillerato rápida y sencillamente.
- ❑ Podemos encontrar con facilidad tanto el software necesario como manuales de uso y una gran cantidad de recursos y ejemplos de aplicación existentes en Internet.
- ❑ Los alumnos experimentan una mejora evidente en la comprensión de los conceptos químicos implicados en esta experiencia.

SECUENCIA SMILES™ – ChemSketch® – Jmol

Acciones necesarias para obtener el modelo tridimensional manipulable con Jmol de una molécula orgánica desde su nomenclatura y formulación.



Ejemplo de secuencia de trabajo