



**Universitat**  
de les Illes Balears

**Títol: La Química Computacional com a eina per  
promoure l'aprenentatge basat en models en els  
centres d'educació secundària**

**NOM AUTOR: Ferran Acuña Pares**

**Memòria del Treball de Fi de Màster**

**Màster Universitari en Formació del Professorat  
(Especialitat/Itinerari de Física i Química)**

**de la**

**UNIVERSITAT DE LES ILLES BALEARS**

**Curs Acadèmic 2017-2018**

*Data 04/06/2018*

*Nom Tutor del Treball* Fernando Miquel Roigé

*Nom Cotutor (si escau)* \_\_\_\_\_

## RESUM

L'ensenyament en l'àmbit de les ciències experimentals recorre freqüentment a l'aprenentatge de models, és a dir, de simplificacions de la realitat emprades per comprendre els factors clau que determinen el funcionament de la naturalesa. Aquestes estructures mentals faciliten a l'alumnat interioritzar conceptes o idees abstractes que no es possible visualitzar en el nostre dia a dia o experimentar en el laboratori. Malgrat tot, la metodologia docent actual dóna lloc a molts equívocs que impedeixen que els estudiants compreguin bé el significat de "model", allò que estant representant i el seu impacte en la construcció del coneixement. Per tant, per a corregir aquestes deficiències curriculars, és necessari un canvi de paradigma, on l'alumnat aprengui ciència a través de la construcció dels seus propis models i la seva aplicació per comprovar la validesa de les teories científiques vigents.

Per aquest motiu, aquest treball vol donar a conèixer entre els estudiants i el professorat d'educació secundària el potencial que té la química computacional per a promoure l'aprenentatge en les matèries de Física i Química. Concretament, es presenta una proposta didàctica per els cursos de 4rt d'Educació Secundària Obligatòria (ESO) i batxillerat, on els estudiants participarien en la creació dels seus propis models. L'objectiu és que assoleixin una visió més clara i precisa sobre l'estructura i el comportament de la matèria, a través del modelatge d'estructures moleculars i l'execució de càlculs senzills per determinar les propietats d'algunes substàncies. En particular, també es busca motivar el seu interès per la ciència i fomentar la formació del professorat en l'ús pedagògic d'aquesta disciplina.

**Paraules clau:** Química computacional, model, TIC, didàctica de la Física i la Química, visualitzadors moleculars.

## ABSTRACT

Teaching in the field of experimental science often goes hand in hand with the learning of models, that is, simplifications of reality used to understand the key factors that determine how nature behaves. These mental structures make it easier for students to grasp abstract concepts or ideas that cannot be observed on our daily basis or in the laboratory. However, the current teaching methodology induce many misunderstandings that prevent students from understanding the meaning of "model", what they are representing and their impact on the construction of knowledge. Therefore, in order to correct these curricular deficiencies, a paradigm shift is necessary, in which students may learn science through the construction of their own models and their application to verify the validity of current scientific theories.

For this reason, this work seeks to make known among students and secondary school teachers the potential of computational chemistry to promote learning in the subjects of Physics and Chemistry. Specifically, a didactic proposal is presented for 4th Compulsory Secondary Education (ESO) and baccalaureate courses, in which students would participate in the creation of their own models. The objective is to achieve a clearer and more precise view of the structure and behaviour of matter, through the modelling of molecular structures and the execution of simple calculations to determine the properties of some substances. In particular, it also seeks to motivate student's interest in science and to promote teacher training in the pedagogical use of this discipline.

**Keywords:** Computational chemistry, model, ICT, Didactics of Physics and Chemistry, molecular visualization programs.

## ÍNDEX

<b>1. Introducció</b> .....	1
1.1. Justificació del treball i plantejament del problema.....	1
<b>2. Objectius</b> .....	3
<b>3. Marc teòric</b> .....	4
3.1. Els models i l'aprenentatge de les ciències.....	4
3.1.1. Ús dels models en la didàctica de les ciències.....	4
3.1.2. Problemes en l'aprenentatge dels models curriculars.....	5
3.2. L'ús de les TIC en l'ensenyament de la Química.....	6
3.2.1. Tipus d'aplicacions.....	8
3.3. L'estructura de la matèria: els models atòmics i d'enllaç químic.....	13
3.4. La química computacional i la didàctica de la Química.....	17
<b>4. Desenvolupament de la proposta</b> .....	20
4.1. Currículum de Física i Química.....	20
4.2. Programari de modelització.....	21
4.2.1. La interfície WebMO.....	21
4.2.2. Instruccions d'ús i exemples pràctics.....	24
4.3. Objectius de la proposta.....	32
4.4. Competències clau.....	32

---

4.5. Metodologia.....	33
4.5.1. Organització i temporització.....	34
4.5.2. Descripció de les activitats.....	36
4.5.3. Avaluació de l'alumnat.....	41
4.6. Valoració de la proposta.....	44
<b>5. Conclusions.....</b>	<b>46</b>
<b>6. Referències bibliogràfiques.....</b>	<b>48</b>
<b>7. Annexos</b>	
Annex I: Fonaments matemàtics de la química quàntica.	
Annex II: Qüestionari inicial.	
Annex III: Determinació de l'estructura molecular.	
Annex IV: Representació d'orbitals atòmics i la configuració electrònica.	

## 1. INTRODUCCIÓ

La societat actual es sustenta en el coneixement científic i tecnològic. Una formació adequada en aquestes disciplines resulta essencial per entendre el món en què vivim i disposar de les eines necessàries per solucionar els problemes que afecten el futur de la nostra espècie. És a les aules dels nostres instituts on trobem les bases d'aquesta formació.

Més enllà de transmetre correctament els coneixements, el professorat de secundària ha de duu a terme una tasca de gran complexitat: motivar l'interès de l'alumnat per a les ciències. L'ensenyament tradicional ha creat en els estudiants una imatge negativa de les ciències, com un edifici construït a partir de teories incomprensibles que cal memoritzar per a solucionar problemes complexos. Aquesta visió del coneixement científic ni aporta un aprenentatge correcte dels seus continguts, ni mostra a la ciència com un entitat dinàmica que constantment es qüestiona la realitat, ni crea vocació. Revertir aquesta imatge requereix un canvi significatiu de la metodologia docent cap a una forma d'ensenyar que proporcioni un aprenentatge gradual, que connecti els diferents coneixements científics i els doti de significat.

La innovació educativa cada vegada està més present a les aules. Les activitats que promouen un aprenentatge significatiu, a partir del treball per projectes o el treball cooperatiu, fan que l'alumnat posi en pràctica allò que ha après, que aprengui a raonar d'acord amb el mètode científic i que desenvolupi altres competències clau més enllà de la científica i matemàtica. Aquestes activitats també poden considerar la diversitat a l'aula i oferir una atenció més personalitzada als estudiants.

### 1.1. Justificació del treball i plantejament del problema

Tot i les passes que s'estan donant per aconseguir un aprenentatge més significatiu en el camp de les ciències, la comprensió dels conceptes més abstractes que trobem en les matèries de Física i Química continua essent un obstacle difícil de superar. Aquesta dificultat neix tant de la manera en què el docent transmet les teories científiques com de la imatge mental que en crea

l'alumnat. És en aquest punt on es les noves tecnologies poden aportar una solució eficaç, a través de la visualització de les idees més complexes i la seva manipulació.

La finalitat d'aquest treball final de màster és mostrar la viabilitat i eficàcia de la introducció del *software* propi de l'àmbit de la recerca en Química per corregir els errors d'aprenentatge de les característiques més importants dels sistemes i fenòmens químics. La inclusió d'aquestes eines al currículum de Física i Química també permet que l'alumnat sigui protagonista del seu aprenentatge, motivant el seu interès per la pràctica científica.

## 2. OBJECTIUS

L'objectiu principal d'aquest treball és mostrar com la química computacional proporciona les eines adequades per promoure l'aprenentatge de la química. Es proposa al docent que integri l'ús de visualitzadors moleculars i programes de càlcul per facilitar la representació mental de conceptes abstractes com els orbitals o l'enllaç químic.

Per assolir aquest objectiu, el projecte es desenvoluparà d'acord amb els objectius específic següents:

- a) Analitzar quines dificultats tenen els alumnes per a concebre els continguts relacionat amb l'estructura de la matèria i l'enllaç químic, i proposar una millora en l'ensenyament d'aquest continguts a través de la química computacional.
- b) Repassar els antecedents que existeixin sobre l'ús de recursos computacionals a les aules i la seva influència en l'aprenentatge i grau de motivació de l'alumnat.
- c) Dissenyar una proposta didàctica que inclogui activitats on la química computacional sigui el fil conductor de l'aprenentatge.
- d) Valorar si la proposta aporta una millora en l'adquisició de coneixements a través de la construcció i estudi de models, així com la seva viabilitat.



### 3. MARC TEÒRIC

#### 3.1. Els models i l'aprenentatge de les ciències

Els models són representacions parcials d'un objecte, un procés o una idea (Ingham i Gilbert, 1998; Shusaku i Bret, 2009). Són abstraccions de les característiques més importants d'un sistema i, per tant, no són entitats reals ni còpies del mateix. L'objectiu dels models és simplificar les entitats complexes o abstractes per afavorir la seva visualització, comprensió i la comunicació de les idees que se'n deriven (Gobert, O'Dwyer, Horwitz, Buckley, Tal Levy i Wilensky, 2011). Per tant, tots els models són limitats.

Cada individu es capaç de generar un *model mental*, una representació personal d'allò que pretén representar (Rickheit i Sichelschmidt, 1999) o comprendre. Quan el model es consensua per un grup social i s'empra pel desenvolupament del coneixement científic, llavors parlem de *models científics*. Aquests últims són una representació simplificada o idealitzada de determinats fenòmens o sistemes naturals complexes o que no podem visualitzar a simple vista (Treagust, Chittleborough i Mamiala, 2002).

Els models científics s'elaboren per explicar les dades experimentals, plantejar-se noves qüestions o fer previsions sobre el comportament d'un sistema en diferents contextos. Són susceptibles de ser modificats segons els coneixements de què es disposa en un moment determinat. Així, quan els models són incapaços de racionalitzar un determinat aspecte de la realitat o quan és fan disponibles noves formes d'explicar-ho, es modifiquen o es creen nous models. Les revolucions científiques han coincidit històricament en èpoques en les quals es renovaven els models científics acceptats fins el moment. Els models científics descartats s'anomenen *models històrics* (Justi, 2000).

##### 3.1.1. Ús dels models en la didàctica de les ciències

L'ensenyament de les ciències recorre freqüentment a l'aprenentatge de models. No obstant, els models científics sovint són massa intricats i/o requereixen d'un coneixement superior en matemàtiques. Per tant, els professors utilitzen formes

simplificades anomenats *models curriculars*. Aquests permeten al professorat transmetre únicament les característiques més importants de sistemes o processos difícils d'explicar i/o impossibles de mostrar als estudiants (Coll et al., 2005). De vegades només interessa remarcar un determinat aspecte dels models curriculars, recorrent als *models d'ensenyament*. Aquests últims afavoreixen la interiorització i visualització dels conceptes abstractes mitjançant dibuixos, simulacions o analogies, i són molt utilitzats en manuals didàctics.

Tradicionalment, els professors s'han limitat a presentar els models que esperen que els alumnes aprenguin, sense clarificar que són representacions parcials i limitades de la realitat, i que existeixen múltiples versions per explicar un mateix procés. Aquest forma d'ensenyar acaba derivant en una mala interpretació del contingut de les assignatures de ciències.

### 3.1.2. Problemes en l'aprenentatge dels models curriculars

Nombrosos estudis han mostrat que bona part de l'alumnat no només no té una comprensió adequada sobre que és un model, sinó que també tenen problemes específics en l'aprenentatge d'alguns models curriculars. Un exemple són les investigacions sobre la introducció de models per a comprendre els conceptes d'àtom (Harrison i Treagust, 1996) o enllaç químic (Boo, 1998; De Posada, 1999). Aquests estudis revelen que els docents no són capaços de explicar clarament la naturalesa dels models ni el paper que juguen en racionalitzar els processos fisicoquímics. Així, un estudi sobre la formació l'enllaç covalent mostra que els estudiants expliquen aquest enllaç segons la "tendència" o "necessitat" per completar l'ocupació de la capa més externa dels àtoms (Taber, 1997). No obstant, l'explicació científica correcte per a la formació d'un enllaç químic és la minimització de l'energia lliure del sistema a través de l'equilibri de les forces electrostàtiques entre les substàncies que es combinen.

Tampoc s'utilitzen sempre els models més adequats o contenen errors conceptuals importants. Un exemple són els *models híbrids*, construïts a partir de diversos models històrics (Justi i Gilbert, 2003). Un exemple és quan es pretén ensenyar que és la cinètica d'un procés químic: s'explica el concepte d'energia

d'activació des del punt de vista de la teoria de col·lisió però es parteix de la idea de "complex activat" que prové d'una teoria totalment diferent (Justi, 2000). Una altra exemple és la representació típica d'un àtom, on es recorre al model nuclear de Rutherford però es dibuixen òrbites fixes pels electrons tal com estableix el model de Bohr. Els models híbrids poden ser útils per a transmetre els continguts però creen una imatge distorsionada del procés científic.

Si volem que l'alumnat compregui plenament els models curriculars, el professorat hauria de proposar activitats basades en la seva construcció i ús. D'aquesta manera, adquirirà una forma de raonar propera a la utilitzada en l'àmbit científic, més enllà de la memorització de conceptes i regles, i entendrà el paper dels models en la construcció del coneixement (Chittleborough i Treagust, 2007). És en aquest punt on la informàtica pot promoure l'aprenentatge de les ciències, oferint la capacitat de visualitzar, manipular i fins i tot crear models mitjançant entorns gràfics.

### **3.2. L'ús de les TIC en l'ensenyament de la Química**

Les Tecnologies de la Informació i la Comunicació (TIC) són tots aquells recursos, programes i eines destinades a facilitar la obtenció d'informació, el seu processament, emmagatzematge i compartició a través de dispositius digitals com ara tabletas, telèfons mòbils, ordinadors, etc. En les últimes dècades, les TIC s'han implementat de manera progressiva en la nostra societat, provocant grans canvis socials, econòmics i culturals que han incidit en diferents àmbits de la nostra vida. Avui en dia, la societat considera imprescindibles molts dels serveis que ens proporcionen les TIC, com el correu electrònic, els motors de cerca d'informació, la banca per internet o la descàrrega de música i pel·lícules. Llavors, no ha de semblar estrany que comencin a jugar un paper important en l'àmbit de l'educació.

En l'informe de l'OCDE del 2001 ja es destaquen els avantatges tant econòmics, socials i pedagògics que suposa la incorporació de les TIC en el camp de l'educació. Pel que fa aquest últim punt, l'estudi realitzat pel Gabinet de Comunicació i Educació de la UAB i Aula Planeta "Tecnología y pedagogía en

las aulas. Perspectiva 2014" conclou que la total digitalització dels continguts educatius i les eines docents anirà acompanyada de la implementació de nous mètodes pedagògics que acabaran donant lloc a llarg termini al concepte "d'aula creativa oberta". S'argumenta que aquesta futura aula incentivarà tant la creació com la investigació per part dels alumnes, fomentant el seu esperit crític, el treball cooperatiu i donarà més pes a les competències que als coneixements.

Clarament, la digitalització a l'aula a l'estat espanyol s'ha donat de forma progressiva entre el 2014 i el 2016 però no segueix el mateix ritme que proposa l'estudi anterior. Actualment, les TIC apareixen com un tema del currículum de l'assignatura de Tecnologia, i cada vegada s'utilitzen més en els centres educatius per qüestions administratives o la gestió de l'aula mitjançant una xarxa interna per part del professorat, però el seu ús pedagògic no està encara totalment normalitzat. Els docents que busquen noves formes de potenciar l'aprenentatge i el desenvolupament de les competències clau de l'alumnat a través de tasques innovadores o nous enfocaments pedagògics haurien de considerar les potencialitats de les TIC.

Estudis sobre l'impacte de les TIC en el camp de la química realitzats per Gómez (2006), González i Blanco (2011) i Saavedra (2011) conclouen que les TIC propicien l'experimentació i la recerca per part de l'estudiant, generant interès per la matèria, i afavorint un aprenentatge significatiu. La investigació de García (2013) sobre l'aplicació de les TIC per millorar l'aprenentatge de la formulació química, conclou que el programari permet a l'estudiant ser protagonista de la seva educació, millorant la seva capacitat d'abstracció. Així, tots aquests estudis recolzen que en una metodologia docent basada en l'ús de les TIC es poden plantejar activitats que permetin a l'alumnat interioritzar conceptes abstractes i construir models.

Si entenem les TIC com a eines per promoure l'aprenentatge de les assignatures de Física i Química, podem emprar-les tant per afavorir alguns aspectes de l'aprenentatge (ajudar en la presentació oral de resultats, l'autoavaluació,

incentivar el debat, etc.), com per a l'estudi de fenòmens fisicoquímics a nivell experimental o a través d'entorns virtuals.

### 3.2.1. Tipus d'aplicacions

Existeixen multitud d'aplicacions que permeten visualitzar i/o modelar l'evolució de sistemes o processos naturals inaccessibles a nivell quotidià. Aquestes es poden classificar en tres categories segons el grau d'interacció amb l'usuari:

#### a) Animacions:

L'usuari no pot modificar les condicions en què es regeix el procés fisicoquímic que es representa. La seva visualització es pot repetir de forma il·limitada, però la seqüència està predeterminada pel dissenyador. Són útils per mostrar les característiques més bàsiques d'alguns processos, il·lustrar idees clau darrere un model o les característiques d'un sistema natural, però la impossibilitat de intervenir en l'evolució del sistema no permet a l'usuari establir relacions entre les variables que el controlen.

A la xarxa podem trobar animacions útils per a l'aprenentatge de la química. Un exemple a destacar és el portal FQSB, que conté moltíssimes animacions flash sobre els continguts de les assignatures de Física i Química d'ESO i batxillerat.

#### b) Simulacions:

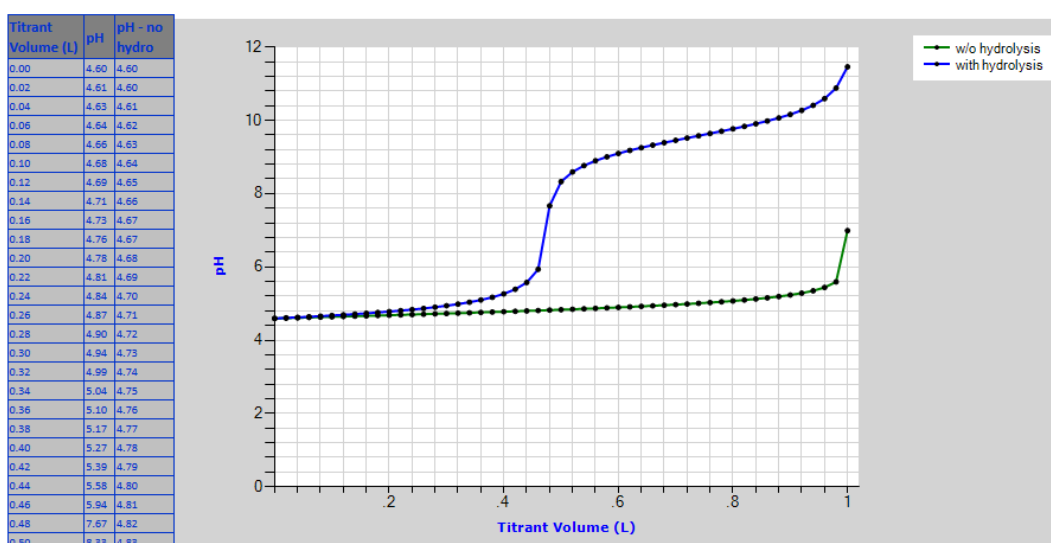
Són aplicacions que permeten que l'usuari intervingui en l'evolució d'un procés, analitzant com influeix el canvi d'algun paràmetre sobre els resultats. Pot veure què passa en diferents circumstàncies utilitzant les regles o models preestablerts pel dissenyador. Les simulacions proporcionen una imatge més completa del fenomen o model que s'estudia, facilitant la construcció de representacions mentals dels mateixos. Així, s'assoleix un grau de comprensió que no és possible a través de les animacions.

Tot i que les simulacions poden fomentar l'ús del mètode científic, existeix el risc que l'alumnat utilitzi aquestes eines sense entendre allò que està modificant i els resultats que se'n deriven. A més, treballar en les situacions ideals que suposen les simulacions (que eliminen totes les pertorbacions que es donen la realització dels experiments en el laboratori) i la comoditat de la seva execució pot provocar que l'alumnat consideri aquestes com un substitut del treball experimental. El professor ha d'assegurar-se que hi ha una reflexió prèvia sobre la teoria i una reflexió posterior sobre els resultats obtinguts a través d'aquestes aplicacions i la necessitat de la tasca experimental per demostrar les lleis naturals darrere d'aquestes aplicacions.

La Societat Americana de Química (ACS) ofereix a la seva pàgina web un llistat de simuladors i blogs que podem trobar a la xarxa per promoure l'aprenentatge de la química, tant a secundària com a la universitat. D'entre tots aquests, m'agradaria destacar el simulador del portal ChemReax™. Aquesta aplicació permet als usuaris simular reaccions químiques, per estudiar la seva termodinàmica i cinètica en diferents condicions experimentals, i també simular corbes de valoració àcid-base (Figura 1). Considero que és una aplicació molt útil per reforçar el concepte d'equilibri químic al batxillerat.

**Thermodynamics:** (@ T = 298.15 K)

Standard Enthalpy of Formation and Entropy	$\Delta_f H^\circ(T)$ (KJ/mol)	$S^\circ(T)$ (J/mol.K)	Reaction Thermodynamics & Equilibrium	Value
H2O [gas]	-241.82	188.86	Standard enthalpy change, $\Delta_r H^\circ(T)$	483.63 KJ
			Standard entropy change, $\Delta_r S^\circ(T)$	0.09 KJ
			Standard reaction free energy change, $\Delta_r G^\circ(T)$	457.16 KJ
O2 [gas]	0.00	205.15	Reaction free energy change at initial composition, $\Delta_r G(T)$	457.16 KJ
H2 [gas]	0.00	130.68	Equilibrium constant, K	8.1006e-081
			Temperature range for data	200.00 --> 5000.00 K



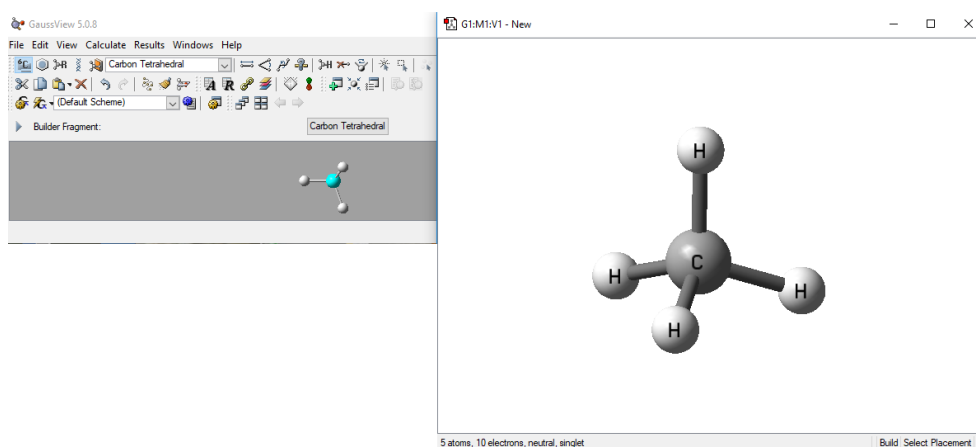
**Figura 1:** Termodinàmica de la reacció  $H_2O(g) \rightarrow H_2(g) + O_2(g)$  a una temperatura de 298.15 K mitjançant el simulador ChemReaX™ (dalt). A baix, valoració d'una dissolució d'àcid cianhídric (HCN) 1M amb una solució de NaOH 1M.

c) Software de modelització:

L'ensenyament dels models i la modelització és un tema cada vegada més freqüent en el camp de la didàctica de les ciències experimentals. Els alumnes necessiten saber com és el procés d'elaboració dels models per comprendre el paper que tenen en la ciència alhora de racionalitzar el funcionament de l'Univers. Una forma de d'ensenyar aquests conceptes és que els propis alumnes elaborin els seus models.

El software de modalització és tota aplicació informàtica dissenyada per a la construcció de models. Mitjançant aquestes eines digitals, els estudiants poden fer les seves representacions d'un procés o fenomen. Una vegada executat, poden simular-lo i comprovar si es comporta tal com prediuen determinades lleis o principis científics. Mentre que l'estudi a través de les simulacions requereix relacionar el canvis que s'observen a la pantalla amb alguna llei científica, la modelització implica conèixer tots els components del sistema, la seva relació i com representar-lo. Per tant, l'exigència cognitiva dels estudiants que aprenen a través de la modelització és superior que utilitzant animacions o simulacions.

El software de modelització que s'utilitza en el camp de la recerca científica fa accessible la comprensió de fenòmens que d'altra forma serien incognoscibles o molt difícils d'analitzar a nivell experimental. Els avenços en el camp de la informàtica han permès crear entorns interactius molt intuïtius que faciliten l'ús d'aquestes aplicacions, ajuden a visualitzar fenòmens molt complexes i permeten a l'usuari interaccionar amb el sistema d'estudi. En el camp de la recerca Química, aquest software s'utilitza per modelar processos que es desenvolupen a escala microscòpica. Exemples són els programes Gaussview, Chemcraft, VMD o Molden, tots ells dissenyats per construir i/o visualitzar estructures moleculars (Figura 2). Aquest software s'utilitza conjuntament amb altres programes de càlcul per predir propietats dels sistemes químics i la seva reactivitat.



**Figura 2:** Molècula de metà ( $\text{CH}_4$ ) representada amb el Gaussview.



És lògic pensar que aquests visualitzadors es podrien emprar amb finalitats pedagògiques i existeixen estudis que ho certifiquen. Concretament, Ingham i Gilbert (1991) mostren que manipular models moleculars millora l'aprenentatge del concepte d'estructura molecular. No obstant, una part d'aquest programari no és lliure i té un cost massa elevat per un centre de secundària. A més, si és vol fer un pas més enllà dels visualitzadors moleculars i introduir l'ús de programari específic per predir les propietats dels sistemes químics, aquest requereix d'una formació superior molt específica, tant a nivell teòric com pràctic, que supera els coneixements en física, química i matemàtiques que tenen els alumnes de secundària, batxillerat i part del professorat. A tot això, cal sumar-hi que en molts projectes basats en la modelització és necessari accedir a supercomputadors. No és estrany, doncs, que molts estudis focalitzin els seus esforços en la possible implementació d'aquestes eines en els primers anys de carreres científiques (Pearson, 2007; Clauss i Nelsen, 2008).

Per tant, les preguntes que ens fem en aquest treball són la següents:

- a) És possible adequar l'ús d'aquest software a nivell dels estudis de secundària/batxillerat per promoure l'aprenentatge de la química?
- b) I si fos així, com es podria accedir a aquestes eines sense que suposi un gran cost econòmic pels centres educatius?
- c) Quina formació hauria de rebre el professorat per emprar la modelització a l'aula de forma rutinària?

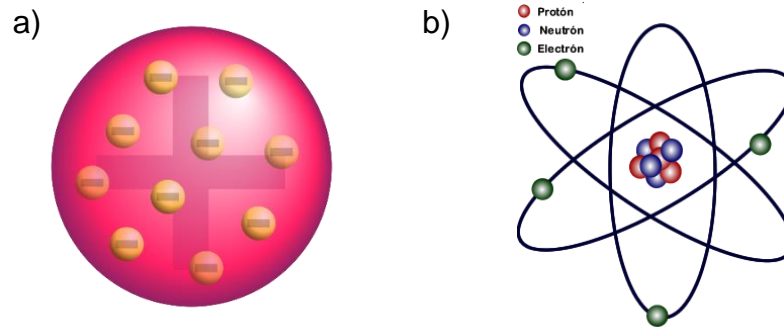
Al llarg del treball es donarà resposta a aquestes qüestions.

### 3.3. L'estructura de la matèria: els models atòmics i d'enllaç químic

La modelització computacional d'un procés només és possible si es comprenen els principis físicomatemàtics que el governen. Concretament, la racionalització de qualsevol procés químic es basa en l'anàlisi del comportament dels nuclis i els electrons dins un sistema atòmic o molecular. Llavors, per dotar d'un context a la implementació de la modelització computacional com a eina d'ensenyament a secundària, aquesta s'ha de fer d'acord amb les idees preconcebudes que tenen els alumnes sobre la matèria (com s'ha discutit a l'apartat 3.1) i el currículum d'aquesta assignatura.

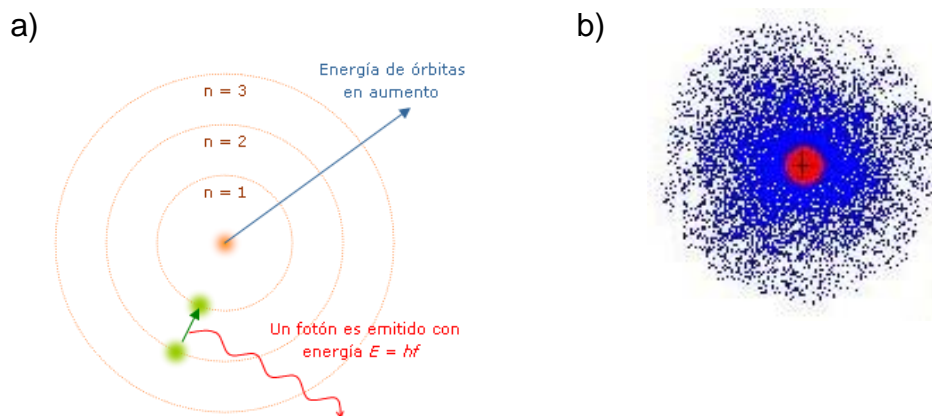
En el currículum de Física i Química d'ESO es reserva una unitat didàctica a l'ensenyament de l'estructura de la matèria. La història dels models atòmics més rellevants (que han estimulat la recerca sobre la constitució de la matèria) i els elements que els configuren s'utilitzen com a fil conductor per mostrar a l'alumnat les característiques més importants dels àtoms, així com per emfatitzar l'evolució constant que experimenta el pensament científic.

L'exposició dels models atòmics de Joseph John Thomson i Ernest Rutherford s'utilitzen per explicar la divisibilitat de l'àtom, la naturalesa elèctrica de les partícules que el configuren (protons, neutrons i electrons) i la seva estructura nuclear (Figura 3). Thomson va postular un model atòmic basant en l'electró, que havia descobert uns anys abans. Rutherford va elaborar el 1911 un model atòmic més proper a l'acceptat avui en dia, en què pràcticament tota la massa dels àtoms està concentrada al centre d'aquests i té càrrega positiva. A partir d'aquests models es fixen els conceptes de nombre atòmic, nombre màssic, isòtop d'un element i es prepara a l'alumnat per entendre l'organització de la taula periòdica. Pel que fa als electrons, el seu moviment a l'interior de l'escorça atòmic és explicat per analogia amb el moviment circular dels planetes al voltant del Sol. Tots aquests continguts permeten l'elaboració d'un model de l'àtom basat en la física clàssica, que està en línia amb el que ens dicta l'experiència i facilita la interiorització dels conceptes més importants per part de l'alumnat.



**Figura 3:** a) En el model atòmic de Thomson, l'àtom esta compost per electrons immersos en una esfera de càrrega positiva. b) Model de Rutherford amb neutrons: els electrons orbiten un nucli que concentra pràcticament la totalitat de la massa de l'àtom. Imatge dissenyada per Jcymc90 ([https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Atomo\\_de\\_Rutherford\\_con\\_neutrones.png](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Atomo_de_Rutherford_con_neutrones.png))

El següent pas en l'exposició d'aquesta unitat didàctica és la introducció de la idea de quantització a partir del model atòmic de Bohr. Postulat el 1913 per a l'àtom d'hidrogen, considera que el nombre d'òrbites electròniques estan fixades. La seva quantització permet racionalitzar l'origen dels espectres atòmics (Figura 4a). La incapacitat de predir el comportament d'àtoms polieletrònics serveix com a punt de partida per a ressaltar la inconsistència de models fenomenològics per explicar el comportament de la matèria a escala atòmica i la necessitat d'una descripció basada en la mecànica quàntica.



**Figura 4:** a) En el model atòmic de Bohr, cada òrbita té diferent energia i la transició dels electrons entre òrbites es dona per absorció o emissió de fotons, explicant l'origen dels espectres atòmics d'absorció i emissió. Imatge dissenyada per Pilaf~commonswiki ([https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Modelo\\_de\\_Bohr.png#filelinks](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Modelo_de_Bohr.png#filelinks)). b) En el model mecano-quàntic no es pot determinar amb exactitud la posició d'un electró. La probabilitat de trobar aquesta partícula en una determinada regió al voltant de nucli positiu està representada per un núvol de punts (major concentració de punts indica una major probabilitat).

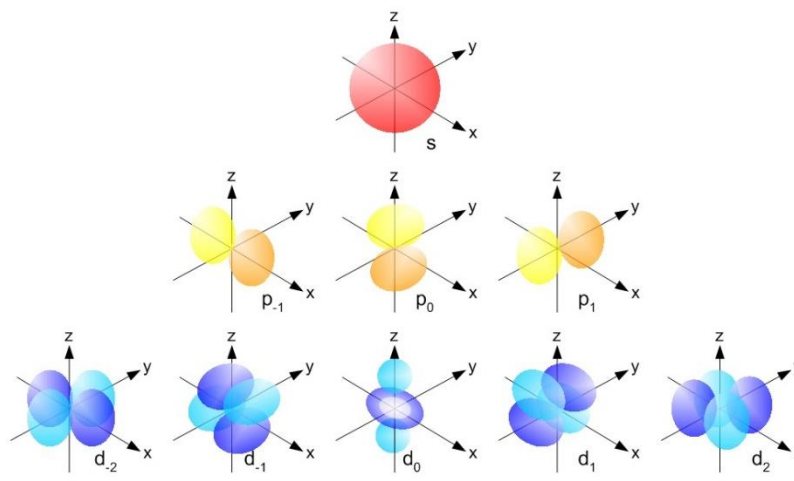
L'establiment del model mecànic-quàntic de l'àtom d'hidrogen parteix de la dualitat ona-corpuscle i el principi d'incertesa de Heisenberg, continguts que es treballen a partir de batxillerat. El primer afirma que totes les partícules poden presentar un comportament ondulatori. Es basa en la hipòtesis de Broglie, que considera que tot objecte amb massa en moviment té associada una longitud d'ona. Per altra banda, el principi de Heisenberg afirma que no és possible determinar de forma simultània i precisa la posició i la quantitat de moviment d'una partícula elemental. Un electró en una òrbita definida tindria una posició i velocitats definides en cada instant, fet que contradiu el principi d'incertesa. Així, la mecànica quàntica no pot parlar de posicions exactes de l'electró dins un àtom o molècula sinó de la probabilitat que l'electró estigui en una posició donada (Figura 4b).

La dualitat ona-corpuscle va portar el 1925 a Erwin Schrödinger a escriure una equació per l'ona associada de Broglie. L'anomenada funció d'ona  $\Psi$  és una expressió matemàtica que ens permet calcular on és més probable trobar un electró. D'acord amb la interpretació proposada pel físic alemany Max Born, la probabilitat de trobar un electró en una posició donada és proporcional al quadrat de la funció d'ona,  $\Psi^2$ , en aquesta posició.

Tant en el currículum d'ESO com en el batxillerat es parla del model mecanoquàntic de l'àtom. En aquest últim, la funció d'ona de l'electró juga un paper cabdal, esdevenint el pilar amb el qual es racionalitza el comportament dels electrons dins l'àtom. La funció d'ona d'un electró atòmic s'anomena *orbital atòmic* i es pot definir com la regió de l'espai en què hi ha una probabilitat de més del 90% de trobar-lo. L'àtom estan formats per capes electròniques concèntriques, on cadascuna engloba un determinat nombre d'orbitals. N'hi ha de diferents tipus segons la seva topologia, designats amb les lletres s, p, d, f, etc. (Figura 5). Com a conseqüència del principi d'exclusió de Pauli, cada orbital només pot contenir fins a dos electrons.

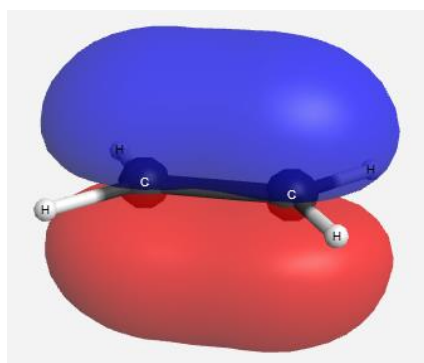
La distribució dels electrons al voltant del nucli, condicionada pel nombre i tipus d'orbitals on es col·loquen, determina el que es coneix com a configuració electrònica. És a partir d'aquest concepte que el model mecanoquàntic de l'àtom

justifica l'estructura de la taula periòdica i explica les propietats periòdiques dels elements i l'origen de l'enllaç químic.



**Figura 5:** Llistat dels orbitals s, p i d que s'obtenen de la resolució de l'equació de Schrödinger. Imatge extreta de <http://hudsonvalleygeologist.blogspot.com/2010/11/magnetite.html>

Una vegada l'alumnat coneix el model mecanoquàntic de l'àtom, el següent pas és explicar la formació de l'enllaç químic a través de la teoria de l'enllaç de valència (TEV). Aquesta és un model mecanoquàntic per racionalitzar la formació dels enllaços covalents a partir del solapament dels orbitals atòmics de la capa de valència dels àtoms (Figura 6). La simetria dels orbitals resultants de la combinació determina la multiplicitat d'enllaç. La combinació de la TEV i la teoria de repulsió de parells de electrons de la capa de valència (RPECV) s'utilitza per predir l'estructura més estable dels sistemes moleculars.



**Figura 6:** Solapament lateral d'orbitals p en la molècula d'etè ( $C_2H_4$ ) per donar lloc a un enllaç amb simetria  $\pi$ .

Els paràgrafs anteriors resumeixen els conceptes clau que es proporcionen sobre la l'estructura de l'àtom, l'enllaç químic i la seva relació amb la mecànica quàntica als instituts, així com els motius pels quals s'introdueixen als ensenyaments preuniversitaris. Aquests coneixements, tot i tenir un caràcter propedèutic, són suficients per iniciar-se en el modelatge computacional dels fenòmens químics des d'una perspectiva pràctica. A més, un estudi mostra que l'ús d'aquesta eina beneficia l'aprenentatge a tots els nivells, no només als alumnes amb altes capacitats (Dori i Kaberman, 2011).

No és necessari entendre els principis matemàtics de la mecànica quàntica per assolir els objectius d'aprenentatge. De fet, no considero convenient introduir-los, encara que sigui de manera simplista, perquè l'elevat grau d'abstracció complicaria l'aprenentatge dels conceptes més bàsics que s'especifiquen al currículum de FQ. L'únic nivell on es podria plantejar una possible ampliació de temari per incloure de forma qualitativa aquests continguts seria a segon de Batxillerat. No obstant, els temps limitats que disposen els estudiants per preparar la Prova d'Accés a la Universitat (PAU) no ho fa factible.

Ara bé, si que necessitem que el professorat tingui una comprensió més profunda sobre els fonaments físicomatemàtics del modelatge i una mínima instrucció pràctica per guiar a l'alumnat en el seu ús. A l'Annex I es proporciona una introducció qualitativa als fonaments de química quàntica dirigida tant pel professorat com per a l'alumnat de segon de batxillerat que estigui interessat.

### **3.4. La química computacional i la didàctica de la Química**

La química computacional és una branca del camp de la química teòrica que es basa en els postulats de la mecànica quàntica. Pretén racionalitzar el comportament dels compostos químics a escala atòmica i molecular mitjançant l'ús d'eines informàtiques. Modelant l'estructura molecular electrònica i nuclear dels sistemes estudiats utilitzant *software* específic, es pot determinar una gran varietat de propietats moleculars (geometries, paràmetres termodinàmics, freqüències vibracionals, distribucions de càrrega, etc.), entendre quines

interaccions intra- i intermoleculares condueixen a la unió entre àtoms i dilucidar els mecanismes de les reaccions químiques.

Els resultats de les simulacions computacionals són un bon complement per a interpretar les dades obtingudes al laboratori, però també permeten predir fenòmens químics inobservables, assistir el disseny de d'experiments o reduir el seu cost descartant determinades etapes en el procés de recerca. A més, ajuda a reduir l'impacte ambiental negatiu que genera l'ús de determinats reactius, catalitzadors i dissolvents.

Aquesta branca de la química és àmpliament utilitzada des de fa dècades no només en recerca sinó també en la indústria, especialment en el desenvolupament de compostos químics d'interès farmacèutic, biotecnològic o nous materials. El gran poder predictiu i explicatiu d'aquesta disciplina i els avanços en el camp de la computació han fet que el seu ús vagi a l'alça.

D'acord amb els paràgrafs anteriors, la química computacional pot esdevenir un gran aliat alhora d'ajudar als alumnes d'ESO i batxillerat a concebre conceptes teòrics inaccessibles a la pràctica, com són els orbitals, les geometries moleculars o els mecanismes de reacció. Existeixen algunes publicacions a revistes de química i treballs de recerca que evidencien el potencial pedagògic de la química computacional a nivell preuniversitari i fan propostes d'activitats per als alumnes. La formació en aquest camp també es pot convertir en una oportunitat per introduir als estudiants en el món de la recerca i, fins i tot, que puguin contribuir-hi. Tal és el cas de dos alumnes de batxillerat del col·legi Belllloc del Pla (Catalunya), que l'any 2016 van ser premiats per haver desenvolupat un treball de recerca basat en la investigació computacional de fàrmacs amb activitat anticancerígena. També s'han organitzat tallers per acostar la química computacional als alumnes de secundària.

L'ús de la química computacional com a eina d'aprenentatge a secundària només serà una realitat si el professorat té la formació adequada en aquest àmbit. És en aquest punt on la comunitat científica té la oportunitat de donar a conèixer aquesta disciplina i compartir els seus coneixements i recursos amb els

professorat de secundària. Una iniciativa en aquesta direcció és el projecte dirigit per Institut per a l'Alfabetització Química a través de la Ciència Computacional (ICLCS), institució americana que ofereix un curs de cinc anys per formar el professorat de secundària en química computacional. Busca reformar el currículum escolar per incloure aquesta disciplina a les aules. Una altra iniciativa per a introduir les ciències de la computació als instituts és la promoguda per l'organització no governamental americana "Code" juntament amb el projecte GUTS ("Glowing Up Thinking Scientifically"). Finalment, a nivell estatal podem destacar el curs "Introducció al Món de la Química Computacional", ofert l'any 2012 per l'Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC) de la Universitat de Girona. Dirigit al professorat d'ESO i Batxillerat, la formació estava impartida per investigadors de l'IQCC i es centrava en l'ús d'eines de visualització molecular. El curs buscava contribuir en la formació contínua i especialització del professorat de secundària i fer present la recerca en el dia a dia a les aules.

La introducció de la química computacional com una eina d'aprenentatge a les aules dels instituts pot transformar positivament la forma d'ensenyar aquesta assignatura (Mirats-Arce, 2016; Moreno, 2014). No obstant, a la literatura només s'han trobat quatre estudis sobre l'ús de tècniques computacionals a l'assignatura de Química a secundària més enllà dels visualitzadors moleculars i tots es focalitzen en uns pocs conceptes: dos en l'estudi de les geometries moleculars i els orbitals atòmics (Ochterski, 2014; Sarkar, 2011), un amb el càlcul de propietats termodinàmiques (Patiño Soriano, 2017) i un altre basat en la formació d'enllaços químics i les forces que intervenen (Zohar i Levy, 2018). És per aquest motiu que el present treball vol desenvolupar una proposta didàctica que tracti diversos continguts i suposi un pas més per a l'ús d'aquesta eina en el currículum de FQ.



## 4. DESENVOLUPAMENT DE LA PROPOSTA

El treball vol mostrar el potencial pedagògic de la química computacional a través de l'aprenentatge basat en models. Per evidenciar la seva efectivitat, primer de tot es definirà el context normatiu en què es troben els blocs de continguts sobre els quals aplicarem les eines computacionals. A continuació, es discutirà sobre el tipus de software que s'utilitzarà, la possibilitat d'accedir-hi des d'un institut, exemples pràctics i els objectius i competències clau que volem que l'alumnat assolixi. Finalment, es presentarà la metodologia de treball, les activitats que es plantegen i una discussió sobre l'efectivitat de la proposta.

### 4.1. Currículum de Física i Química

La proposta didàctica està emmarcada en els currículums de la matèria de Física i Química de 4rt ESO i de Batxillerat establerts en els decrets 34/2015 i 35/2015, de 15 de maig (BOIB núm. 73, de 16 de maig de 2015), respectivament. Els dos marcs legals especifiquen quines continguts i competències o habilitats s'espera que l'alumnat assolixi a través d'aquestes assignatures.

El primer decret indica que pels alumnes d'ESO: *“La matèria de física i química a secundària ha de servir els alumnes per explicar els fenòmens que tenen lloc a la natura, establir relacions entre ells i aplicar els coneixements i estratègies apresos a l'anàlisi i resolució de situacions o problemes plantejats. L'adquisició de coneixements (...) ha d'encuriosir els alumnes motivant-los a fer-se preguntes, cercar informació i plantejar-se nous reptes.”* Per altra banda, el decret sobre la matèria de FQ a Batxillerat remarca que: *“l'ensenyament d'aquesta matèria ha d'incentivar un aprenentatge contextualitzat (...) que potenciï l'argumentació verbal, la capacitat d'establir relacions quantitatives i espacials, així com la de resoldre problemes amb precisió i rigor. Ha de dotar els alumnes d'eines per explicar i no tan sols descriure els fenòmens naturals, dins un cos organitzat de coneixements interrelacionats basat en les lleis de la física i la química.”*

La modelització de sistemes o fenòmens químics mitjançant eines computacionals pot ajudar a assolir aquestes competències: posant a prova el

coneixements dels alumnes a través de l'anàlisi dels factors que determinen l'evolució del models i la relació existent amb les teories explicades a classe. A més, si es treballa en grup, la discussió dels resultats amb els companys i el professor incentivarà que utilitzin la terminologia adequada, aprenent a construir un discurs consistent sobre els processos que volen descriure.

Pel que fa als continguts, d'acord amb la discussió anterior es potenciaria l'aprenentatge dels continguts del bloc 1 ("L'ACTIVITAT CIENTÍFICA"). La química computacional també resulta idònia per estudiar els conceptes més abstractes que s'especifiquen en els bloc 2 ("LA MATÈRIA") del currículum de FQ d'ESO, com els orbitals atòmics i els tipus d'enllaç, i dels blocs 2 ("ORIGEN I EVOLUCIÓ DELS COMPONENTS DEL UNIVERS ESTRUCTURA DE LA MATÈRIA. L'ÀTOM, LA TAULA PERIÒDICA I L'ENLLAÇ QUÍMIC") i 3 ("REACCIONS QUÍMIQUES") del currículum de Química de 2on de Batxillerat, on es treballen els fenòmens quàntics i la seva relació amb el comportament i l'estructura de la matèria. És en aquest punts on es focalitzarà la proposta didàctica.

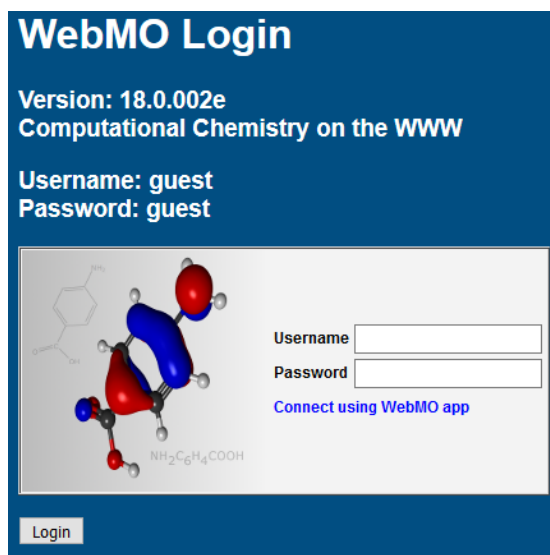
## 4.2. Programari de modelització

### 4.2.1. La interfície WebMO

L'aplicació d'aquest projecte implica tenir accés tant a programes de visualització molecular (exemples a l'apartat 3.2) com a software de química computacional per al càlcul de dades fisicoquímiques d'interès. Exemples de paquets de càlcul són *Gaussian*, *Molpro*, *Molcas*, *GAMESS*, *MOPAC*, *NWChem*, *Orca*, etc. Desafortunadament, la majoria d'aquests programes només es poden utilitzar si es disposa de les corresponents llicències, que poden arribar a preus inassolibles pels centres de secundària. Per exemple, si una institució acadèmica (universitat o centre de recerca) europea vol adquirir les llicències d'alguns dels programes més utilitzats actualment en el camp de la recerca química, com el visualitzador *Gaussview* o el paquet de càlcul *Gaussian*, ha de pagar fins a 2.875 dòlars per utilitzar-los en un ordinador més 1.150 dòlars per instal·lar-los en ordinadors addicionals. El preu ascendeix fins els 17.250 dòlars per organitzacions

comercials. A més, per estudiar processos químics que involucrin una gran quantitat d'àtoms es necessari utilitzar els clústers de càlcul que trobem a les universitats o als centres de supercomputació com el *Marenostrum* a Barcelona. Per tant, s'han de buscar alternatives econòmicament assequibles per introduir la química computacional a secundària.

El Centre Educatiu de Nord Carolina (EUA) en Ciències, Matemàtiques i Tecnologia, juntament amb el finançament de les organitzacions Gaussian Inc. i Burroughs Wellcome Fund, han creat una interfície gratuïta anomenada WebMO que permet l'accés des d'Internet als paquets de química d'última generació i llençar càlculs a supercomputadors de forma remota. La interfície WebMO es pot instal·lar als sistemes operatius Windows, Mac OS X i Linux / Unix però també s'hi pot accedir des de qualsevol navegador web, telèfon o tableta mitjançant l'aplicació per a iOS o Android. Estant disponibles tant versions de pagament com una de gratuïta. El servidor de química computacional de l'escola secundària de Nord Carolina ofereix un servei gratuït als professors i estudiants de l'estat de Carolina, però es pot utilitzar sense necessitat d'adquirir cap llicència ni residir als EUA accedint al sistema com a convidat ("guest") (Figura 7).

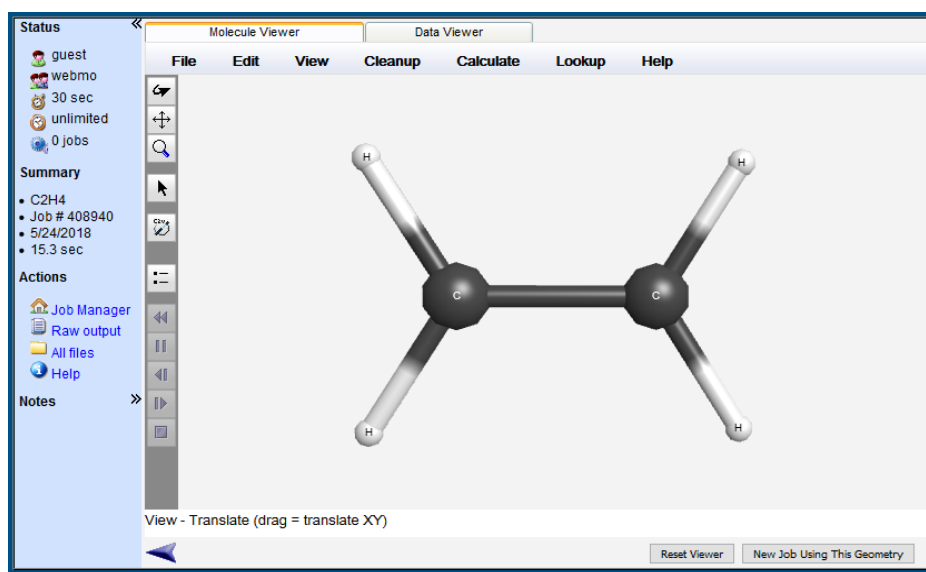


**Figura 7:** Portal web per accedir a la plataforma WebMO.

Els usuaris de WebMO poden construir i veure molècules en tres dimensions, visualitzar orbitals, calcular propietats químiques i buscar informació a bases de

dades externes, tot des del navegador web (Figura 8a). Els càlculs segueixen un sistema de cues: l'usuari prepara els fitxers amb els paràmetres que vol estudiar i els posa en cua per accedir al clúster. Els sistema estableix la prioritat per arrancar cada càlcul segons l'ordre d'enviament i mostra el temps que tarden en completar-se (Figura 8b). L'usuari pot analitzar els resultats una vegada finalitzats el càlculs.

a)



b)

**WebMO Job Manager**

Number	Name	Description	Date	Status	Time	Actions
<input type="checkbox"/>	408940	C2H4	Geometry Optimization - Gaussian	5/24/2018 11:59	Complete	15.3 sec
<input type="checkbox"/>	408938	C3H6O	Optimize + Vib Freq - Gamess	5/24/2018 11:47	Complete	35.0 sec
<input type="checkbox"/>	408937	C2H6O	Optimize + Vib Freq - Gamess	5/24/2018 11:45	Complete	14.1 sec
<input type="checkbox"/>	408934	C5H5N5	Geometry Optimization - Mopac	5/24/2018 10:10	Complete	2.0 sec
<input type="checkbox"/>	408933	C3H6O	Geometry Optimization - Mopac	5/24/2018 10:09	Complete	3.3 sec
<input type="checkbox"/>	408932	C2H4	Molecular Orbitals - PSI4	5/24/2018 8:32	Complete	1.0 sec
<input type="checkbox"/>	408931	H3N	Molecular Energy - Gamess	5/24/2018 8:24	Complete	0.0 sec
<input type="checkbox"/>	408930	H3N	Geometry Optimization - Gamess	5/24/2018 8:24	Complete	0.2 sec
<input type="checkbox"/>	408929	H3N	Geometry Optimization - Gamess	5/24/2018 8:24	Complete	0.2 sec

**Figura 8:** a) Representació d'una molècula d'etè ( $C_2H_4$ ) amb el visualitzador molecular de la interfície WebMO. b) Sistema de cues per a gestionar l'ordre d'execució dels càlculs. Per a cada estudi (distribuïts en files), el sistema indica la següent informació (d'esquerra a dreta): el nom, el tipus de càlcul, la data d'execució, si s'ha completat, el temps que ha tardat i la icona en forma de lupa, que permet veure els resultats.

Els serveis i el temps de càlcul que ofereix la versió gratuïta de WebMO són limitats (només dos càlculs simultanis per a tot el servidor, d'una durada de 30 segons cadascun). No obstant, pel propòsit d'aquest treball són suficients, perquè es possible il·lustrar els conceptes a ensenyar a través de càlculs sobre sistemes químics de dimensions reduïdes o només utilitzant el visualitzador molecular.

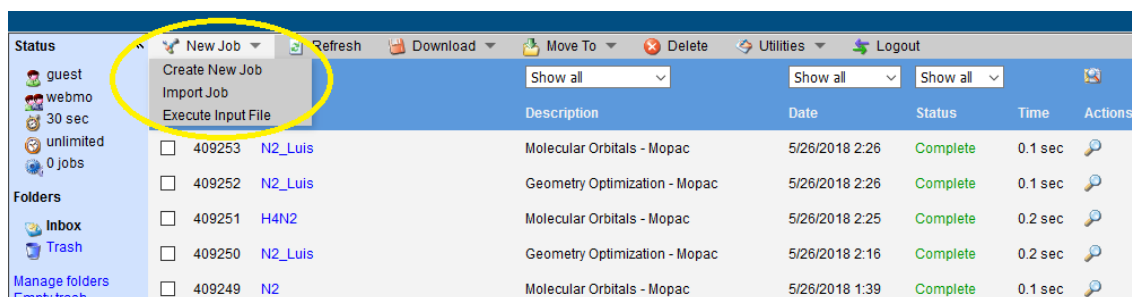
La interfície està especialment recomanada per a centres de secundària, perquè elimina el problema que suposa el cost de les llicències del programari i l'adquisició i manteniment d'un clúster de càlcul. Per tant, aquest projecte proposa l'ús de la plataforma WebMO per introduir la química computacional com a eina per a l'aprenentatge a les aules dels instituts.

#### 4.2.2. Instruccions d'ús i exemples pràctics

En aquest apartat es donen instruccions per emprar de la plataforma WebMO a través d'exemples de càlculs que mostren el seu potencial alhora d'explicar alguns dels continguts del currículum d'ESO i Batxillerat.

##### a) Procediment per dibuixar estructures moleculars:

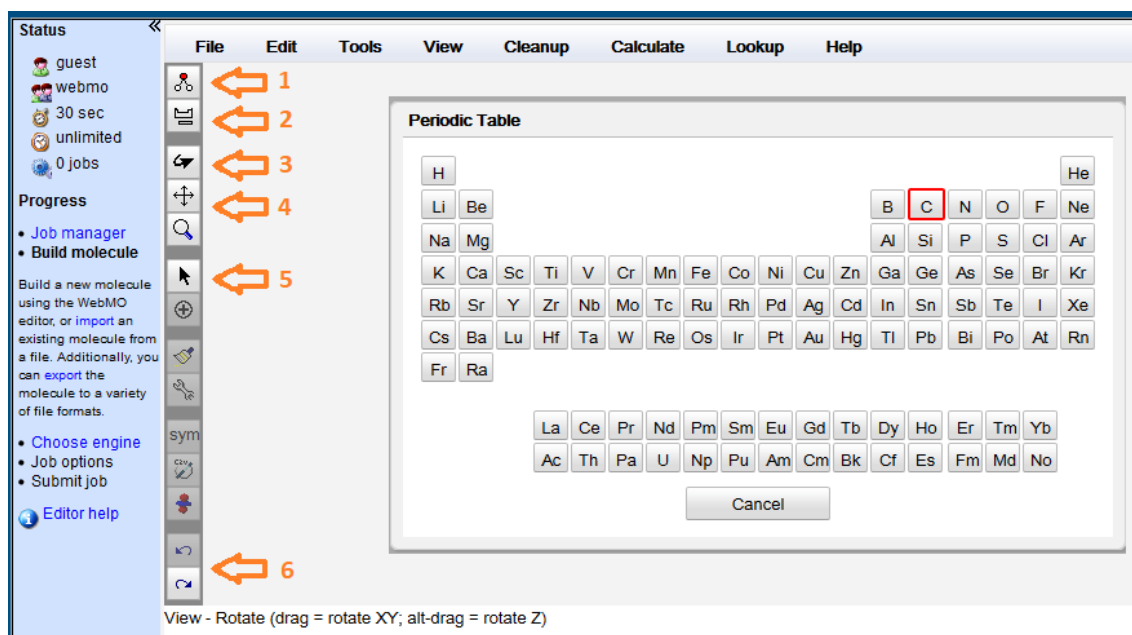
1. Inicieu sessió a la interfície WebMO com a convidat ("guest"). (<https://www.webmo.net/demoserver/cgi-bin/webmo/login.cgi>). S'obrirà una finestra on es mostra el sistema de cues: llistat de tots els càlculs que s'han llençat o estan corrent en el moment d'iniciar la sessió per part d'altres usuaris (Figura 8b).
2. Per crear un fitxer de treball clica el desplegable "New Job" a la cantonada superior esquerra de la pantalla i selecciona l'opció "Create New Job" (Figura 9).



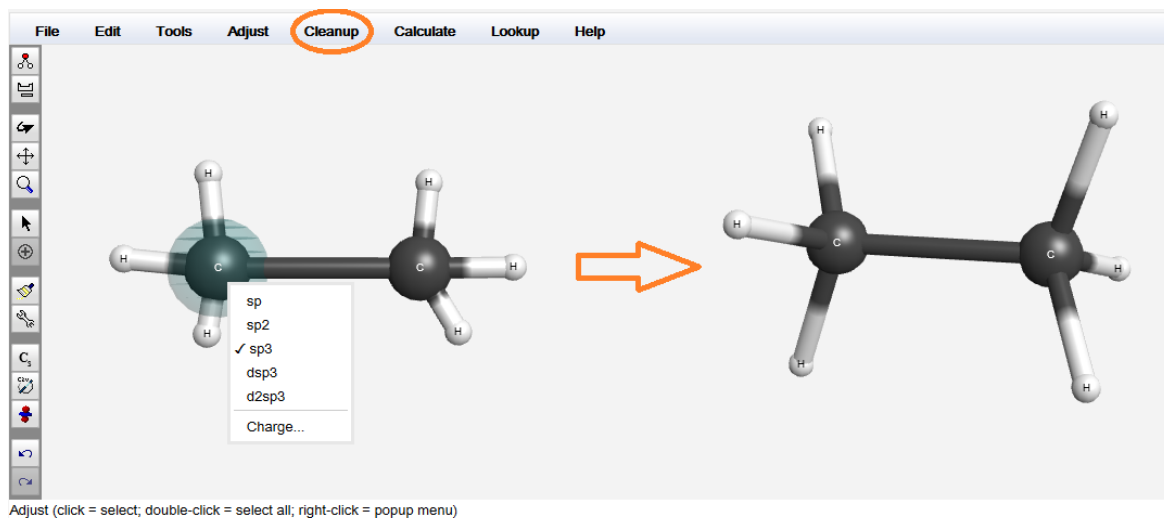
**Figura 9:** Finestra principal de la interfície WebMO, on s'indica com crear un fitxer de treball.

3. A continuació s'obre la finestra de dibuix (Figura 10a). A la barra vertical esquerra trobem un conjunt d'icones que ens ajudaran a dibuixar i moure en l'espai les estructures 3D. La icona etiquetada amb el nombre 1 està activada i permet representar àtoms (per defecte, de carboni) al quadre de dibuix. Si es volen incloure altres àtoms, la icona 2 obre una segona finestra amb la taula periòdica per seleccionar l'element desitjat. El tercer botó s'utilitza per girar la molècula per observar-la des de diferents perspectives mentre que el quart s'utilitza per desplaçar les estructures al llarg del quadre de dibuix. Es pot ampliar o disminuir la mida de la imatge amb la icona en forma de lupa. Finalment, clicant els icones marcats amb el nombre 6 es poden refer o desfer el canvis aplicats sobre l'estructura molecular.

a)



b)



**Figura 10:** a) Quadre de dibuix amb les icones més rellevants assenyalades. La taula periòdica apareix per pantalla quan es clica la icona 2. b) Dibuix d'una molècula d'età (C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>), definint el tipus d'hibridació i les carregues de cada àtom, i el posterior ajustament de les distàncies i angles d'enllaç.

Per dibuixar una molècula seguirem els passos següents: Primer es clica el botó esquerra del ratolí sobre el quadre de dibuix per generar un àtom. A continuació, mantenint el botó esquerra clicat sobre l'àtom anterior, s'arrasta el cursor en la

direcció desitjada per a generar un segon àtom enllaçat al primer. Si aquesta acció es va repetint utilitzant àtoms diferents es pot construir qualsevol molècula. A la Figura 10b es mostra la construcció d'una molècula d'età. Com es pot observar a la imatge, la geometria obtinguda manualment està molt distorsionada. Per obtenir una bona aproximació de les distàncies i angles d'enllaç esperats per aquesta molècula, és possible definir el tipus d'hibridació dels àtoms de carboni (en aquest cas,  $sp^3$ ) que determinarà la multiplicitat correcta de l'enllaç C-C. També es pot d'indicar la carrega elèctrica neta sobre cada àtom, que en el cas de l'età és zero. Clicant amb el botó dret del ratolí sobre els àtoms apareix un desplegable que permet definir aquests paràmetres. Finalment, per ajustar les distàncies i angles d'enllaç d'acord amb els paràmetres anteriors s'ha de clicar l'opció "Cleanup" del menú superior i a continuació "Comprehensive - Idealized". Els sistema parteix de valors de distàncies i angles esperats tabulats en una base de dades per obtenir una aproximació de l'estructura de l'età.

b) Optimització de la geometria molecular i càlcul de propietats:

Per calcular les propietats d'un sistema químic és necessari conèixer la seva funció d'ona. Aquesta es pot generar determinant la distribució dels electrons que minimitza l'energia del sistema. Ara bé, per trobar la geometria més estable d'un compost també hem de conèixer quines són les posicions nuclears més afavorides. L'estructura més favorable s'obté a partir d'un càlcul d'optimització (mirar Annex I).

La Figura 11a il·lustra els passos a seguir per optimitzar una molècula de fluorur d'hidrogen (HF) i obtenir el moment dipolar de la molècula, la distribució de càrregues dins la molècula, paràmetres termodinàmics i la freqüència de vibració de l'enllaç H-F. Primer de tot, comencem dibuixant la molècula de HF seguint el procediment descrit a l'apartat anterior i llavors cliquem la fletxa que apareix a la cantonada dreta inferior. A continuació apareix una nova pantalla on ens demana quin programa de càlcul volem utilitzar (en aquesta proposta utilitzarem el *Gaussian*). Llavors tornem a clicar la fletxa de la cantonada dreta i anem cap una tercera pantalla, on ens demana quin tipus de càlcul volem fer. Per optimitzar i



calcular la freqüència de vibració de l'enllaç H-F hem d'obrir el desplegable de l'apartat "Calculations" i seleccionar l'opció "Optimize + Vib freq", sense modificar cap altra apartat. Fem el darrer clic a la fletxa de la cantonada dreta i la plataforma ens enviarà de nou cap al sistema de cues. A l'apartat de "Status" veurem que el nostre càlcul s'ha executat ("Running"). Una vegada hagi finalitzat ("Complete") hem de clicar a la icona en forma de lupa per veure els resultats. Pot aparèixer la paraula "Failed" si el càlcul no a finalitzat correctament o requereix més de 30 segons per completar-se.

Sota el quadre de dibuix apareixen els resultats distribuïts en diferents categories (Figura 11b). A l'apartat "Overview" trobem, entre altra informació, els valors de l'entalpia i entropies de formació del compost (1 Hartree = 627,51 kcal/mol) i el moment dipolar (expressat en Debye). A la secció "Partial Charges" tenim les càrregues parcials (anomenades càrregues de Mulliken) que es generen a l'interior del HF degut a la diferència d'electronegativitat entre els dos elements (1 unitat atòmica de càrrega equival a  $1,6 \cdot 10^{-19}$  C). Finalment, a "Vibrational modes" es mostra el valor de la freqüència de vibració de l'enllaç H-F en  $\text{cm}^{-1}$ . Per saber si l'estructura obtinguda és realment un mínim d'energia (és a dir, si els àtoms estant a la distància d'equilibri), totes les freqüències vibracionals han de ser positives. La distribució de càrregues i vector moment dipolar es poden visualitzar clicant les icones en forma de lupa de cada secció, mentre que per la freqüència vibracional ens mostra els vectors de desplaçament dels àtoms. Si cliquem la icona en forma de pel·lícula fotogràfica de la secció "Vibrational modes" es genera una animació del moviment nuclear associat a cada freqüència vibracional.

a)

The screenshot illustrates the workflow for optimizing a molecule of HF. It shows the selection of the Gaussian engine, the configuration of job options (Job Name: HF, Calculation: Optimize + Vib Freq, Theory: Hartree-Fock, Basis Set: Routine: 6-31G(d)), and the resulting job status table.

Engine	Description
<input type="radio"/> Gamess	Ab initio and semi-empirical calculations
<input checked="" type="radio"/> Gaussian	Ab initio and semi-empirical calculations
<input type="radio"/> Molpro	Ab initio calculations
<input type="radio"/> Mopac	Semi-empirical calculations
<input type="radio"/> NWChem	Ab initio calculations
<input type="radio"/> ORCA	Ab initio calculations
<input type="radio"/> PS4	Ab initio calculations
<input type="radio"/> Quantum Espresso	Periodic plane wave DFT
<input type="radio"/> QChem	Ab initio calculations
<input type="radio"/> Tinker	Molecular mechanics calculations

Job Name	Calculation	Theory	Basis Set	Charge	Multiplicity
HF	Optimize + Vib Freq	Hartree-Fock	Routine: 6-31G(d)	0	Singlet

Description	Date	Status	Time	Actions
Optimize + Vib Freq - Gaussian	5/26/2018 9:22	Running	0.0 sec	

b)

The screenshot displays the results of the HF optimization. The Overview section provides thermodynamic data, and the Partial Charges section shows the distribution of charges on the atoms. The Dipole Moment is highlighted as 1.9720 Debye.

Quantity	Value
Route	#N HF/6-31G(d) OPT FREQ Geom=Connectivity
Stoichiometry	FH
Symmetry	C <sup>v</sup>
Basis	6-31G(d)
RHF Energy	-100.002906984 Hartree
ZPE	0.009926 Hartree
Conditions	298.150K, 1.00000 atm
Internal Energy	-99.990620 Hartree
Enthalpy	-99.989676 Hartree
Free Energy	-100.009364 Hartree
C <sub>v</sub>	4.968 cal/mol-K
Entropy	41.437 cal/mol-K
Dipole Moment	1.9720 Debye
Server	buchner.chem.hope.edu (26796)
CPU time	4.9 sec

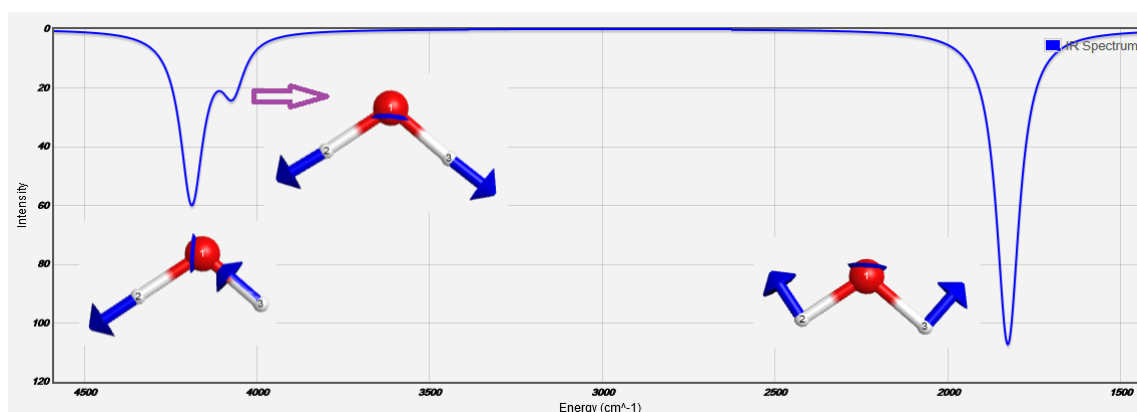
Atom	Symbol	Charge
1	F	-0.516713
2	H	0.516713

Mode	Symmetry	Frequency (cm <sup>-1</sup> )	IR (Raman) Intensity	Actions
1	SG	4357.1959	141.4601(31.0948)	

**Figura 11:** a) Procediment per optimitzar una molècula de HF i visualitzar els resultats. b) Resultats del càlcul anterior juntament amb la representació gràfica de la distribució de carregues parcials i el vector moment dipolar.

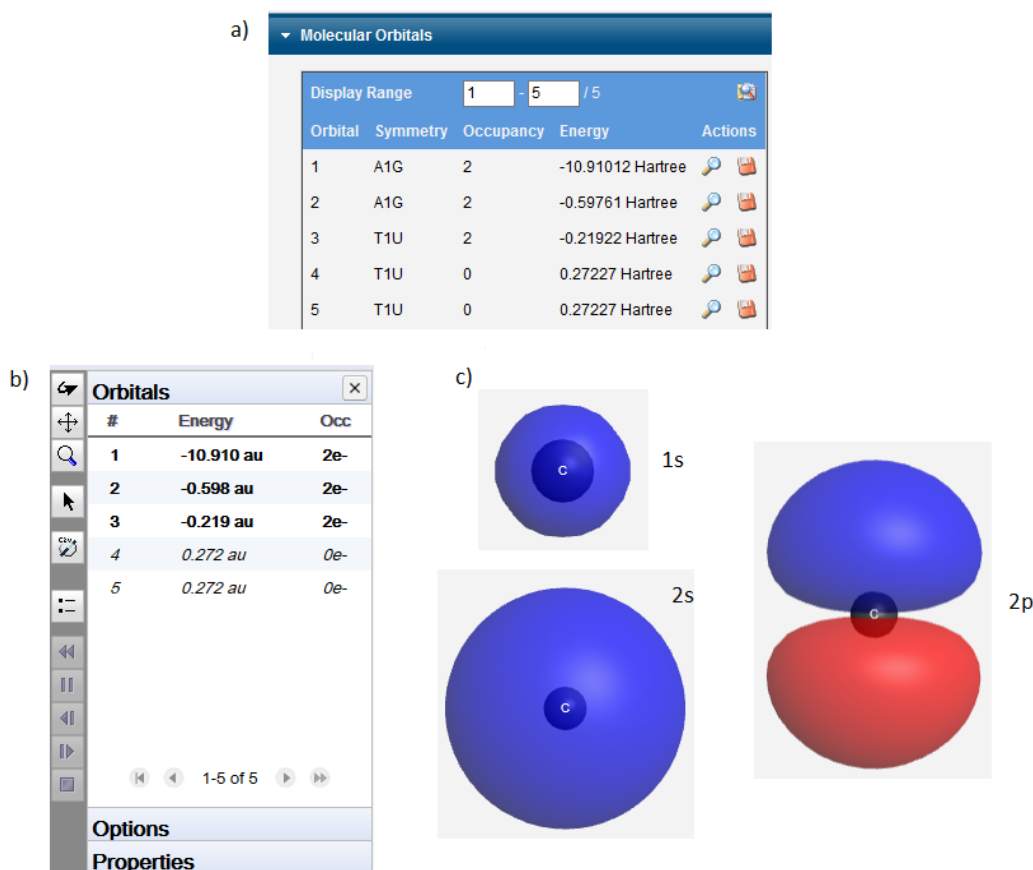
Com a incís, remarcar que el programa també dóna la opció de representar l'espectre infraroig (IR) teòric d'una molècula. Aquest tipus d'espectres s'utilitzen per a determinar a nivell experimental la composició d'una substància a partir de les senyals característiques del moviment vibracional al voltant dels enllaços químics que la formen després ser irradiada amb radiació infraroig. En el currículum de Química de segon de batxillerat s'introdueix aquesta tècnica, i la plataforma WebMO pot assistir el professor en la seva explicació. A la Figura 12 es mostra l'espectre IR teòric d'una molècula d'aigua. Cada pic de l'espectre correspon a un dels tres modes normals de vibració de l'H<sub>2</sub>O: dos que impliquen l'estirament simètric i asimètric dels enllaços O-H i un relacionat amb el canvi de l'angle H-O-H.



**Figura 12:** Espectre IR teòric de la molècula d'aigua.

### c) Representació dels orbitals atòmics:

Dibuixar un àtom i seguir els passos anteriors fins arribar a la pestanya on ens demana el tipus de càlcul a practicar. Llavors, al desplegable "Calculations" seleccionem l'opció "Molecular orbitals" i a "Basis Set" l'opció "STO-3G". Aquest últim paràmetre provoca que els electrons ocupin orbitals de tipus hidrogenoide. Una vegada finalitzat el càlcul, accedim als resultat i anem a la pestanya "Molecular Orbitals", que conté els orbitals calculats (Figura 13a). Clicant la icona lupa de qualsevol dels orbitals apareix una llista dels mateixos ordenats de menor a major energia (1 unitat atòmica (au) d'energia equival a 1 Hartree), amb la seva ocupació electrònica (Figura 13b). Finalment, es pot visualitzar la topologia de cada orbital clicant sobre cadascun (Figura 13c).



**Figura 13:** Energia, ocupació i topologia dels orbitals d'un àtom de carboni en el seu estat fonamental.

Les activitats que es plantegen en aquesta proposta didàctica busquen simplificar l'aprenentatge d'alguns dels conceptes més abstractes de la química. Posar en pràctica el càlcul de freqüències vibracional i les optimitzacions podria suscitar als alumnes preguntes de caire teòric que no es podrien respondre fàcilment en una aula de secundària i complicarien el seu aprenentatge. Per aquest motiu, les activitats estaran relacionades únicament amb els conceptes que es treballen directament al currículum de FQ i que no requereixen un estudi quantitatiu del moviment nuclear, com són la predicció de les estructures moleculars a partir de la TEV, l'origen de la polaritat del enllaços químics o el significat dels orbitals atòmics.

### 4.3. Objectius de la proposta

La proposta didàctica busca motivar i fer protagonista a l'alumnat de 4rt ESO i Batxillerat del seu aprenentatge. Per aquest motiu, s'introduirà la modelització de sistemes químics amb l'objectiu que les eines computacionals reforcin la comprensió dels continguts curriculars que presenten major dificultat conceptual.

La proposta es centrarà en consolidar l'aprenentatge del model atòmic actual i entendre la naturalesa de l'enllaç químic a través de la TEV. A continuació es classifiquen els objectius curriculars segons al nivell a on van dirigides:

a) Classe de 4rt ESO de Física i Química:

- Relacionar el concepte "d'orbital atòmic" i la distribució dels electrons a l'escorça atòmica.

b) Classe de segon de batxillerat de Química:

- Predir i explicar la geometria molecular a partir de la TEV i el concepte d'hibridació.
- Relacionar la geometria d'una molècula amb la seva polaritat i conèixer quins tipus de forces intermoleculares es poden establir.
- Analitzar la relació entre la distribució de càrrega d'una molècula i l'electronegativitat dels elements que la configuren.

En tots dos casos, també es busca que es familiaritzin amb els procediments per investigar en ciència: reflexionar sobre els sistemes que analitzaran, contrastant les característiques observades amb allò que descriuen els teories científiques, i fer prediccions a partir dels models elaborats.

### 4.4. Competències clau

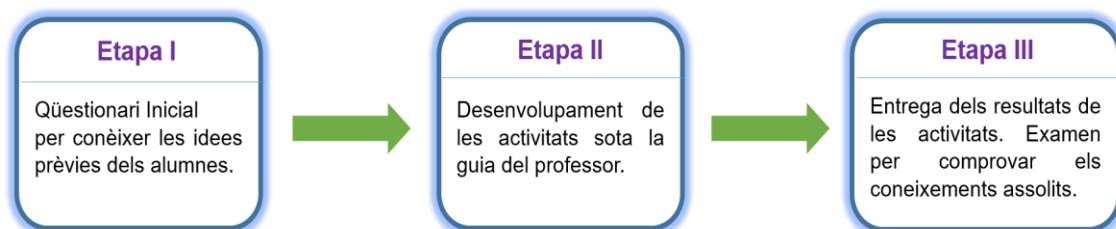
Les contribucions de la proposta a l'assoliment de les competències clau (establertes al Reial Decret 1105/2014, BOE del 26 de desembre) són:

- a) Competència lingüística: Adquisició de la terminologia específica de la química per expressar idees i descriure els fenòmens.
- b) Competència en ciència i tecnologia i Competència matemàtica: Aplicar els coneixements científics per explicar l'estructura, propietats i reactivitat de la matèria.
- c) Competència digital: Ús de programes de modelització per a extreure i analitzar la informació més important d'un sistema o fenomen químic.
- d) Competència d'aprendre a aprendre: Fomentant l'aprenentatge autònom a través de les activitats de modelització.

#### 4.5. Metodologia

La proposta didàctica vol que l'alumnat esdevingui el protagonista del seu aprenentatge, a través del treball autònom i col·laborant amb el companys de classe per assolir els objectius establerts. Per aconseguir-ho, la proposta es desenvolupa en tres etapes (Figura 14).

A l'apartat 3.1 s'han mencionat les dificultats de comprensió e interpretació que tenen els estudiants sobre els models curriculars. La metodologia docent s'ha d'ajustar als coneixements previs per corregir de forma efectiva els errors conceptuals i aconseguir un aprenentatge significatiu. Per tant, la primera etapa de la proposta didàctica consistirà en un qüestionari inicial sobre els coneixements previs de la matèria per a cada nivell (Annex II).



**Figura 14:** Etapes de la proposta didàctica.

A continuació, durant la segona etapa es procediria a realitzar les activitats de modelització de forma cooperativa. Els estudiants de 4rt ESO de ciències acadèmiques centrarien els seus esforços en consolidar l'aprenentatge del concepte d'orbital atòmic i la seva relació amb la distribució dels electrons dins un àtom, continguts emmarcats en bloc 2 ("LA MATÈRIA") del currículum de FQ d'ESO. Pel que fa a Química de segon de batxillerat, la tasca tractaria sobre la predicció de la geometria molecular, la polaritat i les forces intermoleculares. Tots aquests conceptes s'hauran introduït a l'inici de la corresponent unitat didàctica a través de classes magistrals. Els alumnes rebrien guions de treball on es repassa tot la teoria, especificant els objectius dels projectes, les preguntes a respondre, pautes per presentar els resultats i un manual d'ús de WebMO (Annexos III i IV). El motiu d'aquestes activitats no és simplement posar en pràctica allò après a classe sinó que, a través de la pràctica, el professorat pugui guiar als alumnes a través d'un aprenentatge per descobriment. Per tant, algunes classes convencionals serien substituïdes per classes a l'aula d'informàtica on la teoria i la pràctica es desenvoluparien de forma simultània. La Química computacional pot convertir-se una eina per a conduir les classes i la seva pràctica no hauria de suposar una limitació del temps disponible durant el curs acadèmic per completar el currículum de Química. Finalment, el procés d'avaluació conclouria amb l'entrega dels informes i la realització d'un examen final.

A més de fer comprensibles conceptes abstractes i ajustar les idees que tenen sobre els models científics, la proposta permet conèixer una altra forma de fer Química més enllà de la pràctica experimental i acostar als estudiants a la recerca científica.

#### 4.5.1. Organització i temporització

La proposta didàctica està dividida en 4 sessions. Cadascuna té una durada d'entre 1 i 3 hores lectives aproximadament i estant dividides en diferents tasques. Les Taules 1 i 2 mostren quantes sessions es requereixen per completar cada etapa, els tipus de tasques, la seva duració i l'agrupació de l'alumnat per cada nivell.

La temporització de les sessions per cada curs és similar: La primera es centra exclusivament en recollir les idees prèvies de l'alumnat a través del qüestionari inicial. A la segona s'introdueix l'ús de la plataforma WebMO i es desenvolupen les activitats de modelització. Durant la tercera sessió es discuteixen els resultats amb el grup classe. Finalment, la última sessió està reservada per a realitzar l'examen final de cada unitat didàctica.

La segona sessió es farà en una aula d'informàtica i les activitats es realitzarien en grups de 2 o 3 alumnes. En els centres de secundària les aules d'informàtica solen tenir una capacitat màxima de 20 alumnes. Si el nombre és superior a 20 es recomana dividir la classe en dos grups i assignar un professor a cadascun d'ells. Llavors, mentre un dels grups realitza el treball a l'aula d'informàtica l'altra assisteix a una classe magistral sobre altres continguts de l'assignatura de Física i Química. El desdoblament també es pot acordar amb un professor d'una altre àrea. En qualsevol cas, s'hauria d'informar al cap de departament o al d'estudis abans de l'inici de curs.

**Taula 1:** Temporització de la proposta didàctica per a 4rt ESO, on s'indica l'agrupació de l'alumnat.

4rt ESO				
Etapa	Sessió	Tasca	Duració	Agrupació
I	1	Qüestionari Inicial	20 min.	Individual
		Discussió	35 min.	Grup-classe
II	2	Ús plataforma WebMO	30 min.	Grup-classe
		Activitat: Modelització d'orbitals atòmics	80 min.	Grups reduïts
	3	Discussió dels resultats	55 min.	Grup-classe
III	4	Examen final	55 min.	Individual



**Taula 2:** Temporització de la proposta didàctica per a segons de batxillerat, on s'indica l'agrupació de l'alumnat.

SEGON DE BATXILLERAT				
Etapa	Sessió	Tasca	Duració	Agrupació
I	1	Qüestionari Inicial	15 min.	Individual
		Discussió	40 min.	Grup-classe
II	2	Ús plataforma WebMO	55 min.	Grup-classe
		Activitat 1: Modelització estructures moleculars	75 min.	Grups reduïts
		Activitat 2: Anàlisi de la polaritat	35 min.	Grups reduïts
	3	Discussió dels resultats	55 min.	Grup-classe
III	4	Examen final	55 min.	Individual

En el següents apartats es discutirà en detall cadascuna de les sessions.

#### 4.5.2. Descripció de les tasques

- Sessió 1: Reconeixement de les idees prèvies

Realització individual a mà d'un qüestionari inicial per conèixer les idees prèvies de l'alumnat referents als models de l'àtom, l'estructura molecular i la naturalesa i formació dels enllaços químics (Annex II). La classe es desenvoluparia en una aula ordinària. L'objectiu és detectar quin grau de comprensió han assolit sobre aquests conceptes per identificar els punts que més s'han de treballar durant les activitats.

Després de finalitzar el test el professor animarà a l'alumnat a discutir conjuntament les solucions. L'experiència del pràcticum m'ha mostrat l'efectivitat que té aquesta metodologia per ajudar als alumnes a autoavaluar-se, a detectar aquells punts que no havien après correctament i corregir-los. Les analogies i la visualització d'animacions o models computacionals per exemplificar les explicacions poden ajudar a crear una imatge mental adequada dels conceptes estudiats.

Una vegada acabada la discussió, el professor explicaria que en les successives sessions faran unes activitats en grups a l'aula d'informàtica. L'alumnat rebria un guió amb una descripció de les tasques, i se'ls demanaria que llegeixin la introducció teòrica que contenen abans de començar les tasques de modelització.

- Sessió 2: Ús de la plataforma WebMO i activitats de modelització

La segona sessió es donarà en una aula d'informàtica. Durant la primera classe el professor explicarà el funcionament de la plataforma WebMO i posarà exemples pràctics adequats a cada nivell, similars als descrits a l'apartat 4.2.2. Els estudiants podran invertir el temps restant per familiaritzar-se amb l'aplicació, demanar els dubtes que tinguin i repartir-se la feina entre els membres del grup.

A partir de la segona classe el nombre i tipus de tasques dependrà del curs on van dirigides:

- a) Grup de 4rt ESO:

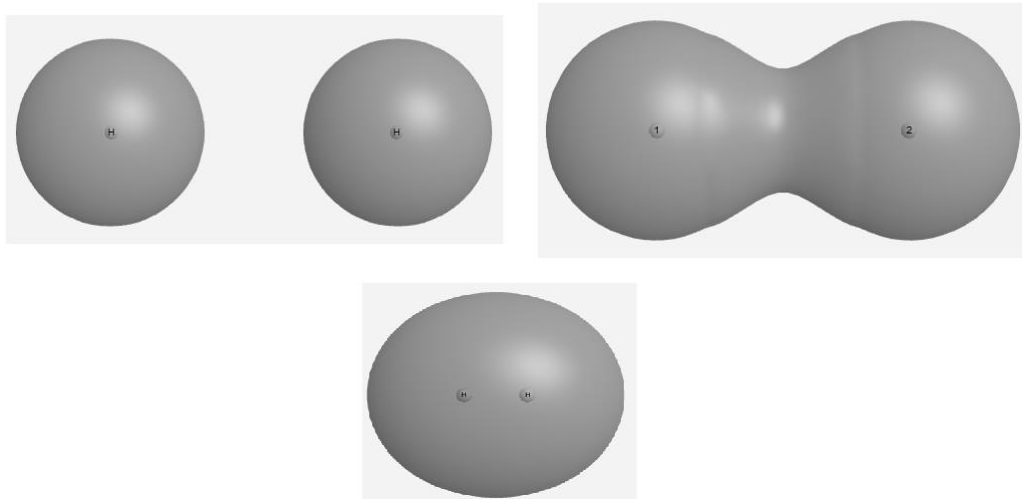
Els estudiants dedicaran dues hores de classe a modelar els orbitals d'una sèrie d'àtoms a través de la interfície WebMO (Annex III). A partir de la seva energia i ocupació deduiran teòricament la configuració electrònica de cada element sense recórrer al diagrama de Möeller.

L'informe del projecte conté una sèrie de preguntes que busquen guiar l'alumne en el seu aprenentatge, indicant quin tipus d'informació han d'extreure. Tot i que el treball és en grup, els alumnes s'haurien de repartir els àtoms a estudiar i posar en comú les dades obtingudes. Interessa que es qüestionin els resultats i debatin

les possibles interpretacions. El professor coneixerà les mancances curriculars que tenen gràcies al qüestionari inicial i podrà adaptar les seves explicacions alhora de resoldre els dubtes.

A través de la selecció de la informació més rellevant i la posterior reflexió, l'alumnat podrà crear una imatge correcta de l'àtom d'acord amb el model mecanoquàntic. La topologia dels orbitals i la seva ordenació energètica contribuiran a eliminar la imatge errònia que proporcionen els models d'ensenyament o els híbrids (per exemple, invalidant el concepte d'òrbita o la imatge d'un electró com si fos una pilota) i visualitzar l'estructura de capes de l'àtom. Estaran experimentant amb un fenomen inaccessible des del laboratori, fet que facilitarà la seva comprensió. A més a més, el propi alumnat, sota la supervisió del professor, comprovarà perquè els electrons es distribueixen segons el diagrama de Möeller seguint un procés similar al mètode científic.

En paral·lel al treball dels alumnes, i només si es disposa de temps suficient, el professorat pot emfatitzar el caràcter deslocalitzat de la càrrega electrònica en base al caràcter probabilístic del model mecanoquàntic i mostrar un exemple pràctic de formació d'un enllaç covalent (Figura 15). D'aquesta manera, es corregiria la concepció clàssica que es proporciona a 4rt ESO sobre el mecanisme de formació de l'enllaç químic (per compartició, donació o acceptació d'electrons com si fossin partícules rodones). En el cas de la molècula de  $H_2$ , els alumnes més avantatjats fins i tot podrien veure la relació existent entre la formació de l'enllaç H-H i la unió entre els orbitals de valència 1s.



**Figura 15:** Formació d'un enllaç covalent simple entre dos àtoms de hidrogen. A mesura que els dos àtoms s'acosten, els electrons de valència es senten atrets simultàniament pels dos nuclis provocant que la densitat electrònica es concentri a la regió compresa entre el dos H.

b) Grup de segon de Batxillerat:

El projecte es focalitzarà en la modelització de la geometria de diverses molècules a través de la interfície WebMO (Annex IV). Tal com s'ha indicat a l'activitat anterior, els alumnes també rebran un informe del projecte amb una sèrie de preguntes guia i instruccions sobre com han de presentar els resultats. Els membres de cada grup s'haurien de repartir les molècules a estudiar i posteriorment discutir de forma conjunta els resultats. El professor resoldrà els dubtes que sorgeixin considerant les idees prèvies que es desprenen del qüestionari inicial i, quan sigui convenient, proporcionant material addicional. El projecte es dividirà en dues activitats d'una hora:

- Activitat 1:

A la primera classe l'alumnat utilitzarà el visualitzador molecular per establir l'estructura d'una sèrie de compostos i explicar el seu origen a través de la TEV. Haurà de determinar la hibridació dels orbitals atòmics de cada compost per justificar el tipus d'enllaç (simple, doble o triple), la orientació dels mateixos en una molècula i el tipus de solapament que experimenten (simetria  $\sigma$  o  $\pi$ ). Llavors, mitjançant les estructures 3D i l'anàlisi dels híbrids poden predir com estant distribuïts els parells d'electrons i les possibles repulsions que experimenten,

justificant així les geometries moleculars. La primera activitat els permetrà connectar les regles i prediccions del model empíric de la teoria de repulsió de parells de electrons de la capa de valència amb la TEV.

- Activitat 2:

A la segona classe calcularan el vector moment dipolar total dels compostos i, a través de la distribució de càrregues dins la molècula, justificaran la seva direccionalitat. La distribució asimètrica de càrregues els ajudarà a fer-se una imatge mental del concepte d'electronegativitat, relacionant el flux d'electrons entre àtoms amb la polaritat dels enllaços. Es relacionarà el moment dipolar amb l'existència de forces intermoleculars.

El docent ha remarcar el paper que juguen les forces electrostàtiques i el canvis energètics en el procés de formació de l'enllaç químic, per eliminar la visió basada amb la "necessitat" dels àtoms a completar l'octet. Aquesta activitat no només busca crear una imatge més precisa sobre l'enllaç químic, sinó també connectar els fenòmens microscòpics amb el món macroscòpic a través de les forces intermoleculars.

• Sessió 3: Discussió dels resultats

Una vegada finalitzades les tasques, en els dos nivells es dedicarà una sessió d'una hora a discutir conjuntament els resultats i aclarir tots aquells punts de la teoria que no s'acaben de comprendre. El professor demanarà a l'alumnat que expliqui com justifiquen els resultats obtinguts i buscarà com corregir els errors conceptuals i de vocabulari.

L'autoavaluació de l'alumne és clau per ajudar-lo a consolidar el seu aprenentatge. Així, durant la sessió també es mostraran de nou les preguntes del qüestionari inicial perquè els alumnes vegin com han canviat les seves respostes. També s'indicaran quins són els conceptes clau que han de conèixer per realitzar la prova final.

- Sessió 4: Examen final

Al final de cada unitat didàctica es farà un examen per a determinar els coneixements adquirits pels alumnes.

#### 4.5.3. Avaluació de l'alumnat

Les activitats de modelització no només consoliden l'aprenentatge dels conceptes o models més complexos sinó que també fomenten el pensament crític i el treball cooperatiu. L'adquisició de competències diferents de la científica i tecnològica, com la d'aprendre a aprendre, són molt importants per a progressar tant a nivell professional com personal. Per tant, l'avaluació ha de considerar també altres aspectes com l'actitud, la capacitat de treball en grup, la intervenció en les discussions, etc.

El procés d'avaluació comença amb una prova inicial o diagnòstica per comprovar els coneixements previs sobre la temàtica i que no entra en el còmput de la nota final. A continuació es fa una avaluació formativa per orientar i millorar el procés d'aprenentatge de l'alumnat. Aquesta té en compte tant l'actitud de l'alumne envers a l'aprenentatge (participació, interès, cooperació amb els companys de grup, etc.) com la forma de realitzar les tasques i els resultats que se'n deriven. Finalment es realitza una avaluació sumativa mitjançant un examen final.

Els indicadors d'avaluació i els criteris de qualificació emprats són els següents:

##### a) Actitud i participació:

El docent observarà el comportament i la forma de treballar de cada estudiant. A través d'una rúbrica quantificarà els aspectes anteriors (Taula 3). La suma de puntuacions de la taula 3 s'ha d'escalar sobre 10 per obtenir la nota d'aquets apartat. La participació correspondrà a 10% de la qualificació final de la unitat didàctica estudiada a cada nivell.

**Taula 3:** Criteris d'avaluació de la participació i actitud de l'alumnat durant la realització de les tasques d'avaluació:

Nom alumne/a:

Grup:

<b>CRITERIS</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>
Demostra interès.				
Col·labora amb els companys en la redacció de l'informe.				
Escolta amb respecte les opinions dels companys de grup.				
Contribueix a les discussions a classe.				

**1-No compleix 2-Regular 3-Bé 4-Molt bé**

b) Informe de resultats:

Es valorarà tant la presència i organització dels apartats que s'indiquen en el guió de les activitats, com els continguts, l'expressió escrita, els resultats obtinguts, les respostes a les preguntes plantejades i les conclusions extretes, a través d'una rúbrica (Taula 4). Les nota de l'informe extreta de la rúbrica s'ha d'escalar sobre 10. L'informe equival a un 30% de la nota final.

c) Examen final:

Permet conèixer el grau d'adquisició de coneixements durant les activitats de modelització. L'examen correspon al 60% de la qualificació final. La nota mínima per aprovar serà un 5.

La suma de les notes dels informes i la participació equivalen gairebé a la meitat de la nota final, com a conseqüència del pes que s'atorga a la formació continua. Tots els criteris d'avaluació es posaran a disposició de l'alumnat abans d'iniciar els projectes.

Taula 4: Rúbrica d'avaluació de l'informe de resultats (adaptada de <https://sites.google.com/site/rubriquesgurb/>):

Indicadors	Excel·lent (4)	Notable (3)	Aprovat (2)	Insuficient (1)	Puntuació ponderada
<b>Estructura de l'informe (20%)</b>	Conté tots els apartats que es demanen en el guió del treball. Els apartats estan ordenats correctament i existeix una connexió lògica entre ells.	Conté tots els apartats que es demanen en el guió del treball però no estan ordenats correctament. Falta certa connexió entre els apartats.	Hi manquen apartats. No hi ha cohesió entre els apartats.	Hi manquen dos o més apartats. No hi ha una relació clara entre els apartats.	
<b>Continguts (30%)</b>	Els continguts de tots els apartats són adequats i inclouen la informació demanada.	Els continguts són adequats però la informació no és suficient, es podria ampliar.	Els continguts d'algun apartat no són correctes, però van ben encaminats.	Els continguts de molts dels aparats no són correctes i es desvien del què es demana.	
<b>Resultats i Conclusions (40%)</b>	Els resultats estan ben expressats a través de taules, gràfics, esquemes, etc. Conclusions ben elaborades.	Els resultats estan expressats però no són del tot correctes. Conclusions ben elaborades.	Els resultats no estan ben expressats i hi ha errors significatius. Conclusions errònies.	Els resultats i les conclusions no estan ben expressats o no s'han incorporat a l'informe.	
<b>Expressió escrita (10%)</b>	Text molt ben redactat. Format de text homogeni. Utilitza els tecnicismes adequats i no conté faltes d'ortografia.	Text ben redactat. Utilitzat en gran part del document un format de text homogeni. No sempre utilitza els tecnicismes adequats (algunes expressions col·loquials) i conté algunes faltes d'ortografia.	Text mal redactat. Format de text poc homogeni. Utilitza els tecnicismes adequats (masses expressions col·loquials) i conté bastantes faltes d'ortografia.	Text de difícil lectura. No hi ha un format de text homogeni. No utilitza els tecnicismes adequats i conté moltes faltes d'ortografia.	



#### 4.6. Valoració de la proposta

La proposta didàctica es recolza amb el programari propi de la Química Computacional per corregir els errors en l'aprenentatge que es desprenen d'una mala interpretació dels models curriculars. Les activitats de modelització també són una excel·lent oportunitat per mostrar l'efectivitat de treballar en grup per resoldre un problema i promoure l'ús del mètode científic (familiaritzant-se amb la manera de presentar la recerca en publicacions científiques a través de l'elaboració d'un informe de resultats). A més, contribuiria a l'assoliment de competències clau com la d'aprendre a aprendre i la digital. El valor pedagògic d'aquesta proposta està fonamentat en els precedents a la literatura sobre la necessitat d'introduir activitats basades en la creació de models a secundària. Desafortunadament, aquesta proposta no s'ha pogut portar a la pràctica i, per tant, no s'ha quantificat ni la seva viabilitat ni efectivitat. Seria essencial disposar de l'opinió de l'alumnat mitjançant una enquesta de valoració per conèixer quins punts del contingut o la temporització s'han de millorar.

Un anàlisi de la situació actual de l'ensenyament secundari i la realitat dels instituts evidencia una sèrie de limitacions que actualment dificulten la consecució d'aquesta proposta: primer de tot, la llei d'educació actual exigeix la impartició d'un currículum de ciències molt extens en un temps molt limitat. A més a més, a segon de Batxillerat els alumnes han de preparar-se per les PAU i no tenen el temps suficient per dedicar a la realització de projectes.

El segon inconvenient prové de l'escassetat de recursos en els centres de secundària. Tot i que la proposta contempla l'ús d'una plataforma web gratuïta, els instituts necessiten aules d'informàtica ben equipades. La despesa pública en educació no és suficient per a garantir a tothom l'accés a aquests recursos. No obstant, el reduït nombre d'estudiants que hi habitualment cursant el batxillerat científic fa que amb poc ordinadors sigui factible.

Un altre factor limitant és que el professorat ha de tenir una mínima per emprar els programes de càlcul. El volum de feina que té el docent durant el curs dificulta

que pugui dedicar temps a la formació i al disseny de projectes d'aquestes característiques.

Tot això no implica que haguem de descartar la possibilitat d'acostar la química computacional als alumnes de secundària. La inclusió d'aquesta eina a l'ensenyament secundari podria ser una realitat a mesura que es faci una transició cap a un model d'ensenyament més competencial o basat en el treball per projectes. Precisament, els la majoria dels estudis relacionats amb la implementació de la Química Computacional als primers cursos universitaris de ciències o l'escola secundària provenen del món anglosaxó, amb sistemes educatius que segueixen aquesta forma d'ensenyament. Per altra banda, la col·laboració entre les universitats i les institucions de recerca amb els centres de secundària podria proporcionar els recursos (*software* i accés a supercomputadors) i la instrucció al professorat suficient perquè la modelització esdevingui una tècnica d'ensenyament més a l'aula.

## CONCLUSIONS

Aquest treball presenta una proposta didàctica basada en l'ús de la Química Computacional com a eina per promoure l'aprenentatge de la Química a través de la creació de models. La proposta es focalitza en els models de l'àtom i l'enllaç químic, teories abstractes difícils d'entendre en la seva totalitat per part de l'alumnat. L'objectiu principal és que els estudiants esdevinguin els protagonistes del seu aprenentatge, explorant les característiques i el comportament dels models per elaborar-ne una imatge mental adequada. Les activitats de modelització també volen emfatitzar que els models, tot i ser simplificacions de la realitat, són necessaris en la construcció del coneixement científic. En paral·lel, es busca despertar l'interès de l'alumnat per la ciència i acostar-los a la forma de pensar de la comunitat científica.

A continuació s'exposen les conclusions obtingudes d'acord amb els objectius plantejats en aquest treball:

- a) Les dificultats que tenen els alumnes per a concebre els continguts relacionats amb l'estructura de la matèria i l'enllaç químic provenen d'una mala interpretació dels models curriculars. Per una banda, l'ensenyament tradicional pretén que els alumnes memoritzin les característiques dels models sense preocupar-se de fer entendre la seva naturalesa i funció. Per altra banda, es dona una imatge distorsionada i/o incompleta dels models, transmetent a l'alumnat una visió falsa sobre la naturalesa. Per evitar aquests problemes d'aprenentatge, s'haurien de proposar activitats basades en la construcció de models i el seu anàlisi seguint el raonament científic.
- b) Les referències consultades estant d'acord amb la influència positiva sobre l'aprenentatge i el grau de motivació de l'alumnat que tenen les TIC. Concretament, hi ha evidències que a través d'una metodologia docent basada en l'ús de *software* de modelització molecular es poden planificar activitats que ajudin a l'alumnat a interioritzar conceptes abstractes i promoure la pràctica del mètode científic. Existeixen també iniciatives tant

- a nivell internacional com estatal que busquen fomentar la pràctica de la Química Computacional a les aules per explotar el seu potencial pedagògic.
- c) L'anàlisi del currículum de FQ de 4rt ESO i batxillerat indica que en aquests cursos es proporciona la formació suficient sobre l'estructura de la matèria per emprar les eines de la Química computacional des d'una perspectiva pràctica i amb finalitats pedagògiques, sempre sota la guia del professor. El servidor WebMO fa accessible el software de modelització als centres de secundària, evitant els costos que suposa l'adquisició de llicències.
- d) D'acord amb les idees anteriors, s'ha dissenyat una proposta didàctica on la química computacional esdevé el fil conductor de l'aprenentatge. Aquesta proposta es focalitza en l'estudi del model mecanoquàntic de l'àtom per part dels alumnes de 4rt ESO, i l'enllaç químic a segon de batxillerat. El docent ha de vehicular el procés d'aprenentatge, considerant les idees prèvies dels alumne alhora de corregir els errors conceptuals. La discussió conjunta dels resultats finals promou l'autoavaluació dels estudiants, ajudant-los a corregir les idees equivocades i consolidar el seu aprenentatge.
- e) Les limitacions de temps i recursos en els instituts són els principals obstacles per implementar aquest tipus de tasques. Els centres que inverteixin els seus esforços i recursos en treballar per projectes o en tasques competencials es podrien beneficiar del potencial pedagògic del programari de modelització.

## REFERÈNCIES BIBLIOGRÀFIQUES

Ingham, A. M., i Gilbert, J. K. (1991). The use of analogue models by students of chemistry at higher education level. *International Journal of Science Education*, 13(2), 193-202. doi: 10.1080/0950069910130206

Shusaku, H., i Bret, U. (2009). Making connections to the 'real world': A model building lesson. *Physics Education*, 44(6), 633-638. doi: 10.1088/0031-9120/44/6/011

Gobert, J. D., O'Dwyer, L., Horwitz, P., Buckley, B. C., Tal Levy, S., i Wilensky, U. (2011). Examining the relationship between students' understanding of the nature of models and conceptual learning in biology, physics, and chemistry. *International Journal of Science Education*, 33(5), 653-684. doi: 10.1080/09500691003720671

Rickheit, G., i Sichelschmidt, L. (1999). Mental models: Some answers, some questions, some suggestions. Dins G. Rickheit i C. Habel (Eds.), *Mental models in discourse processing and reasoning* (Vol. 128, p. 9-40). Amsterdam, Països Baixos: Elsevier Science.

Coll, R. K., France, B., i Taylor, I. (2005). The role of models/and analogies in science education: Implications from research. *International Journal of Science Education*, 27(2), 183-198. doi: 10.1080/0950069042000276712

Treagust, D.F., Chittleborough, G., i Mamiala, T.L. (2002). Students' understanding of the role of scientific models in learning science. *International Journal of Science Education*, 24(4), 357-368. doi: 10.1080/09500690110066485

Harrison, A. G., i Treagust, D. F. (1996). Secondary students' mental models of atoms and molecules: Implications for teaching chemistry. *Science Education*, 80(5), 509-534. doi: 10.1002/(SICI)1098-237X(199609)80:5<509::AID-SCE2>3.0.CO;2-F

Boo, H. (1998). Students' understandings of chemical bonds and the energetics of chemical reactions. *Journal of Research in Science Teaching*, 35(5), p. 569-581. doi: 10.1002/(SICI)1098-2736(199805)35:5<569::AID-TEA6>3.0.CO;2-N

De posada, M. (1999). Concepciones de los alumnos sobre el enlace químico antes, durante y después de la enseñanza formal: problemas de aprendizaje. *Enseñanza de las ciencias*, 17(2), 227-245.

Taber, K.S. (1997). Student understanding of ionic bonding: molecular versus electrostatic framework? *School Science Review*, 78(285), 85-95.

Justi, R., i Gilbert, J. K. (2003). Teachers' views on the nature of models. *International Journal of Science Education*, 25(11), 1369-1386. doi: 10.1080/0950069032000070324

Justi, R. (1999). A Cause of Ahistorical Science Teaching: Use of Hybrid Models. *Science Education*, 83(2), 163-177. doi: 10.1002/(SICI)1098-237X(199903)83:2<163::AID-SCE5>3.0.CO;2-I

Justi, R. (2000). Teaching with historical models. Dins J. K. Gilbert i C. J. Boulter (Eds.), *Developing models in science education* (p. 209-226). Dordrecht, Països Baixos: Kluwer.

Chittleborough, G., i Treagustb, D.F. (2007). The modelling ability of non-major chemistry students and their understanding of the sub-microscopic level. *Chemistry Education Research and Practice*, 8(3), 274-292. doi: 10.1039/B6RP90035F

Saavedra Abadía, A. L. (2011). *Diseño e implementación de ambientes virtuales de Aprendizaje a través de la construcción de un curso virtual en la asignatura de química para estudiantes de grado de la institución educativa* (Treball de Màster, Universidad Nacional de Colombia). Recuperat de: <http://www.bdigital.unal.edu.co/6129/1/albaluciasaavedraabadia.2011.pdf>

Gómez, D. A. (2006). Incorporación de las TIC en el aula de química. *Studiositas. Bogotá-Colombia*, 1(1), 18-22.

Blanco, N., i González, J. (2011). Estrategia didáctica con mediación de las TIC, propicia significativamente el aprendizaje de la Química Orgánica en la educación secundaria. *Escenarios*, 9(2), 7-17

Caamaño, A. et. al (2011). Didáctica de la Física y la Química (p. 38-41). España: GRAÓ.

Quezada, C.T., Gangas, P.V., Frías, M.V., i Flores-Morales, P. (2017). Implementación de Avogadro como visualizador y constructor de moléculas con alumnos de primer año de Odontología en la asignatura Química General y Orgánica. *Educación Química*, 28, 91-98. doi: doi.org/10.1016/j.eq.2016.08.004

Clauss, A.D., i Nelsen, S.F. (2008). Integrating Computational Molecular Modeling into the Undergraduate Organic Chemistry Curriculum. *Journal of Chemical Education*, 86(8): 955-958. doi: 10.1021/ed086p955

Pearson, J. K. (2007). Introducing the practical aspects of computational chemistry to undergraduate chemistry students. *Journal of Chemical Education*, 84(8), 1323. doi: 10.1021/ed084p1323

Gamboa-Carballo, J.J., Ferino-Pérez, A., Lau-González, M., Hernández-Garcés, A., Corona-Hernández, J.A., i Jáuregui-Haza, U. (2007). Las TICs como herramienta para visualizar estructuras moleculares en la enseñanza de la Química General. *Revista Cubana de Química*. 29(3), 466-479.

Dori, Y.J., i Kaberman, Z. (2012). Assessing high school chemistry students' modelin sub-skills in a computerized molecular modeling learning environment *Instr Sci*, 40, 69-91. doi: 10.1007/s11251-011-9172-7.

Moreno, D. S. (2014). *Efectividad del uso del software Avogadro en la enseñanza y aprendizaje de la nomenclatura orgánica* (Treball de màster, Universidad Nacional de Colombia). Recuperat de: <http://www.bdigital.unal.edu.co/12698/>

Patiño Soriano, D.T. (2017). *Uso de la química computacional como herramienta para la enseñanza de la química en instituciones educativas* (Treball de grau, Universidad de Ciencias Aplicadas y Ambientales UDCA). Recuperat de: <http://repository.udca.edu.co:8080/jspui/handle/11158/657>

Mirats-Arce, A. (2016). *Programas de visualización molecular como recurso para lograr el aprendizaje significativo del enlace covalente en 2º de Bachillerato* (Treball de màster, UNIR). Recuperat de: <http://reunir.unir.net/123456789/4655>

Ochterski, J.W. (2014). Using computational chemistry activities to promote learning and retention in a secondary school general chemistry setting, *Journal of Chemical Education*, 91(6), 817. doi: 10.1021/ed300039y

Linenberger, K., Cole, R., i Sarkar, S. (2011). Looking Beyond Lewis Structures: A General Chemistry Molecular Modeling Experiment Focusing on Physical Properties and Geometry. *Journal of Chemical Education*, 88(7), 962-965. doi: 10.1021/ed100727r

Zohar, A.R. i Levy, S.T. (2018). Making energy easy: Interacting with the forces underlying chemical bonding using the ELI-Chem simulation. En Y. Eshet-Alkalai, I. Blau, A. Caspi, S. Etgar, N. Geri, Y. Kalman, V. Silber-Varod (Eds.), *Proceedings of the 13th Chais Conference for the Study of Innovation and Learning Technologies: Learning in the Technological Era* (p. 47E-56E).

Turon, P. (13 d'octubre del 2015). Una recerca gironina de Batxillerat rep un premi estatal d'investigació. *Diari de Girona*. Recuperat de: <http://www.diaridegirona.cat/girona/2015/10/13/recerca-gironina-batxillerat-rep-premi/747902.html>

Sendlinger, S.C., Decoste, D.J., Dunning, T.H., Dummitt, D.A., Jakobsson, E., Mattson, D.R., i Wiziecki, E. (2008). Transforming Chemistry Education through Computational Science. *Computing in Science and Engineering*, 10(5), 34-39.



Universitat de Girona. (2012). *Introducció al món de la química computacional a Secundària*. Recuperat de:

<http://www2.udg.edu/instituts/Qu%C3%ADmicaComputacional/Inici/Reculldenot%C3%ADcies/tabid/15203/p/24955/language/ca-ES/Default.aspx>

Decret 34/2015, de 15 de maig, pel qual s'estableix el currículum de l'educació secundària obligatòria a les Illes. Balears, BOIB 73 § 16 de maig (2015).

Decret 35/2015, de 15 de maig, pel qual s'estableix el currículum del batxillerat a les Illes Balears, BOIB 73 § 16 de maig (2015).

Decret 1105/2014, de 26 de desembre, pel qual s'estableix el currículum bàsic de l'Educació Secundària Obligatòria i del Batxillerat, BOE 3 § I (2015).

M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, Ö. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, and D. J. Fox, Gaussian 09 (Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009).

#### Pàgines web:

OECD. (2018). OECD. *Better policies for better lives*. Recuperat de: [www.oecd.org](http://www.oecd.org)

Aula planeta i Gabinet de Comunicació i Educació de la UAB. (2014). *Tecnología y pedagogía en las aulas. Perspectivas 2014*. Recuperat de: [http://www.aulaplaneta.com/descargas/aulaPlaneta\\_Perspectivas-2014.pdf](http://www.aulaplaneta.com/descargas/aulaPlaneta_Perspectivas-2014.pdf)

FQSB. (2018). *Física y Química para Secundaria y Bachillerato*. Recuperat de: <http://www.fisica-quimica-secundaria-bachillerato.com/>

ChemReax™. (2017). A chemical reaction modelling and simulation app from ScienceBySimulation. Recuperat de: <http://www.sciencebysimulation.com/chemreax/Faq.aspx>

American Chemical Society. (2016). *Virtual Chemistry and Simulations*. Recuperat de: <https://www.acs.org/content/acs/en/education/students/highschool/chemistryclubs/activities/simulations.html>

American Chemical Society. (2015). *Computational Chemistry*. Recuperat de: <https://www.acs.org/content/acs/en/careers/college-to-career/chemistry-careers/computational-chemistry.html>

Giménez, X. (2014). *Química Computacional e Industria*. Recuperat de: <http://www.xrqtc.com/wp-content/uploads/2014/07/xgimenez.pdf>

CODE. (2015). Middle School CS in Science. Recuperat de: <https://code.org/curriculum/science>

Gaussian, Inc. (2017). *Pricing for Gaussian Products*. Recuperat de: <http://gaussian.com/pricing/>

North Carolina High School Chemistry Server. (2018). Recuperat de: <http://chemistry.ncssm.edu/>

WebMO, LLC. (2016). *WebMO - Computational Chemistry*. Recuperat de: <https://www.webmo.net/>

## ANNEXOS

L'annex I conté una introducció qualitativa als fonaments de la química quàntica. L'annex II conté els qüestionaris inicials per a cada nivell. Els annexos III-IV representen possibles guions de treball que rebria l'alumnat de les tasques a desenvolupar en aquesta proposta didàctica. Contenen una introducció dels continguts que es volen tractar, manuals d'ús dels software de modelització, els objectius curriculars de cada activitat, les qüestions que han de respondre els estudiants i les indicacions sobre el format de presentació dels resultats.

### Annex I: Fonaments matemàtics de la química quàntica

La funció d'ona descriu l'estat quàntic d'un sistema de partícules i queda determinada per l'equació de Schrödinger, que és l'anàleg de la segona llei de Newton per a un sistema quàntic. A partir d'aquesta es poden calcular les propietats estacionàries d'un àtom o molècula i predir el seu comportament. L'equació de Schrödinger té la forma següent (Eq. 1):

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (1)$$

on  $\Psi$  és la funció d'ona del sistema,  $\hat{H}$  és l'operador hamiltonià que conté les energies cinètiques i potencials de les partícules que constitueixen el sistema. L'operador hamiltonià inclou una sèrie d'operacions matemàtiques que, aplicades sobre la funció d'ona del sistema, ens retorna la seva energia ( $E$ ). L'expressió general del hamiltonià per a un sistema atòmic ( $\hat{H}_a$ ) i un de molecular ( $\hat{H}_m$ ) es poden escriure com una suma de diferents termes:

$$\hat{H}_a = T_e + V_{ee} + V_{Ne} \quad (2)$$

$$\hat{H}_m = T_N + V_{NN} + T_e + V_{ee} + V_{Ne} \quad (3)$$

on  $T_N$  és l'energia cinètica nuclear,  $V_{NN}$  la interacció de repulsió nucli-nucli,  $T_e$  és l'energia cinètica dels electrons,  $V_{ee}$  és la interacció de repulsió entre electrons, i  $V_{Ne}$  és l'atracció entre un nucli i els electrons. Els operadors de les energies cinètica i potencial total anteriors es poden expressar com a sumatori de les energies associades a cada partícula:

$$T_N = \sum_{a=1}^N -\frac{1}{2M_a} \nabla_a^2, \quad V_{NN} = \sum_{a=1}^N \sum_{b>a}^N \frac{Z_a Z_b}{R_{ab}}, \quad T_e = \sum_{i=1}^n -\frac{1}{2} \nabla_i^2,$$

$$V_{ee} = \sum_{i=1}^n \sum_{i>j}^n \frac{1}{r_{ij}}, \quad V_{Ne} = \sum_{i=1}^n \sum_{a=1}^N -\frac{Z_a}{r_{ia}}$$

L'equació de Schrödinger no es pot resoldre de forma exacte per a sistemes atòmics i moleculars formats per més de dos electrons, degut a la impossibilitat de trobar solucions analítiques al moviment correlacionat dels nuclis i els electrons. Per tant, s'han d'utilitzar una sèrie d'aproximacions, essent la més important l'aproximació de Born-Oppenheimer. Aquesta es basa en el fet que el moviment dels nuclis és molt més lent que el dels electrons degut a la gran diferència de masses. Així, cada nucli experimenta els electrons com si aquests fossin un núvol de càrrega negativa, mentre que els electrons senten als nuclis com si aquests estiguessin ocupant posicions fixes en l'espai. Aquesta aproximació permet eliminar el terme de l'energia cinètica associada als nuclis del hamiltonià (primer terme de les Eq. 2 i 3) i converteix  $V_{NN}$  en una constant per unes determinades posicions nuclears. D'aquesta manera, el moviment electrònic queda separat del nuclear.

Una altra aproximació és la introduïda pels físics Hartree i Fock l'any 1928. Van proposar un model per calcular com interacciona un electró amb la resta, on és reemplaça el terme  $V_{ee}$  de les equacions 2 i 3 per un potencial efectiu ( $V_{HF}$ ). Així, es considera que cada electró experimenta el camp elèctric mitjà generat pels demés electrons. En el cas de les molècules, el moviment del nuclis s'estudia en paral·lel al dels electrons per a determinar la distribució de partícules que dona la menor energia, procés que es coneix com optimització. Per tant, la geometria resultant serà la l'estructura molecular més estable. Quan l'aproximació de Hartree-Fock s'aplica a molècules, la funció d'ona del sistema es construeix com una combinació de funcions d'ona atòmiques (els orbitals atòmics).

En les últimes dècades, l'elaboració d'algoritmes informàtics basats en la resolució numèrica de l'equació de Schrödinger ha fet que el seu ús esdevingui

rutinari en el camp de la recerca en Química. El mètode de Hartree-Fock (HF) ha estat el punt de partida per a l'elaboració de mètodes de càlcul més sofisticats que tenen en compte el moviment correlacionat dels electrons, és a dir, les interaccions puntuals que experimenta un electró amb la resta enloc de un camp elèctric promig. Aquest mètodes permeten estudiar amb major precisió les propietats i la reactivitat de qualsevol sistema atòmic i molecular a través de la resolució numèrica de l'equació de Schrödinger, la discussió dels quals sobrepassa els objectius d'aquest treball. L'ús del mètode Hartree-Fock és suficient per desenvolupar les tasques plantejades en aquest treball.

## Annex II: Qüestionari inicial

- 4rt ESO:

El següent qüestionari no entra dins l'avaluació de l'assignatura. Només és per conèixer les vostres idees sobre la matèria.

Nom i llinatges:

Data:

- 1. Si poguéssim veure un àtom de carboni, com seria? Dibuixa'l i indica les seves parts.**
- 2. Explica de forma breu que és un model atòmic.**
- 3. Què creus que determina la distribució dels electrons dins l'àtom?**
- 4. Quines de les afirmacions següents és certa segons el model mecanoquàntic de l'àtom?**
  - a) Els electrons descriuen òrbites al voltant del nucli.
  - b) Els àtoms estant formats per capes i els electrons es distribueixen en orbitals dins de cada capa.
  - c) Els electrons només poden descriure unes determinades òrbites situades en un pla.
  - d) Podem saber amb exactitud on la posició d'un electró dins d'un àtom.
- 5. Que és un orbital? Defineixo amb les teves paraules.**

- Segon de batxillerat:

El següent qüestionari no entra dins l'avaluació de l'assignatura. Només és per conèixer les vostres idees sobre la matèria.

Nom i llinatges:

Data:

- 1. Perquè s'uneixen els àtoms?**
  - a) Per assolir una estructura de menor energia.

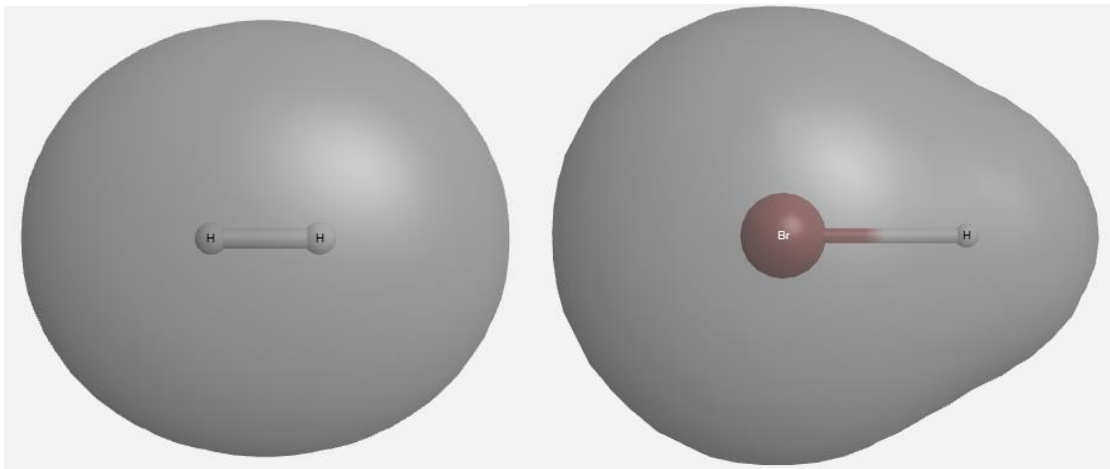
- b) Perquè necessiten completar l'octet.
- c) Degut a la força gravitacional.
- d) Per guanyar o perdre electrons.

**2. Quins tipus d'enllaç químic existeixen?**

- a) Covalent, iònic i no-metàl·lic
- b) Iònic, metàl·lic i no-metàl·lic.
- c) Covalent, valent i iònic
- d) Covalent, iònic i metàl·lic.

**3. Representa l'estructura de Lewis de les molècules següents: Br<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub> i H<sub>2</sub>S. Quina geometria presenten?**

**4. Les figures següents representen la distribució del núvol electrònic de les molècules de H<sub>2</sub> i HBr, respectivament.**



**D'acord amb els dibuixos, quina de les afirmacions és certa?**

- a) L'enllaç H-H és covalent polar.
- b) La major concentració de càrrega sobre l'àtom de brom és conseqüència de la gran diferència d'electronegativitat entre els dos elements.
- c) La molècula de HBr és apolar.
- d) Totes són falses.

**5. D'acord amb la teoria de l'enllaç de valència (TEV):**

- a) L'enllaç covalent consisteix en el solapament de dos orbitals de valència (o híbrids) semiocupats d'àtoms diferents.
- b) Si dos orbitals atòmics se solapen en la direcció de l'enllaç es forma un enllaç  $\pi$  i la densitat electrònica es concentra entre els nuclis.
- c) Si dos orbitals atòmics se solapen en la direcció de l'enllaç es forma un enllaç  $\sigma$  i la densitat electrònica es concentra en direcció perpendicular al pla que conté els nuclis.
- d) Totes són falses.

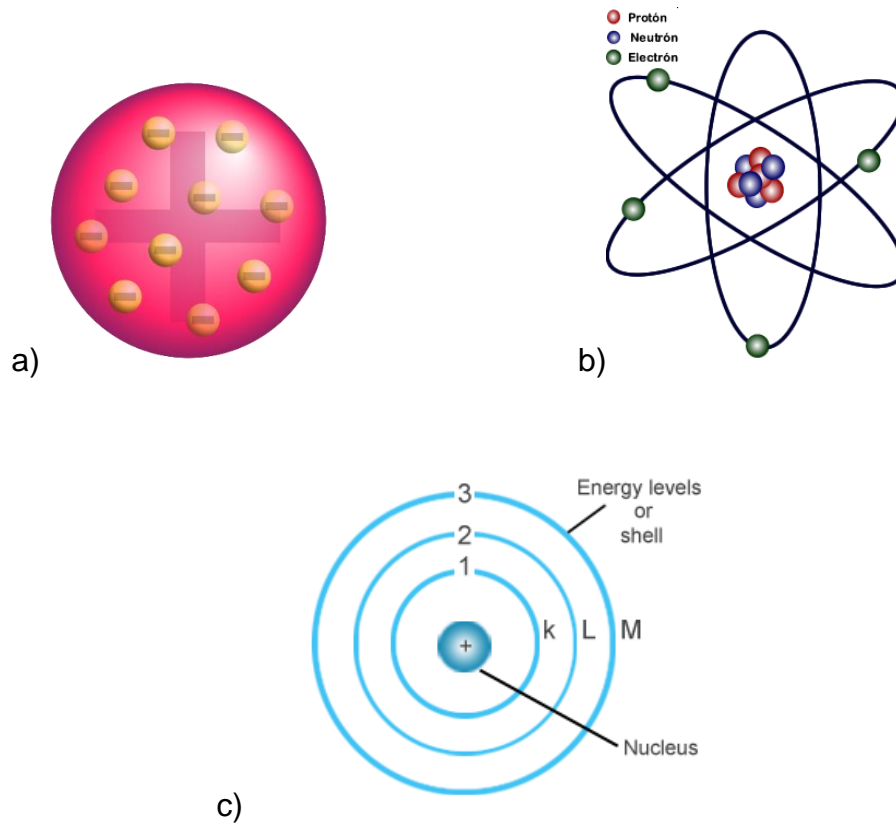


### Annex III: Representació d'orbitals atòmics i la configuració electrònica

#### a) Introducció:

A classe hem parlat dels models més importants proposats per explicar l'estructura dels àtoms i les seves propietats. Conèixer la localització dels electrons resulta essencial si es vol entendre i fer prediccions sobre com reaccionaran els àtoms entre ells per formar molècules. El model seleccionat influirà en tot allò que es pugui dir sobre el comportament dels àtoms i el compostos que formen.

A principis del segle XX el físic J.J. Thomson va postular el seu model atòmic basat en l'electró, partícula que havia descobert uns anys abans. Va proposar que l'àtom estava compost per electrons immersos en una esfera de càrrega positiva (**Figura 1a**). Posteriorment, noves evidències experimentals sobre la distribució de la massa atòmica recollides per Ernest Rutherford invalidaven el model de Thomson. Així, Rutherford va elaborar el 1911 un model atòmic més proper a l'acceptat avui en dia, en què pràcticament tota la massa dels àtoms i la càrrega positiva està concentrada al centre d'aquests, anomenat nucli (**Figura 1b**). Els electrons descriurien orbites al voltant del nucli, com els planetes al voltant del Sol.

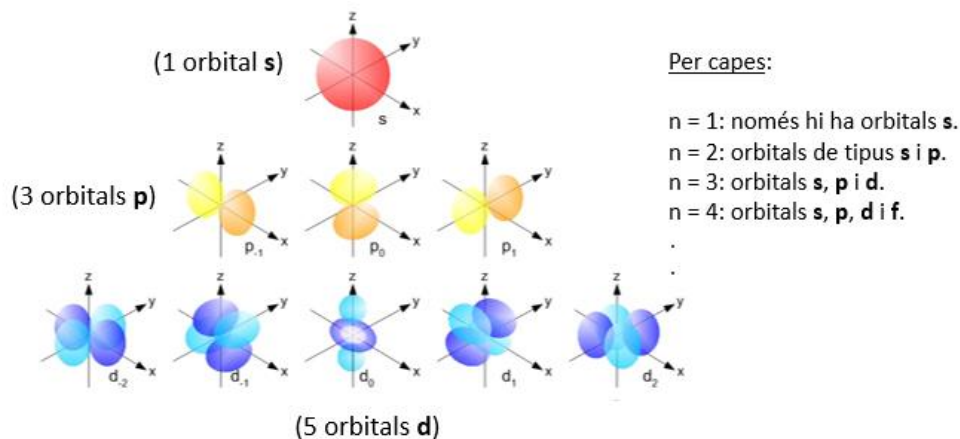


**Figura 1:** a) En el model atòmic de Thomson, l'àtom està compost per electrons immersos en una esfera de càrrega positiva. b) Model de Rutherford: els electrons orbiten un nucli que concentra pràcticament la totalitat de la massa de l'àtom. c) En el model atòmic de Bohr, no totes les òrbites són possibles i cadascuna té una energia definida.

La física clàssica predeia que un electró seguint una trajectòria circular ha de perdre energia en forma de radiació fins caure sobre el nucli. Aquest fet és inconsistent amb el model de Rutherford. El físic Niels Bohr va realitzar una sèrie d'estudis que suggerien que els electrons giren al voltant del nucli descrivint només determinades òrbites circulars, en què no perden energia. Els electrons i les seves òrbites s'organitzen en "capes" amb una certa energia (nivells d'energia). L'àtom està quantitzat i cada nivell energètic tindria una capacitat limitada per encabir electrons (**Figura 1c**). El nombre màxim d'electrons que té cada capa ve donat per la fórmula  $2n^2$ , on  $n$  és el número de la capa ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ). El model Bohr és molt útil per predir els comportaments d'una sèrie de propietats atòmiques. Malauradament, investigacions més avançades van mostrar que el model de Bohr tampoc era suficient per indicar on troben els electrons dins un àtom: alguns nivells presentaven, al seu torn, subnivells.

També es va observar que no sempre es podia afirmar que les partícules elementals, com l'electró, ocupessin una determinada posició a l'espai. Per tant, no es podia parlar d'òrbites ni posicions fixes dels electrons.

Erwin Schrödinger va formular el 1925 una equació que permet descriure el comportament dels electrons dins els àtoms. Aquesta equació és la base del model atòmic actual: el model mecanoquàntic. Segons aquest model, els electrons no segueixen òrbites circulars sinó que es troben en orbitals, regions de l'espai en què hi ha una probabilitat elevada (superior al 90 %) de trobar-los. Així, dins cada capa atòmica hi ha diferents subnivells o tipus d'orbitals que s'indiquen amb les lletres: s, p, d i f (**Figura 2**), de diferent grandària segons el nivell en què es troben i energia. Cada orbital només pot encabir dos electrons.

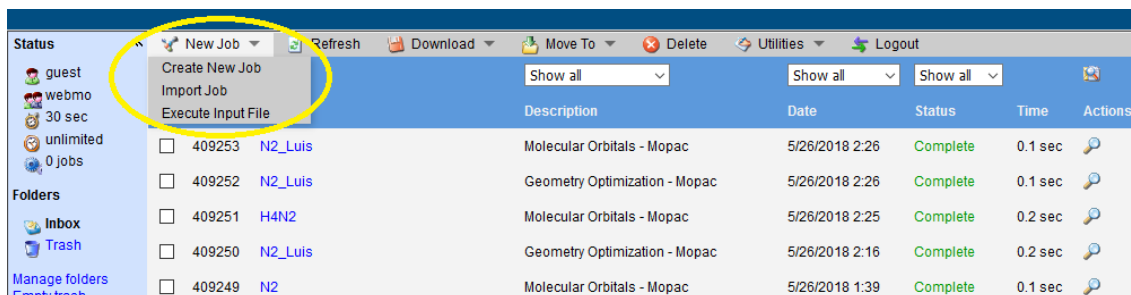


**Figura 2:** Llistat dels orbitals s, p i d que s'obtenen de la resolució de l'equació de Schrödinger.

En aquesta activitat utilitzarem software específic per a resoldre l'equació de Schrödinger i determinar la ocupació i energia dels orbitals per una sèrie d'àtoms. A partir d'aquests deduirem la configuració electrònica de cada element.

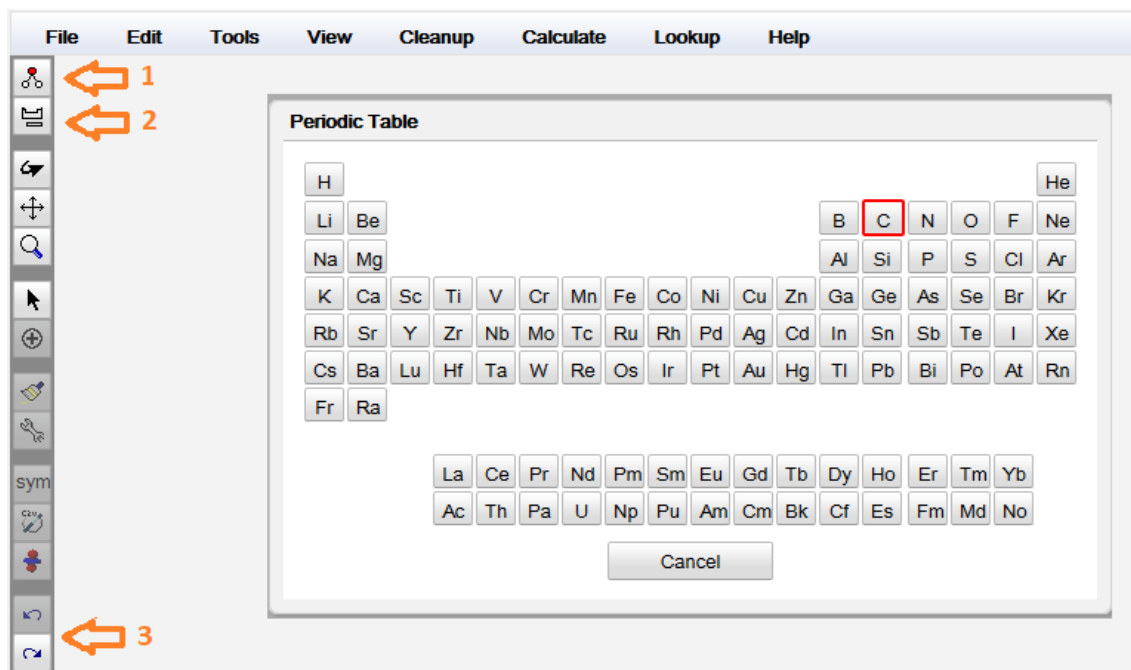
b) Manual d'ús de la plataforma WebMO:

1. Iniciu sessió a la interfície WebMO com a convidat ("guest"). (<https://www.webmo.net/demoserver/cgi-bin/webmo/login.cgi>).
2. Crear un nou fitxer de treball clicant el desplegable "New Job" a la cantonada superior esquerra de la pantalla i seleccionar l'opció "Create New Job" (**Figura 3**).



**Figura 3:** Finestra principal de la interfície WebMO, on s'indica com crear un fitxer de treball.

3. A continuació apareixerà la finestra de dibuix (**Figura 3**). A la barra vertical esquerra hi ha un conjunt d'icones que ens ajudaran a dibuixar i moure en l'espai els àtoms. La icona etiquetada amb el nombre 1 està activada i permet representar àtoms (per defecte, de carboni) clicant al quadre de dibuix. Si es volen incloure altres àtoms, la icona 2 obre una segona finestra amb la taula periòdica per seleccionar l'element desitjat. Finalment, clicant els icones marcats amb el nombre 3 es poden refer o desfer el canvis.

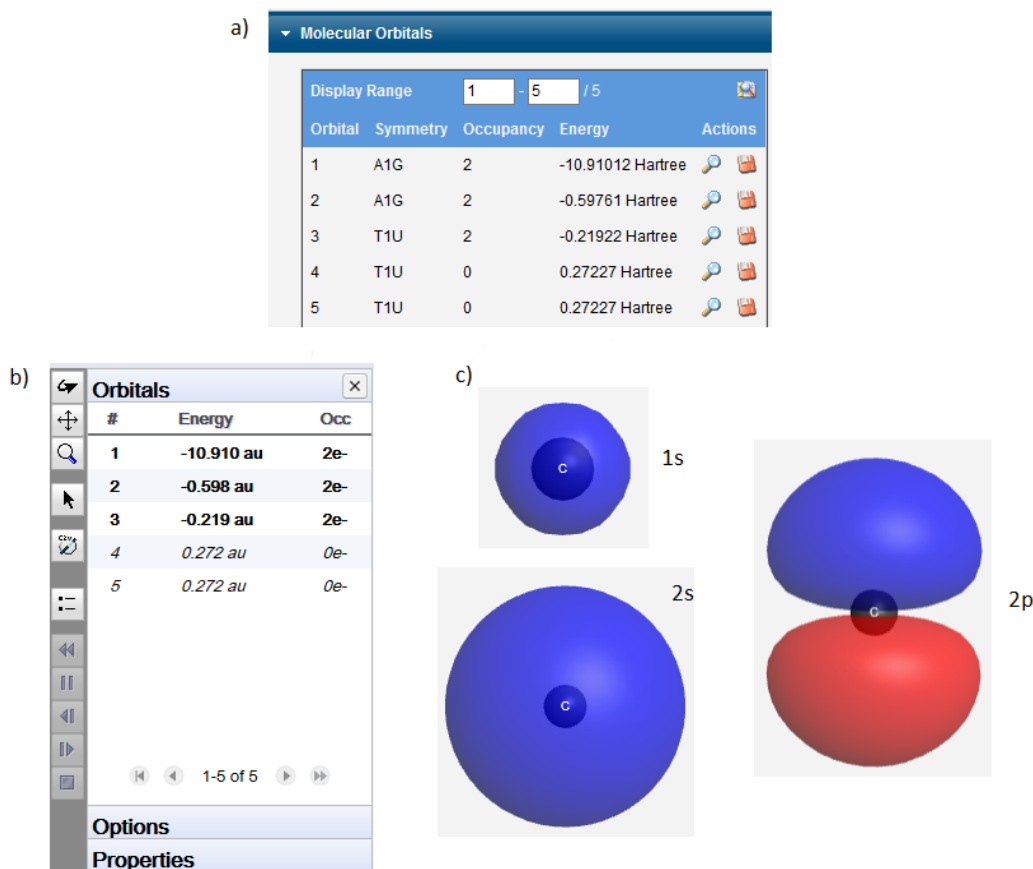


View - Rotate (drag = rotate XY; alt-drag = rotate Z)

**Figura 3:** Quadre de dibuix amb les icones més rellevants assenyalades. La taula periòdica apareix per pantalla quan es clica la icona 2

4. Dibueixem un àtom i llavors cliquem la fletxa que apareix a la cantonada dreta inferior. A continuació apareix una nova pantalla on ens demana quin programa

de càlcul volem utilitzar (en aquesta proposta utilitzarem el *Gaussian*). Llavors, al desplegable “Calculations” seleccionem l’opció “Molecular orbitals” i a “Basis Set” l’opció “STO-3G”. Aquest últim paràmetre provoca que els electrons ocupin orbitals de tipus hidrogenoide. Fem el darrer clic a la fletxa de la cantonada dreta i la plataforma ens enviarà de nou cap a la pantalla principal. A l’apartat de “Status” veurem que el nostre càlcul s’ha executat (“Running”). Una vegada hagi finalitzat (“Complete”) hem de clicar a la icona en forma de lupa per veure els resultats. Pot aparèixer la paraula “Failed” si el càlcul no a finalitzat correctament. Una vegada finalitzat el càlcul, accedim als resultat i anem a la pestanya “Molecular Orbitals”, que conté els orbitals calculats (**Figura 4a**). Clicant la icona lupa de qualsevol dels orbitals apareix una llista dels mateixos ordenats de menor a major energia (en unitats atòmiques (au) d’energia), amb la seva ocupació electrònica (**Figura 4b**). Finalment, es pot visualitzar la forma de cada orbital clicant sobre cadascun (**Figura 4c**).



**Figura 4:** Energia, ocupació i forma dels orbitals d’un àtom de carboni en el seu estat fonamental.

Objectius de l'activitat:

- Entendre el significat d'orbital atòmic.
- Relacionar l'ordre d'ocupació dels orbitals amb la seva energia.
- Visualitzar l'àtom com un sistema format per capes electròniques
- Determinar la configuració electrònica d'un element.

d) Qüestions:

- Calcula els orbitals atòmics pels elements següents: H, He, C, O, F, Ne, Ca, S. Quin tipus d'orbitals obtens? quina ocupació tenen?
- Els electrons tenen una posició determinada dins de cada orbital?
- Quina relació hi ha entre l'energia dels orbitals, la seva grandària i la distància electró-nucli?
- Representa el diagrama d'energia dels orbitals atòmics, ordenant-los de menor a major energia i indicant la seva ocupació. D'acord amb el diagrama, quina és la configuració electrònica de cada element?
- A partir dels resultats anteriors, indica que representa el diagrama de Möeller.

e) Presentació dels resultats:

El treball es farà en grups de 2 o 3. Els resultats del treball s'han de presentar mitjançant un informe, que constarà de tres parts: una secció on heu d'indicar que heu fet i com, els resultats dels càlculs (els diagrames d'energia dels orbitals amb els seus dibuixos) i les respostes del qüestionari.

Alhora d'elaborar l'informe tingueu en compte els criteris especificats a la rúbrica d'avaluació. L'heu d'entregar durant la classe anterior a l'examen final.

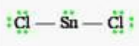

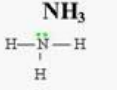
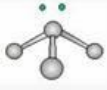
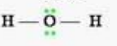




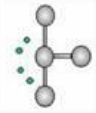
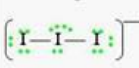
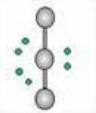
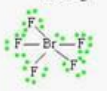


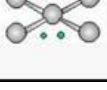
## Annex IV: Determinació de l'estructura molecular

### a) Introducció:

Les propietats dels compostos moleculars depenen de la seva composició i estructura. Per tant, disposar d'una eina per predir la geometria molecular és extremadament important. El model de repulsió de parells d'electrons de la capa de valència (RPECV) permet identificar quina és l'estructura més estable per a un sistema molecular. Aquest estableix que els electrons s'agrupen en parells electrònics que es localitzen en llocs específics de la molècula, i segons la posició d'aquests al voltant de l'àtom central s'estableixen forces de repulsió que determinen la estructura final del compost.

A la **Figura 1** es llisten les possibles estructures que pot adoptar una molècula segons el nombre de parells d'electrons lliure i compartits al voltant de l'àtom central d'acord amb la RPECV. Per aplicar el model s'ha de dibuixar el diagrama de Lewis del compost i determinar el nombre i tipus de parells d'electrons. Es considera que els dobles i triples enllaços es comporten com si fossin simples. Si una molècula té dues o més formes ressonants, és possible aplicar el model a qualsevol d'elles.

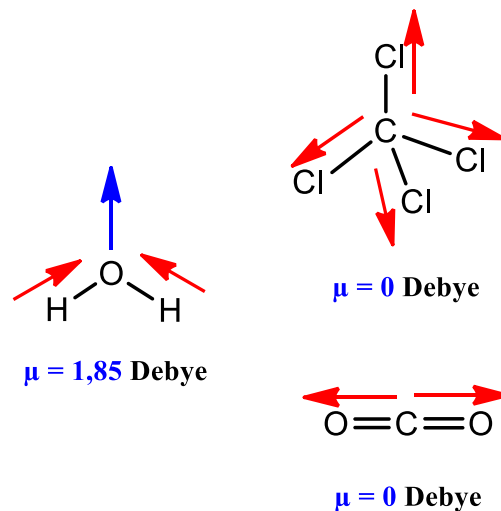
BeCl <sub>2</sub>	BF <sub>3</sub>	CH <sub>4</sub>	PCl <sub>5</sub>	SF <sub>6</sub>
2 parells de e- de enllace	3 parells de e- de enllace	4 parells de e- de enllace	5 parells de e- de enllace	6 parells de e- de enllace
180°	120°	109.5°	120°, 90°	90°
Lineal	Triangular plana	Tetraédrica	Bipiràmide trigonal	Octaédrica

$\text{SnCl}_2$ 	PE = 2 PL = 1	Triangular plana		Angular < 120°
$\text{NH}_3$ 	PE = 3 PL = 1	Tetraédrica		Piràmide Trigonal 107 °
$\text{H}_2\text{O}$ 	PE = 2 PL = 2	Tetraédrica		Piràmide Trigonal 105 °
$\text{SF}_4$ 	PE = 4 PL = 1	Bipiràmide trigonal		Balanzín
$\text{ClF}_3$ 	PE = 3 PL = 2	Bipiràmide trigonal		Forma de T
$\text{I}_3^-$ 	PE = 2 PL = 3	Bipiràmide trigonal		Lineal
$\text{BrF}_5$ 	PE = 5 PL = 1	Octaédrica		Piràmide quadrada
$\text{XeF}_4$ 	PE = 4 PL = 2	Octaédrica		Plana quadrada

**Figura 1:** Classificació de les estructures moleculars d'acord amb el model RPECV segons els parell d'electrons lliures (PL) i compartits (PE). Figures extretes de Diego, J. P. d. (2008, September 04). Tema 3. El enllace químico. Web site: <http://ocw.uc3m.es/ciencia-e-oin/quimica-de-los-materiales/Material-de-clase/tema-3.-el-enllace-quimico>.X

Una propietat molecular que depèn tant del tipus d'elements que configuren el compost com la seva estructura és la polaritat. La càrrega elèctrica en els enllaços covalents pot està distribuïda de manera no uniforme com a conseqüència de la diferència d'electronegativitat entre els elements. La polaritat elèctrica que adquireix l'enllaç es quantifica amb el moment dipolar ( $\mu$ ). Si cada enllaç té associat un vector  $\mu$ , llavors el moment dipolar total de la molècula vindrà donat per la suma vectorial de tots els dipols (**Figura 2**). El resultat d'aquesta suma vindrà donada per la distribució espacial dels àtoms i els parells d'electrons. Una molècula és apolar si el moment dipolar total és nul. La polaritat determina l'estat físic i les propietats d'una substància.



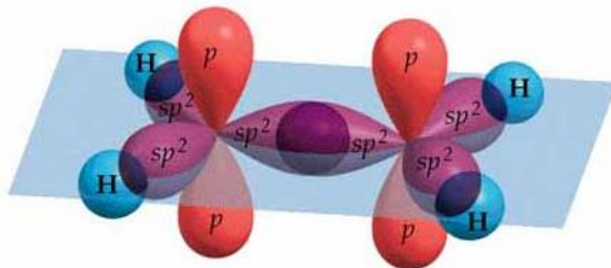


**Figura 2:** Moment dipolar total en Debye de molècules amb diferents geometries.

La teoria de Lewis i el model RPECV consideren que cada parell d'electrons enllaçats està localitzat entre dos àtoms units. No obstant això, sabem que els electrons no estan localitzats en posicions determinades sinó que estan deslocalitzats sobre una regió definida pels orbitals atòmics que ocupen. Així, necessitem una teoria basada en el model mecanoquàntic de l'àtom i l'equació de Schrödinger per explicar l'enllaç químic. Com hem vist a classe, la teoria d'enllaç de valència (TEV) és la descripció de la formació d'un enllaç en termes del solapament dels orbitals atòmics associats a les capes de valència i l'aparellament dels espins dels electrons que ocupen aquests orbitals. El solapament d'orbitals fa que l'energia del sistema disminueixi i s'estabilitzi. En aquestes circumstàncies, els àtoms es troben a la seva distància d'equilibri gràcies a l'equilibri entre les forces electrostàtiques d'atracció i repulsió que s'estableixen entre els núvols d'electrons i els nuclis. La TEV explica tant la geometria molecular com la força dels enllaços.

Per a molècules poliatòmiques necessitem un nou concepte, anomenat hibridació, que implica la combinació dels orbitals de valència d'un àtom per formar un nou orbital amb una determinada direccionalitat. Això permet racionalitzar la geometria experimental de determinades molècules, que no es poden explicar de manera senzilla pel solapament directe dels orbitals de

valència (Figura 3). La hibridació, però, no és un fenomen sinó una eina matemàtica per a una descripció aproximada dels enllaços en termes de la TEV.

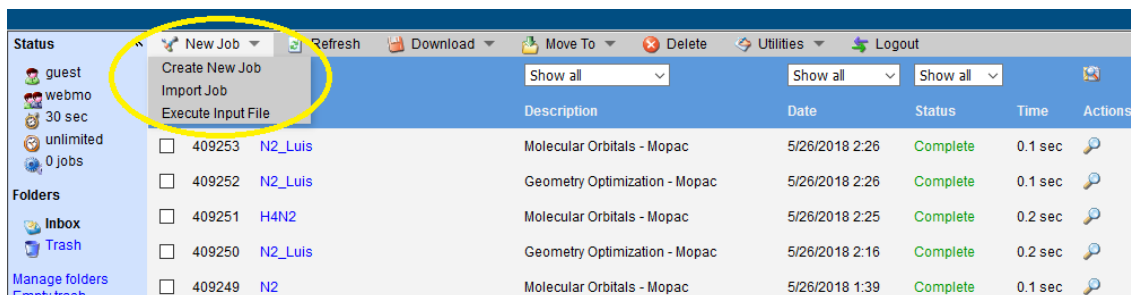


**Figura 3:** Solapament d'orbitals híbrids en una molècula d'etè (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>). Els carbonis tenen una hibridació  $sp^2$  i el lòbuls dels orbitals híbrids es solapen amb els orbitals 1s dels hidrògens per formar un enllaç covalent de tipus  $\sigma$ . Els orbitals  $p$  que no formen part dels híbrids es situen en el pla perpendicular a l'eix d'enllaç. El solapament laterals dels orbitals  $p$  dona lloc a l'enllaç doble (simetria  $\pi$ ). Imatge extreta de <http://wps.prenhall.com>.

En aquesta activitat combinarem la TEV i els híbrids per determinar la geometria esperada de qualsevol molècula, el tipus d'enllaços i la seva polaritat. Utilitzarem *software* de Química computacional proporcionat per la plataforma WebMO per visualitzar les molècules. Finalment, a través de la plataforma resoldrem l'equació de Schrödinger per quantificar el vector moment dipolar d'una molècula. En els paràgrafs següents teniu un manual d'ús.

b) Manual d'ús de la plataforma WebMO:

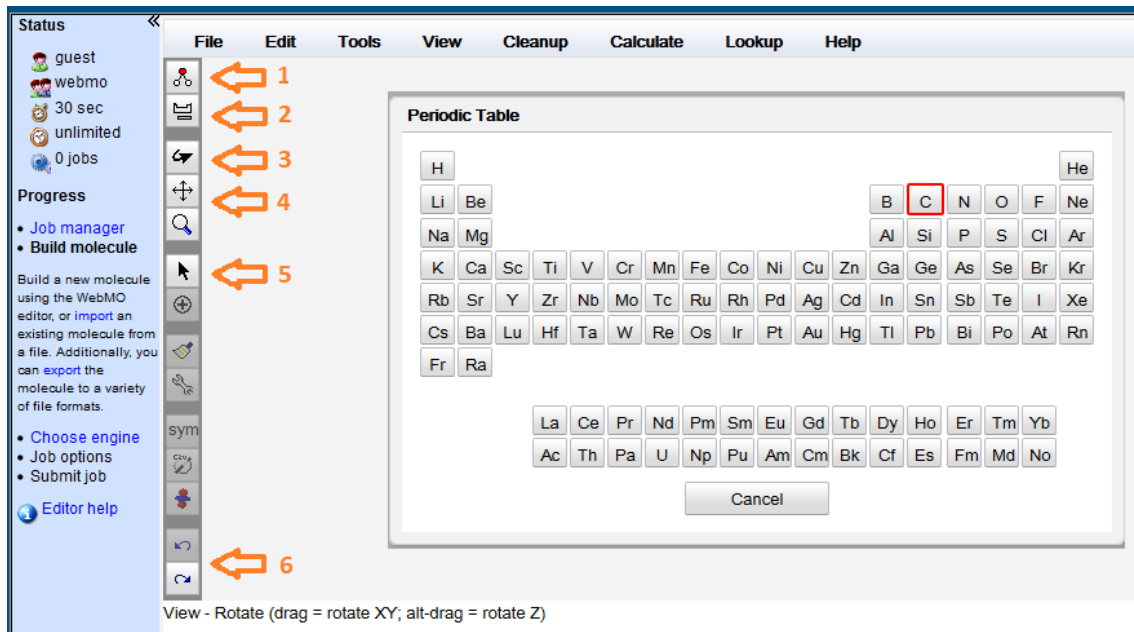
1. Iniciu sessió a la interfície WebMO com a convidat ("guest"). (<https://www.webmo.net/demoserver/cgi-bin/webmo/login.cgi>).
2. Crear un nou fitxer de treball clicant el desplegable "New Job" a la cantonada superior esquerra de la pantalla i seleccionar l'opció "Create New Job" (**Figura 1**).



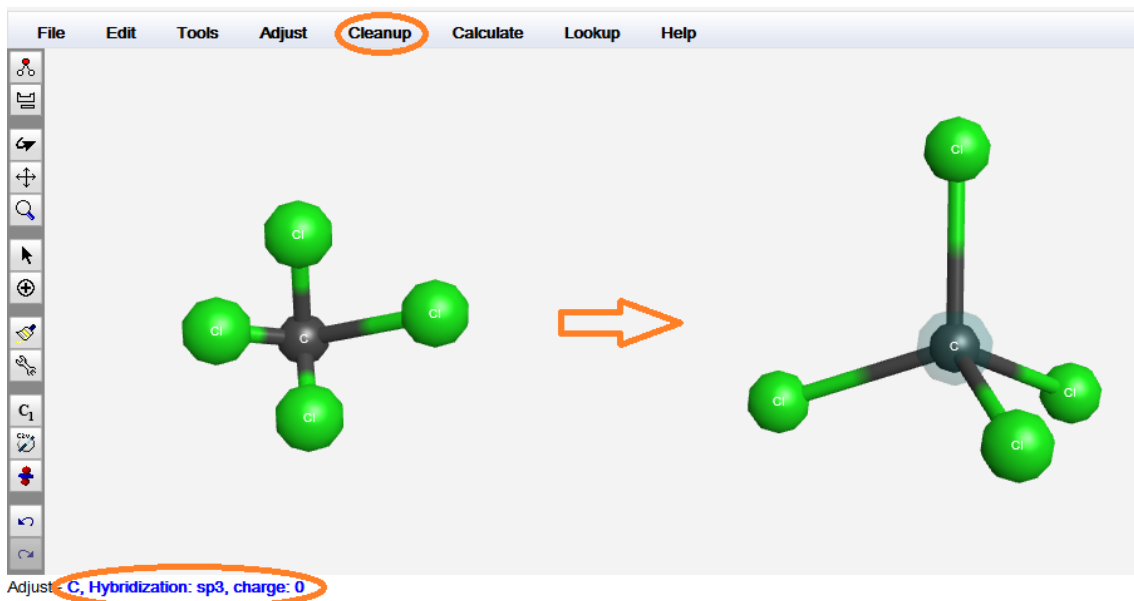
**Figura 1:** Finestra principal de la interfície WebMO, on s'indica com crear un fitxer de treball.

3. A continuació apareixerà la finestra de dibuix (**Figura 2a**). A la barra vertical esquerra hi ha un conjunt d'icones que ens ajudaran a dibuixar i moure en l'espai les estructures 3D. La icona etiquetada amb el nombre 1 està activada i permet representar àtoms (per defecte, de carboni) al quadre de dibuix. Si es volen incloure altres àtoms, la icona 2 obre una segona finestra amb la taula periòdica per seleccionar l'element desitjat. El tercer botó s'utilitza per girar la molècula per observar-la des de diferents perspectives mentre que el quart s'utilitza per desplaçar les estructures al llarg del quadre de dibuix. Es pot ampliar o disminuir la mida de la imatge amb la icona en forma de lupa. Finalment, clicant els icones marcats amb el nombre 6 es poden refer o desfer el canvis aplicats sobre l'estructura molecular.

a)



b)



**Figura 2:** a) Quadre de dibuix amb les icones més rellevants assenyalades. La taula periòdica apareix per pantalla quan es clica la icona 2. b) Dibuix d'una molècula de tetraclorur de carboni (CCl<sub>4</sub>) i el posterior ajustament de les distàncies i angles d'enllaç. Es marca la càrrega i hibridació de l'àtom de carboni després d'ajustar la geometria.

### a.1) *Dibuixar estructures moleculars:*

Per dibuixar una molècula seguirem els passos següents: Primer es clica el botó esquerra del ratolí sobre el quadre de dibuix per generar un àtom. A continuació, mantenint el botó esquerra clicat sobre l'àtom anterior, s'arrastra el cursor en la direcció desitjada per a generar un segon àtom enllaçat al primer. Si aquesta acció es va repetint utilitzant àtoms diferents es pot construir qualsevol molècula. A la **Figura 2b** es mostra la construcció d'una molècula de tetraclorur de carboni ( $\text{CCl}_4$ ). Com es pot observar a la imatge, la geometria obtinguda manualment està molt distorsionada. Per obtenir una bona aproximació de les distàncies i angles d'enllaç esperats, s'ha de clicar l'opció "Cleanup" del menú superior i a continuació "Comprehensive - Idealized". Els sistema parteix de valors de distàncies i angles esperats tabulats en una base de dades per obtenir una aproximació de l'estructura de l'età. Clicant amb el botó esquerra del ratolí sobre un àtom el programa ens informe sobre la seva càrrega i el tipus hibridació dels orbitals atòmics.

### a.2) *Càlcul del moment dipolar:*

La resolució de l'equació de Schrödinger permet trobar la funció d'ona d'un sistema químic. A partir d'aquesta podem extreure tota la informació relacionada amb les propietats d'un compost.

La **Figura 3a** mostra els passos a seguir per fer aquest càlcul pel fluorur d'hidrogen (HF) i obtenir el moment dipolar i la distribució de càrregues dins la molècula. Primer de tot, comencem dibuixant la molècula de HF seguint el procediment descrit a l'apartat anterior i llavors cliquem la fletxa que apareix a la cantonada dreta inferior. A continuació apareix una nova pantalla on ens demana quin programa de càlcul volem utilitzar (en aquesta proposta utilitzarem el *Gaussian*). Llavors tornem a clicar la fletxa de la cantonada dreta i anem cap una tercera pantalla, on ens demana quin tipus de càlcul volem fer. Per optimitzar hem d'obrir el desplegable de l'apartat "Calculations" i seleccionar l'opció "Molecular Energy", sense modificar cap altra apartat. Fem el darrer clic a la fletxa de la cantonada dreta i la plataforma ens enviarà de nou cap al sistema de

cues. A l'apartat de "Status" veurem que el nostre càlcul s'ha executat ("Running"). Una vegada hagi finalitzat ("Complete") hem de clicar a la icona en forma de lupa per veure els resultats. Pot aparèixer la paraula "Failed" si el càlcul no a finalitzat correctament o requereix més de 30 segons per completar-se.

Sota el quadre de dibuix apareixen els resultats distribuïts en diferents categories (**Figura 3b**). A l'apartat "Overview" trobem, entre altra informació, el moment dipolar del HF expressat en Debye. A la secció "Partial Charges" tenim les càrregues parcials (anomenades càrregues de Mulliken) que es generen a l'interior del HF degut a la diferència d'electronegativitat entre els dos elements (1 unitat atòmica de càrrega equival a  $1,6 \cdot 10^{-19}$  C). La distribució de càrregues i vector moment dipolar es poden visualitzar clicant les icones en forma de lupa de cada secció.

a)

The image illustrates the workflow in a computational chemistry software interface. It consists of several interconnected panels:

- Top Left:** A 3D ball-and-stick model of a Hydrogen Fluoride (HF) molecule, with a green fluorine atom and a white hydrogen atom.
- Top Right:** A selection menu for the calculation engine. The "Gaussian" option is selected and circled in orange. The menu lists various engines like Gamess, Molpro, Mopac, NWChem, ORCA, PS4, Quantum Espresso, QChem, and Tinker.
- Bottom Left:** The "Job Options" panel, showing configuration for a job named "HF". The calculation type is "Molecular Energy", the theory is "Hartree-Fock", the basis set is "Routine: 6-31G(d)", the charge is "0", and the multiplicity is "Singlet".
- Bottom Right:** A table showing the execution status of the job. The job "Molecular Energy - Gaussian" is shown as "Running" on 5/26/2018 at 9:22, with a time of 0.0 sec. An orange circle highlights the "Actions" column, which contains a magnifying glass icon.

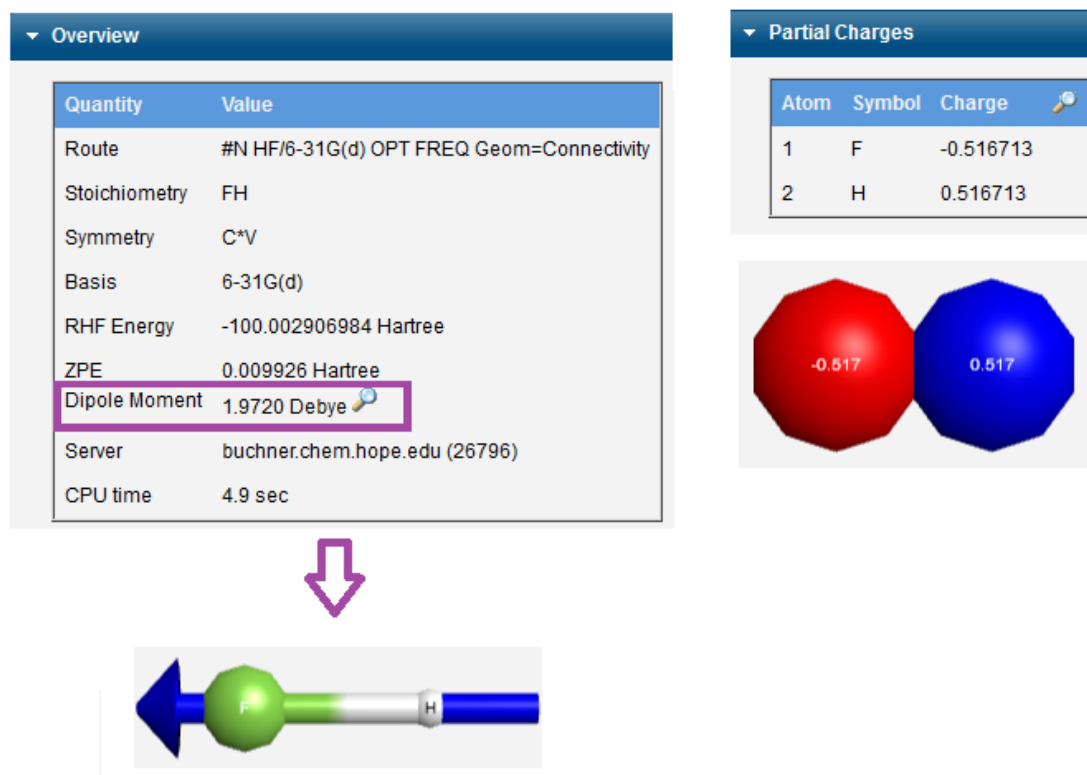
Orange arrows indicate the flow of the process: from the molecule visualization to the engine selection, then to the job options configuration, and finally to the execution status table.

Engine	Description
<input type="radio"/> Gamess	Ab initio and semi-empirical calculations
<input checked="" type="radio"/> Gaussian	Ab initio and semi-empirical calculations
<input type="radio"/> Molpro	Ab initio calculations
<input type="radio"/> Mopac	Semi-empirical calculations
<input type="radio"/> NWChem	Ab initio calculations
<input type="radio"/> ORCA	Ab initio calculations
<input type="radio"/> PS4	Ab initio calculations
<input type="radio"/> Quantum Espresso	Periodic plane wave DFT
<input type="radio"/> QChem	Ab initio calculations
<input type="radio"/> Tinker	Molecular mechanics calculations

Description	Date	Status	Time	Actions
Molecular Energy - Gaussian	5/26/2018 9:22	Running	0.0 sec	

b)



**Figura 3:** a) Procediment per calcular el moment dipolar i la distribució de carregues d'una molècula de HF. b) Resultats del càlcul anterior juntament amb la representació gràfica de la distribució de carregues parcials i el vector moment dipolar.

c) Objectius de l'activitat:

- Explicar la geometria de les molècules en termes de la TEV i el concepte d'hibridació. Relació amb el model RPECV.
- Relacionar la geometria d'una molècula amb la seva polaritat i indicar quins tipus de forces intermoleculares es poden establir.
- Explicar les carregues parcials segons l'electronegativitat dels elements.
- Connectar l'electronegativitat dels elements amb la polaritat del compost.

d) Qüestions:

- A partir del visualitzador molecular determina l'estructura de les molècules següents:  $\text{PCl}_3$ ,  $\text{GeH}_4$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{BH}_3$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2\text{Se}$ ,  $\text{SbF}_5$ ,  $\text{TeBr}_6$ .

- Quina influència tenen els parells d'electrons lliures sobre l'estructura molecular? Compara estructures.
- Busca informació sobre el concepte d'hibridació. Indica el tipus d'hibridació dels orbitals de cada àtom. Justifica la geometria de les molècules.
- Quins tipus d'enllaç covalent (simple, doble o triple) trobem a les molècules anteriors? Justifica-ho a partir de la TEV.
- Calcula les càrregues parcials per a cada molècula. Quina relació hi ha entre la seva magnitud i l'electronegativitat dels elements?
- Calcula el moment dipolar. Quines molècules són polars? A partir de les càrregues parcials justifica la orientació del vector moment dipolar.
- Relaciona la magnitud i direcció del vector moment dipolar amb el tipus de forces intermoleculares que es poden establir en un dímer format per dos molècules iguals. En quin estat físic es trobarà cada substància a temperatura ambient?

e) Presentació dels resultats:

El treball es farà en grups de 2 o 3. Heu de repartir-vos la feina, decidint quines molècules estudia cada membre del grup. Els resultats del treball s'han de presentar mitjançant un informe elaborat per cada grup. L'estructura de l'informe ha de ser la següent:

- Índex: el treball ha d'estar paginat.
- Procediment emprat: explicant com heu utilitzat el visualitzador i, si és el cas, indicant les dificultats que heu tingut.
- Els resultats obtinguts, incloent la resposta a les preguntes plantejades.
- Les conclusions que extrèieu de l'estudi.

L'heu d'entregar durant la classe anterior a l'examen final. A la rúbrica d'avaluació trobareu quins criteris s'han de seguir per fer un informe correcte.