

**Universidad Nacional  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales  
Escuela de Ciencias Biológicas  
Centro de Investigación y Docencia (CIDE)  
Escuela de Química  
Departamento de Física**

**Trabajo Final de Graduación  
Tesis**

Análisis de buenas prácticas en la implementación de dos herramientas computacionales para el abordaje del tema Geometría Molecular en un curso de Química Orgánica a nivel universitario

**Otto Rojas Salas: (206830394- 5576830002653411)**

Tutor:

Lic. Luis Badilla Oviedo

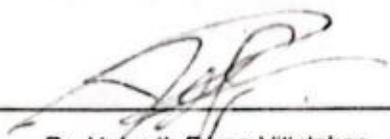
Asesores:

Dra. Susana Jiménez

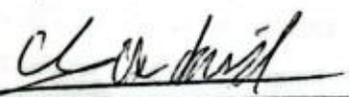
Dr. José Saavedra

**Campus Omar Dengo  
Heredia, Costa Rica  
2023**

Este trabajo de graduación fue Aprobado por el Tribunal Examinador de la Escuela de Ciencias Biológicas de la Universidad Nacional, como requisito parcial para optar por el grado de Licenciatura en Enseñanza de las Ciencias.

  
Dr. Huberth Pérez Villalobos  
Representante, Decano, quién preside

  
Dr. José Pereira Chaves  
Representante de la Dirección

  
Msc. Luis Badilla Oviedo  
Tutor

\_\_\_\_\_  
Dra. Susana Jiménez Sánchez  
Asesora

  
Dr. José Javier Saavedra Arias  
Asesor

Manuel Sandoval  
Dr. Manuel Sandoval Barrantes  
Invitado especial

## Resumen

En este trabajo se analizaron factores pedagógicos que perciben personas estudiantes, docentes e investigadoras al abordar el tema de Geometría Molecular con el fin de explorar el potencial de dos herramientas didácticas de Química Computacional (ORCA y Avogadro) en la enseñanza de la Química Orgánica, se buscó identificar buenas prácticas educativas en torno al uso de estas herramientas para el abordaje de problemas relacionados con la Geometría Molecular desde la docencia y la investigación. El trabajo se realizó bajo un enfoque cualitativo dominante, el tipo de estudio fue un estudio de caso, en el que se aplicaron entrevistas semiestructuradas, un grupo focal y encuestas. La muestra consistió en un docente de Química Orgánica, un investigador de la UNA (Universidad Nacional) y 16 estudiantes de segundo año de la carrera Química Industrial. Los resultados obtenidos de la participación estudiantil demuestran que existen dificultades vinculadas con la síntesis de información y habilidades espaciales en cuanto a la interpretación de fenómenos tridimensionales. Mientras que las personas docentes e investigadoras consultadas coincidieron en que estas herramientas podrían apoyar y facilitar la visualización, así como el desarrollo de prácticas experimentales sobre el tema, a pesar de esto, se logró concluir que al momento del análisis (II Ciclo 2020) en el contexto analizado quizá no existían suficientes experiencias de implementación en la docencia como para poder documentar buenas prácticas educativas sobre el uso de estas herramientas, por lo que se recomienda a otras personas investigadoras interesadas en el tema explorar en otros contextos con mayor grado de implementación tanto a nivel nacional como internacional que permitan promover la transferencia de esta tecnología hacia contextos locales.

## **Agradecimientos**

A la enseñanza pública de mi país, que me brindó una formación de calidad y me acogió para ser parte de ese equipo que forme a las futuras generaciones.

Quiero agradecer a mis padres por siempre alentarme a crecer en mi preparación académica, a la compañía incondicional y sincera que trae el amor, a todos aquellos quienes me compartieron sus ideas y consejos, esa es la retribución más grande que puede tener un investigador.

Agradezco a la Universidad Nacional, por ser gestora de mi inspiración por la ciencia, a todos los profesores que moldearon mi forma de enseñar, así como a mis asesores Luis Badilla, Susana Jiménez y José Saavedra por su tiempo, comprensión y disposición.

**Otto Rojas Salas**

## **Dedicatoria**

En la aventura de crear un trabajo como este, han participado gente maravillosa, las líneas se quedan cortas para agradecer a quienes me brindaron de su conocimiento, consejo y tiempo. Dedico este trabajo a todas esas personas y a mis padres, quienes constituyeron un pilar muy sólido durante mi formación como estudiante, les estoy sumamente agradecido por creer en mí, y darme la posibilidad de navegar en este mar tan vasto y fascinante como son las Ciencias Naturales.

**Otto Rojas Salas**

## Índice de Contenidos

1.1. Antecedentes	12
Ámbito Nacional	16
1.2. Justificación	20
1.3. Problema de la investigación	21
1.4. Objetivos	22
Capítulo II. Marco Teórico	24
2.1. Desarrollo Histórico	24
2.2. Contexto Moderno	28
2.3. Enseñanza de la Química a partir de la Computadora	33
2.4. Estrategias metacognitivas	35
2.5. Aportes de la metacognición a la enseñanza de la Química	36
2.6. ¿Qué es la Química-Computacional y cuál es su enfoque	37
2.7. Habilidades de comunicación en la Química	38
2.8. Aportes de la Química-Computacional a la enseñanza de la Química	38
2.9. Enseñanza de la Geometría Molecular	39
2.10. Estrategias universitarias promovidas para la enseñanza de la Geometría Molecular	41
2.11. Buenas prácticas	43
Capítulo III. Marco Metodológico	45
3.1. Paradigma	45
3.2. Enfoque	46
3.4. Categorías de análisis	47
3.5. Fuentes de Información	50
3.6. Objeto de Estudio	51
3.7. Población y Muestra	51
3.8. Descripción de instrumentos a utilizar	52
3.9. Criterios de Validación	54
3.10. Descripción del análisis a utilizar	54
Capítulo IV. Resultados y análisis	57
4.1. Dificultades afrontadas en la comprensión del tema Geometría Molecular	57
4.1.1 Dificultades afrontadas desde la perspectiva docente	57
4.1.2. Dificultades afrontadas desde la perspectiva del investigador	60

4.1.3. Dificultades afrontadas desde la perspectiva estudiantil	63
4.2.1. Potencial pedagógico que perciben personas docentes, sobre el uso de dos herramientas de Química Computacional, como recurso didáctico para la mediación del tema Geometría Molecular	66
4.2.2. Potencial pedagógico que perciben personas investigadoras, sobre el uso de dos herramientas de Química Computacional, como recurso didáctico para la mediación del tema Geometría Molecular	67
4.2.3. Potencial pedagógico que perciben personas estudiantes, sobre el uso de dos herramientas de Química Computacional, como recurso didáctico para la mediación del tema Geometría Molecular	68
4.3. Buenas prácticas educativas derivadas del uso de la Química Computacional en actividades de investigación, docencia y estudio de fenómenos vinculados con el tema de Geometría molecular	70
4.3.1. Buenas prácticas educativas derivadas del uso de la Química Computacional en actividades de docencia	71
4.3.2. Buenas prácticas educativas derivadas del uso de la Química Computacional en actividades de investigación	73
4.3.3. Buenas prácticas educativas derivadas del uso de la Química Computacional en actividades de autoaprendizaje	73
Capítulo V. Conclusiones y Recomendaciones	79
5.1. Conclusiones	79
5.2. Recomendaciones	80
5.3. Referencias bibliográficas	82
4. Anexos	96

## Índice de figuras

	PÁG.
Figura 1. Funciones del software.....	41
Figura 2. Dificultades para abordar el tema GEOM, según docente, investigador y estudiantes.....	63
Figura 3. Valor potencial de las herramientas computacionales ORCA y Avogadro .....	68
Figura 4. Consideraciones de buenas prácticas al utilizar herramientas computacionales para abordar el tema GEOM .....	74
Figura 5. Fortalezas y preocupaciones en el uso de las herramientas computacionales en el uso de las herramientas computacionales ORCA y Avogadro .....	76

## Índice de cuadros

PÁG

<b>Cuadro 1.1</b> Tipos de instrumentos y muestras utilizadas en la recolección de datos .....	65
<b>Matriz 1.1</b> Potencial de las herramientas computacionales. ....	70
<b>Matriz 1.2</b> Consideraciones de Buenas prácticas al utilizar herramientas computacionales para abordar el tema GEOM.....	72

## **Abreviaturas o acrónimos**

(GEOM): Geometría Molecular

(TICS): Tecnologías de la Información y Comunicación.

## Resumen

En este trabajo se analizaron factores pedagógicos que perciben personas estudiantes, docentes e investigadoras al abordar el tema de Geometría Molecular con el fin de explorar el potencial de dos herramientas didácticas de Química Computacional (ORCA y Avogadro) en la enseñanza de la Química Orgánica, se buscó identificar buenas prácticas educativas en torno al uso de estas herramientas para el abordaje de problemas relacionados con la Geometría Molecular desde la docencia y la investigación. El trabajo se realizó bajo un enfoque cualitativo dominante, el tipo estudio fue un estudio de caso, en el que se aplicaron entrevistas semiestructuradas, un grupo focal y encuestas. La muestra consistió en un docente de Química Orgánica, un investigador de la UNA (Universidad Nacional) y 16 estudiantes de segundo año de la carrera Química Industrial. Los resultados obtenidos de la participación estudiantil demuestran que existen dificultades vinculadas con la síntesis de información y habilidades espaciales en cuanto a la interpretación de fenómenos tridimensionales. Mientras que las personas docentes e investigadoras consultadas coincidieron en que estas herramientas podrían apoyar y facilitar la visualización, así como el desarrollo de prácticas experimentales sobre el tema, a pesar de esto, se logró concluir que al momento del análisis (II Ciclo 2020) en el contexto analizado quizá no existían suficientes experiencias de implementación en la docencia como para poder documentar buenas prácticas educativas sobre el uso de estas herramientas, por lo que se recomienda a otras personas investigadoras interesadas en el tema explorar en otros contextos con mayor grado de implementación tanto a nivel nacional como internacional que permitan promover la transferencia de esta tecnología hacia contextos locales.

## **Capítulo I.**

### **1. Introducción**

El avance de las tecnologías multimedia en la educación ha permitido recrear situaciones dinámicas en la Enseñanza de la Química promoviendo el uso del recurso computacional en la práctica y experimentación de la Química como disciplina. En este contexto, la simulación molecular se ha convertido en una técnica valiosa para estudiar sistemas químicos. Este trabajo se enfocó en explorar factores pedagógicos vinculados con la implementación de herramientas de Química computacional específicamente los programas ORCA y Avogadro para la mediación pedagógica del tema de Geometría Molecular en un contexto de enseñanza universitario, la existencia de estas tecnologías emergentes supone la disponibilidad de nuevas herramientas disponibles para docencia e investigación. A nivel internacional, existen experiencias que han destacado la importancia de incorporar herramientas tecnológicas en la Enseñanza de la Química para contribuir a la comprensión y aplicación de los conceptos a nivel práctico. Mientras que, en el ámbito nacional, diversas instituciones académicas también han generado resultados de investigación relacionados con el uso de estas herramientas para el estudio de fenómenos vinculados con la geometría molecular y sus aplicaciones, por lo que estas experiencias podrían interpretarse como un escenario favorable para documentar lecciones aprendidas y recomendaciones que ayuden a transferir el aprovechamiento de estas tecnologías hacia diversos contextos de formación. A continuación, se describen resultados de investigación asociados con experiencias de uso de estas tecnologías en el ámbito nacional e internacional.

#### **1.1. Antecedentes**

##### **Internacionales**

En Madrid un trabajo de Barrantas (2016), tuvo como propósito estudiar el papel de los orbitales atómicos en la educación química, analizando casos en el uso de representaciones gráficas, las cuales son muy importantes en toda la Química y aún más en estos modelos, que tienen un fuerte componente visual, analógico y metafórico. Para este autor, las representaciones gráficas en la ciencia no tienen un papel auxiliar, sino que son parte integral del discurso científico, los profesores deben ser muy claros, cuando utilizan los diversos

modelos que la Química tiene para la mediación de sus temas, en sus resultados se describe como muy valioso el uso de representaciones gráficas, debido a que le brindan un carácter realista y explícito a la disciplina.

Amador y Olvera (2009), desde la Universidad Autónoma de México, reportaron una experiencia didáctica aplicada en un curso básico de Química Cuántica, en este emplearon un disco compacto (CD), en el que compilaron un sistema operativo y un programa; ambos softwares utilizados eran de carácter libre. La idea del (CD), era evitar instalaciones y problemas de compatibilidad de las máquinas, de esta manera todas las aplicaciones funcionaban ejecutándose desde el disco.

El objetivo fue brindar a los jóvenes un software de Química Computacional que se pudiera emplear fácilmente en el curso. Los resultados obtenidos demostraron que esto es posible bajo un empleo limitado de cálculos sencillos. Las conclusiones obtenidas fueron que, en la mayoría de los casos; estos métodos de experimentación sirven como una alternativa sencilla, práctica, moderna y rápida de realizar cálculos en el salón de clase.

Marzocchi, Cagnola, D'Amato, Vanzetti y Leonarduzzi (2010), en su trabajo, Las TICs en la enseñanza de la Química, menciona que desde hace un tiempo se reconoce la importancia decisiva de la computadora en la transformación de la práctica de esta, así como la simulación molecular para comprender mejor lo que pasa a nivel atómico. Su objetivo fue promover la incorporación de TICs de modelado molecular, proponiendo líneas de trabajo en docencia, investigación y servicios. Entre sus conclusiones resalta que, esta nueva tendencia de incorporar software de modelado molecular provocará un alto impacto en la educación, a tal punto que sentará las bases para una necesaria actualización académica.

Siguiendo con esta misma línea Marzocchi, Vilchez, D'Amato, Marino y Vanzetti (2012), realizaron una investigación en la que incorporan software de modelado molecular, en la enseñanza universitaria de la Química. Su objetivo era informar los logros alcanzados en la incorporación de herramientas de visualización y modelado molecular, en el inicio de carreras de grado de la Facultad de Ingeniería Química de la Universidad Santa Fe en Argentina. En sus resultados lograron determinar que los alumnos llevan casi la mitad de su vida empleando diferentes softwares, lo que implica que poseen experiencia general para emplear simulaciones y visualizaciones moleculares digitales.

Ugliarolo y Muscia (2012), también en Argentina, implementaron el programa (ChemBio3DUltra v11.0), el objetivo del trabajo fue la implementación de tecnología multimedia, para contribuir a elevar la calidad del proceso de enseñanza en relación con la enseñanza tradicional, al posibilitar que el estudiante interactúe con un programa de simulación. Según su análisis la percepción espacial es una de las dificultades que los estudiantes reportan con mayor frecuencia. Estos investigadores, mediante una encuesta, indagaron sobre la utilidad de esta tecnología multimedia.

Su reporte de resultados con respecto a la utilidad de la simulación fue muy positivo, ya que un 94% de los encuestados evidenció que el uso de la simulación fue de utilidad para la comprensión del tema, mientras que un 84% de los alumnos revela que la utilización del programa resultó pertinente para el desarrollo de la clase. En el trabajo concluyen que el uso de herramientas informáticas resulta útil para la comprensión del tema estereoquímica.

En un trabajo realizado en Chile Quezada, Varela, Frías y Morales (2016), implementaron un estudio haciendo uso del software Avogadro como visualizador y constructor de moléculas, con alumnos de primer año de Odontología en la asignatura de Química General y Orgánica. El objetivo de dicho trabajo consistió en comparar el tiempo en que estos estudiantes demoraron en asignar la quiralidad de los carbonos en moléculas planas (2D), en contraste con las modeladas en el programa Avogadro.

Los resultados evidenciaron que los estudiantes demoraron menos tiempo en asignar la quiralidad de los carbonos cuando se hacía uso del software Avogadro, que, sin él, haciendo uso del software el tiempo de respuesta para identificar la quiralidad de dichos átomos se lograba reducir a la mitad.

En el Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas de la Habana en Cuba, Gamboa et al. (2017), gestó un trabajo, cuyo objetivo fue describir el desarrollo de un Sistema de Visualización Molecular (SVM) de estructuras químicas, que permitiera mejorar la representación de los modelos estructurales en los cursos de Química General; para ello utilizaron dos programas de cómputo, el Hyperchem y Chemcraft.

La metodología que desarrollaron estuvo compuesta por modelos de estructuras construidas a partir de la utilización de programas que emplean las herramientas que brinda la Química Computacional. Se utilizó un cuestionario anónimo con una escala progresiva de opinión. El sistema se evaluó en cuatro grupos de estudiantes, de tres carreras distintas en

dos universidades cubanas, durante dos cursos escolares con resultados satisfactorios, pues más del 90% de los encuestados están totalmente de acuerdo que las imágenes del nuevo sistema son más ilustrativas que las disponibles anteriormente, lo que les ayudó a comprender mejor el tema de estudio.

En Bogotá una publicación académica de Patiño (2017), buscó dar a conocer la Química Computacional entre estudiantes y profesores de Química, esto en educación básica o primeros semestres de educación superior. En su objetivo plantearon que, a partir del modelamiento de estructuras en tres dimensiones y la ejecución de cálculos sencillos, el estudiante puede determinar propiedades químicas y físicas de algunos compuestos.

En el proyecto se estudiaron teóricamente las propiedades termodinámicas de indicadores ácido-base y ácidos orgánicos de bajo peso molecular, utilizando los paquetes computacionales GAMESS, MOPAC Y GAUSSIAN. A pesar de que estos autores reprodujeron la metodología exactamente como fue reportada en la bibliografía, no obtuvieron los mismos resultados. En este trabajo se encontró que los modelos teóricos empleados no son los indicados para realizar el cálculo de las constantes termodinámicas para este tipo de compuestos, a pesar de que en literatura se habían reportado resultados utilizando dichos modelos de teoría. Como conclusión sugieren hacer una búsqueda exhaustiva del tipo de sistemas que se pueden estudiar computacionalmente, así como el tipo de teoría que mejor se le adecúa a dicho estudio, estos autores recomiendan utilizar ejemplos sencillos cuando se quiera dar a conocer la química computacional en ambientes educativos.

En Colombia la investigación de Chivatá y Cifuentes (2017), exploró la problematización didáctica de la Geometría Molecular. El objetivo de estos investigadores fue favorecer una caracterización didáctica en profesores de Química en formación, mediante el desarrollo de situaciones que generan problemas en la enseñanza de la Geometría Molecular. En su trabajo se aplicaron cuestionarios y entrevistas con el fin de recopilar datos sobre conocimiento científico, conocimiento didáctico del contenido, así como el conocimiento histórico y epistemológico de la geometría molecular. En sus resultados pudieron evidenciar como muchos de los errores y vacíos conceptuales son producto de un desconocimiento histórico de los contenidos del tema, atribuido a un currículo que no da espacio a un estudio detallado de la historia de la ciencia. Por último, entre sus conclusiones

se resalta la importancia en el desarrollo de nuevas temáticas que permitan mejorar las condiciones prácticas y teóricas del tema Geometría molecular.

En resumen, los estudios mencionados destacan el impacto positivo del uso de herramientas computacionales y software especializado en la enseñanza de la Química. Estas tecnologías, como las representaciones gráficas, los programas de simulación y modelado molecular, y el uso de software interactivo, mejoran la comprensión de los conceptos químicos y agilizan los cálculos y experimentos en el aula. Además, se resalta la importancia de incorporar las tecnologías de la información y la comunicación en la educación química para actualizar los métodos de enseñanza y mejorar la calidad del aprendizaje.

### **Ámbito Nacional**

Al indagar el panorama de la educación costarricense, sobre el uso de herramientas computacionales, los resultados sugieren que aún no se están integrando de manera efectiva. Como se describió en el panorama internacional, el uso de estas herramientas representa una tendencia de la Enseñanza de la Química, si bien en Costa Rica se tienen recursos disponibles, la articulación de estos sigue siendo escasa. Según Rodríguez y Pérez (2008), citado en Rodríguez (2009), en los años setenta surgieron en Costa Rica, una serie de programas educativos que trataban de preservar la unidad de la ciencia, introduciendo ideas que recuperen el trabajo en los laboratorios.

El Programa Nacional de Información Educativa (PRONIE) nace en 1987 y es liderado por una asociación público-privada entre el Ministerio de Educación y la Fundación Omar Dengo, si bien este programa se enfoca en niveles de primaria y secundaria, es importante valorar la importancia que tiene en cuanto a incentivar el desarrollo lógico y crítico, además de fortalecer en la enseñanza los conceptos de programación y las estrategias de resolución de problemas que involucra el pensamiento computacional. Esta propuesta se vale de la tecnología como un recurso para la solución de problemas, y además forman un papel muy importante tanto para su currículum, como para el contexto tecnológico que se vive hoy en día (Jara, Hepp, Rodríguez y Claro, 2019).

Ante la revolución tecnológica que estamos viviendo, es fundamental cambiar la forma en que percibimos las nuevas tecnologías y aplicaciones de la ciencia, empezando desde los niveles más básicos, hasta los centros de formación universitaria.

Ñurinda (2017), en su trabajo Mediación educativa en los entornos virtuales de aprendizaje, describe las necesidades e intereses del estudiantado de educación superior, con respecto a la virtualización del aprendizaje. Para esta autora la demanda de virtualización institucional es consecuente con los avances tecnológicos y sociales, además, según describe, la falta de conocimiento del personal docente sobre el uso de las TIC radica principalmente en la carencia de bases epistemológicas y de conocimiento de la teoría de educación. A pesar de los avances tecnológicos de hoy en día, la educación aún no resuelve poder tener recurso humano calificado para crear nuevos escenarios virtuales e innovadores. Terminan concluyendo que, para obtener resultados de calidad se requiere una visión integradora de los actores principales del proceso de enseñanza-aprendizaje.

Gracias a la idea de un grupo visionario de docentes del Instituto Tecnológico de Costa Rica (TEC), se desarrolla desde hace más de 20 años en esta institución, el congreso Internacional sobre la Enseñanza de la Matemática Asistida por Computadora. Esta es una actividad que nace en la escuela de matemática y que pretende construir espacios de reflexión académica sobre esta materia y su proceso de formación, todo esto desde el contexto de los elementos de apoyo que provee la tecnología.

En la VII edición de este congreso, Azofeifa (2011), realizó un trabajo sobre el acceso y uso del software Graphing Calculator (GC), en el cual el autor muestra algunas de las bondades del software (GC), así como algunos posibles usos en los procesos de enseñanza y aprendizaje de la matemática. Este tipo de software permite visualizar figuras geométricas en dos, tres y cuatro dimensiones. Para esto se desarrolló un taller que pretendía mostrar las herramientas básicas para su uso, algunas sugerencias y recomendaciones para la docencia, todo esto con el fin de reforzar los procesos de enseñanza y aprendizaje de la matemática.

En este congreso organizado por el (TEC) Palencia, Goris, y Carrillo (2011), ejecutaron una propuesta en el que utilizaron un software libre llamado *JClic*, con el cual se pueden generar secuencias lúdicas para auxiliar el aprendizaje en diversas materias. Sus objetivos fueron conocer el software *JClic* y desarrollar un proyecto con una secuencia de actividades de aprendizaje. La propuesta fue ejecutada mediante un taller donde se exponen algunas maneras de crear, organizar y manipular paquetes con este software. El taller fue dirigido para profesores y estudiantes que tengan conocimientos básicos sobre el manejo de texto e imágenes en computadora y, preferiblemente pero no necesariamente, objetos

multimedia. Su metodología incluye una guía de descarga, los pasos necesarios para elaborar un proyecto, así como una serie de actividades que permiten concretar el proyecto.

En un trabajo de Arroyo y Viquez (2011), se implementó el software Geogebra para modelar funciones reales de variable real. El objetivo primordial de este trabajo era ofrecer a los docentes una guía didáctica que sirviera de apoyo para enseñar funciones, apoyada en la modelación y el software GeoGebra. Este tipo de soporte tecnológico favorece el proceso de enseñanza y aprendizaje de este tema. Para estos autores las herramientas tecnológicas desarrollan habilidades en el estudiante y le permite adquirir las competencias necesarias para enfrentarse a problemas y a la toma de decisiones. Para Villa (2010) (como se citó en Arroyo y Viquez 2011), el peso importante de la modelización recae en la ayuda para los estudiantes, al facilitar la comprensión de los contextos en los que se desenvuelve la enseñanza de la Matemática.

En un estudio realizado por Padilla, Brooks, Jiménez y Torres (2015), se analizó la medida en las dimensiones de las competencias científicas en los programas de estudio de Biología, Física y Química, mediante una investigación cualitativa, utilizando el tipo de estudio hermenéutico. Las técnicas utilizadas para recolectar la información fueron la observación, el análisis de contenido, y la entrevista. En este trabajo se recoge la opinión de personas expertas en el ámbito de desarrollo científico-tecnológico, y hay un consenso en que la educación en las disciplinas científicas impartidas en el país a nivel de secundaria, no están desarrollando las dimensiones acordes a las políticas nacionales. En su análisis aducen que hay un contexto difícil de superar, en el que se suman problemáticas como, falta de infraestructura, el poco material didáctico, escaso equipo de laboratorio, docentes casi sin acceso a actualización y la falta de un currículo que vaya acorde con las políticas de desarrollo del país, además entre sus conclusiones se logró constatar que, de los programas analizados, el de Química es el que presentaba en menor medida las dimensiones de las competencias científicas.

Castro y Rodríguez (2017), en su proyecto de Maestría se plantearon como objetivo, determinar el uso y presencia de Tecnologías de Información y Comunicación en el proceso enseñanza y aprendizaje, en tres colegios del país. Su objetivo fue conocer acerca de las tecnologías de la información y sobre las implicaciones que estas tienen. Los resultados fueron recolectados gracias a cuestionarios dirigidos a los docentes y estudiantes, en estos se

reportan recursos como: computadoras portátiles, pizarras electrónicas, acceso a internet por medio de fibra óptica y software educativo. Por último, concluyen que los instrumentos aplicados reflejan ventajas o beneficios en el desarrollo de mediación pedagógica del proceso enseñanza y aprendizaje.

En un artículo elaborado por Chacón, Saborío y Nova (2016), se realizó una investigación cuyo objetivo fue identificar cuáles son los materiales didácticos con los que cuenta el profesor para las lecciones de Química, en dos colegios académicos de Costa Rica. La información fue recopilada mediante técnicas e instrumentos como cuestionarios, entrevistas y observación descriptiva. En sus resultados realizaron una triangulación de los tres instrumentos utilizados, y reportan que uno de los colegios cuenta con una amplia gama de recursos para llevar a cabo actividades experimentales con sus estudiantes, mientras que por otro lado el colegio académico no cuenta ni con laboratorio, ni instrumentos adecuados para actividades. Entre sus conclusiones, lograron constatar que la población estudiantil no se encuentra del todo satisfecha con respecto a la forma en que reciben sus lecciones de Química, ya que detrás de estas no existe un dinamismo.

Rojas (2018), en su investigación, desarrolló una propuesta didáctica para facilitar el fortalecimiento de competencias tecnológicas de los docentes en el Colegio Superior de Señoritas. Dicho autor empezó por realizar un diagnóstico sobre las competencias tecnológicas que poseen los docentes. Con estos resultados se planteó determinar las necesidades tecnológicas que tienen los educadores del Colegio y logró encontrar que, los profesores de este centro educativo cuentan con competencias tecnológicas en las áreas de información, comunicación, creación de contenido, seguridad y solución de problemas; a un nivel básico. Gracias al diagnóstico consiguió determinar que los docentes requieren de procesos de capacitación, para el fortalecimiento de las cinco áreas de competencias tecnológicas.

En el trabajo de revisión general sobre el ámbito nacional e internacional, permitió poner en contexto las líneas de investigación asociadas a este tema. Además, logró identificar los vacíos asociados al uso de herramientas computacionales en el área específicamente de la enseñanza de la Química a nivel país, por otro lado, esta búsqueda sirvió de ejercicio para integrar nuevos aspectos que podrían enriquecer diversos aspectos del trabajo.

## 1.2. Justificación

El constante desarrollo tecnológico y los factores socioeconómicos que influyen al sistema educativo y las personas que lo integran, demandan la incorporación de soluciones que contribuyan en la adaptación del proceso de enseñanza-aprendizaje a las nuevas realidades, esto conlleva la búsqueda y aplicación de mecanismos de sistematización de lecciones aprendidas y transferencia tecnológica que permitan brindar acompañamiento a los usuarios finales interesados en su aplicación en los diversos escenarios de formación.

Este trabajo se enfocó en el uso de herramientas de Química Computacional en la Enseñanza de la Química para el abordaje del tema de Geometría Molecular. Desde el punto de vista teórico, este se considera un tema fundamental para la Enseñanza de la Química, ya que permite la comprensión de propiedades fisicoquímicas de la materia a nivel molecular. A pesar de su importancia, la mediación pedagógica de este contenido se ha limitado a presentaciones magistrales basadas en representaciones bidimensionales y estáticas. Por lo que se considera que la implementación de herramientas que habiliten a la persona estudiante a experimentar a través de cálculos computacionales y a visualizar e interactuar con representaciones tridimensionales de las moléculas podría ser beneficioso para su proceso de aprendizaje.

Con base en lo anterior, esta investigación busca explorar y documentar experiencias y opiniones de estudiantes, investigadores y docentes sobre el uso de herramientas de Química Computacional en sus actividades de índole académico, de tal manera que permita identificar si existen buenas prácticas educativas que puedan ser comunicadas a las personas interesadas en aprovechar estos recursos tecnológicos en su quehacer educativo.

Diversos trabajos como los de (Cuesta y Meneses 2020 o Valles, Rosales, Serrato y Farías, 2014, así como el de Suárez y Betancourt 2023) ya han demostrado las potencialidades de estas herramientas para personas docentes, investigadoras y estudiantes ya que proporcionan la posibilidad de contar con diversos formatos para realizar demostraciones experimentales durante las clases de Química, realizar varias iteraciones de un mismo experimento ahorrando tiempo y recursos así como, autogestionar su aprendizaje a través del acceso gratuito a los programas.

Realizar este trabajo en el marco de un trabajo final de graduación de la carrera Enseñanza de las Ciencias de la escuela de Ciencias Biológicas de la UNA, se torna importante ya que la información generada permitiría contribuir en la consecución del objetivo de Desarrollo Sostenible número cuatro sobre educación de calidad, por su parte, de acuerdo con el Estado de la Educación (2021), las competencias digitales docentes en los niveles de educación general básica aún se encuentran en niveles iniciales y este tipo de estudios exploratorios podrían generar resultados de utilidad para generar experiencias educativas vinculadas con el aprovechamiento de este tipo herramientas hacia estos escenarios.

### **1.3. Problema de la investigación**

La motivación inicial de este trabajo de investigación fue explorar las potencialidades de las herramientas de Química Computacional como recurso didáctico para la mediación pedagógica del tema Geometría Molecular en experiencias de aprendizaje vinculadas con la Enseñanza de las Ciencias, a partir de dicho propósito se identificó la necesidad de documentar buenas prácticas educativas tomando como punto de partida su aplicación en el contexto universitario en actividades relacionadas con la docencia y la investigación de tal forma que en experiencias posteriores fuera posible llevarlas a los niveles más básicos del sistema educativo formal.

La comprensión del tema geometría molecular representa un elemento clave para el abordaje de temas posteriores que se estudian tanto a nivel de secundaria como de asignaturas de Química General, Química Orgánica o Bioquímica que forman parte de los programas de estudio de la carrera Enseñanza de las Ciencias y de otras carreras de ciencias básicas o ingenierías impartidas en la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la UNA.

A nivel internacional, existen experiencias documentadas como la de Peñaloza, Reinoso y Pérez (2016), quienes describen que la Química en los entornos virtuales “son procesos de enseñanza y aprendizaje los cuales se desarrollan fuera de un espacio físico, es decir, en un entorno virtual ya sea informático o computacional, para facilitar la enseñanza y el aprendizaje acerca de la química en cualquier tema que se trate, ya sean teóricos o prácticos.

Para Oyarzún, Moya y Navarro (2022) la Química Computacional es una herramienta que tiene una amplia aplicabilidad al utilizar diversas metodologías para obtener información teórica sobre la estructura química de los compuestos y sus mecanismos de reacción. La información que generan es valiosa y puede ser contrastada con datos experimentales, ofreciendo la posibilidad de comprender reacciones complejas a nivel molecular y un abanico de nuevas formas experimentales.

Estas vivencias, han demostrado que el uso de estas herramientas contribuye a la comprensión de fenómenos que requieren visualizar las estructuras químicas mediante representaciones tridimensionales por lo que tiene la potencialidad de fortalecer la componente experimental de esta disciplina tanto en investigación como en docencia.

Como parte del ejercicio académico que representa este trabajo, se identificaron dos de estas herramientas computacionales de uso gratuito (Avogadro y ORCA) para ser valoradas como recursos didácticos en escenarios de aprendizaje experiencial de asignaturas de Química.

Por lo tanto, se planteó la siguiente pregunta de investigación:

¿De qué manera contribuyen las estrategias didácticas basadas en el uso de herramientas de Química Computacional a la comprensión de fenómenos vinculados con el tema Geometría Molecular en la docencia y la investigación en la UNA?

## **1.4. Objetivos**

### **1.4.1. Objetivo General**

- I. Analizar el uso de dos herramientas de Química computacional en el abordaje del tema de Geometría Molecular mediante la documentación de dificultades, potencialidades y buenas prácticas que perciben personas vinculadas con actividades de docencia e investigación en la UNA para su aprovechamiento en la Enseñanza de la Química.

#### **1.4.2. Objetivos Específicos**

- I. Identificar las principales dificultades que enfrentan un docente, un investigador y un grupo de estudiantes de educación superior, para comprender el tema Geometría Molecular.
- II. Determinar el potencial pedagógico de dos herramientas de Química Computacional como recursos didácticos para la mediación del tema Geometría Molecular.
- III. Establecer buenas prácticas educativas derivadas del uso de la Química Computacional en actividades de investigación, docencia y estudio de fenómenos vinculados con el tema de Geometría molecular.

## Capítulo II.

### 2. Marco Teórico

#### 2.1. Desarrollo Histórico

A principios de los años 60, las computadoras comenzaron a emplearse de manera más activa, principalmente en las universidades norteamericanas. Como se citó en Ríos, López, Lescano, Hernández y García (2007), Patrick Suppes, un filósofo y matemático de la Universidad de Stanford, en un artículo de 1996 para la revista popular *Scientific American*, resumía las expectativas e ideas de ese momento, y sostenía que la verdadera función revolucionaria de las computadoras en la educación se debía a la nueva área de la instrucción asistida por computadora. Este filósofo y matemático, predecía que millones de escolares tendrían acceso a algo de lo que gozaba el hijo de Filipo de Macedonia, Alejandro, los servicios personales de un tutor tan bien informado e idóneo como Aristóteles (p.1).

El aprendizaje asistido por computadora nace en EE.UU. a comienzos de los años 60, de la mano del psicólogo Sidney Pressey, quien en 1924 intuyó sobre la revolución que podría tener lugar en el campo de la Enseñanza, si se vinculan el uso de las máquinas en el proceso de aprendizaje. En sus experiencias, Sidney sometía el estudiante a una serie de pruebas programadas, que no sólo le daban un indicativo de la calidad del aprendizaje individual, sino que, al seguirlas, el alumno consolidaba y perfeccionaba sus conocimientos empíricos (Vaquero, 2010).

Según Benjamin (1988), citado en Álvarez-Montero, Mojardin-Heraldez y Rocha-Ruíz (2017), Sydney Pressey predijo en 1933, una revolución industrial en la educación, gracias al uso de las máquinas con el siguiente resultado: “El trabajo en las escuelas del futuro estará maravillosa y simplemente organizado, de tal manera que se ajuste automáticamente a las características individuales de los estudiantes, durante el proceso de aprendizaje” (p.3). Estas son líneas que podrían adecuarse a unos pocos contextos, por lo que, generalizar sería muy poco precavido. Las computadoras brindaron en aquel tiempo, así como actualmente, una serie de aportes muy significativos, tales como, una mejora en el aprendizaje y diversos cambios en el sistema educativo. Pero, si se habla de computadoras, se debe tener en cuenta el uso de aplicaciones o programas informáticos, si lo que se quiere es alcanzar un conjunto

de uno o más objetivos educativos; estas aplicaciones tienen características particulares, y su óptimo desempeño en la educación, se denota dependiendo del enfoque pedagógico que se les dé, ya que así se determinará la efectividad de su influencia.

En 1988 el bioquímico y escritor Isaac Asimov en una entrevista televisiva, describía que, para un futuro cercano se visualizaba una revolución en el conocimiento y predecía un desarrollo nunca visto en el aprendizaje y el acceso a la información, no solo para niños y jóvenes sino, para todo el mundo. Sin saberlo, este gran escritor describe el gran impacto que tendría el actual Internet (Rodríguez, 2014).

El Internet es la red de redes donde reside toda la información, siendo un entorno de aprendizaje abierto, por otro lado, está la web, la cual se tiende a confundir con el término de Internet, pero que no es sinónimo de este último. La web es un subconjunto de Internet, que contiene información a la que se puede acceder usando un navegador (Latorre, 2018, p.1.) Para Latorre (2018), la web es un “organismo vivo” y, como tal, ha evolucionado con el pasar de los años.

La aparición del término web 2.0 en el 2004, supone una renovación de la didáctica, ya que es preciso analizar la profundidad de los principios que soportan los nuevos entornos de aprendizaje, los cuales se apoyan en tecnologías que permiten que el usuario pueda interactuar y aprender de manera colaborativa. El conectivismo es un concepto que se postula como la cuarta teoría del aprendizaje, y la clave de esto son las conexiones y sinergias que tiene con la web 2.0. Para quienes defienden el conectivismo, este supone una superación de los tres modelos anteriores (conductista, cognitivista y constructivista) que no tienen en cuenta el aprendizaje producido fuera de los individuos, ni la capacidad de describir cómo es que ocurre el aprendizaje cuando se trabaja de manera colaborativa (p.1). El conectivismo critica los modelos anteriores debido a que algunos de sus tipos de enseñanza son excesivamente academicistas, tanto para secundaria como para universidad, aunado al desarrollo de conceptos abstractos sin vínculos aparentes con el mundo real y profesional (Sobrino, 2014).

Según Echeverría y Martínez (2018), estamos siendo partícipes del nacimiento de la cuarta revolución industrial o (4.0), la cual está transformando las relaciones productivas, económicas y comerciales. Las aptitudes que demanda esta nueva revolución comprenden

competencias técnicas, metodológicas y sobre todo participativas. La mejor manera de enfrentar estas transformaciones es mediante una educación que pueda responder a la necesidad ineludible de actualizar y mejorar las competencias de cada vez mayor número de personas y además poder impactar a lo largo de sus vidas. Para Parker (2015), (como se citó en Echeverría y Martínez, 2018), “todo apunta a que en los años venideros la destrucción de profesionales va a ser mayor que la capacidad de nuestra sociedad para crear nuevos puestos de trabajo” (p.4), todo esto aunado a la tasa de desempleo que se proyecta para cubrir ciertos puestos de trabajo. La prioridad de mejorar talentos será un requisito en muchas empresas, el impacto de la tecnología necesitará una actualización por parte de los trabajos a lo largo de toda su vida.

Según Paredes (2018), la integración de computadores en la enseñanza trata de optimizar el proceso de aprendizaje, pero no sólo esto, sino también incursiona en la mejora de la calidad de vida, el orden social, e impacta en gran medida el sistema productivo de las comunidades. Algunos países, en América Latina, apostaron a la integración de computadoras en el proceso de formación educativa, como una iniciativa que permitiera acabar con las brechas digitales, favoreciendo la inclusión y reportando mejoras considerables en la vida de las familias, estudiantes y participantes.

En Costa Rica un proyecto impulsado por el IMAS, MICITT y SUTEL en el marco del Gobierno del Bicentenario (2018-2022), pretende reducir la brecha digital, facilitando las mismas oportunidades a familias en situación de pobreza, para que tengan acceso a una computadora y puedan utilizar el internet de manera segura. La meta por cubrir es de 140, 496 familias, y su impacto juega un papel muy importante para el manejo correcto de la información, ya que esta es importante para el estudio, el trabajo y en general para la vida (IMAS-MICITT-SUTEL,2018).

The Global Information Technology Report (2015), es un informe que destaca las características de los países en relación con la introducción y uso de tecnologías en la sociedad, en uno de sus índices se evalúa el porcentaje de hogares con acceso a internet, y Costa Rica en el periodo 2015, era colocado en el puesto 49 de 143 países, dos puestos por encima de Panamá, quien fue colocado en el puesto 51. La puntuación en el índice de

preparación en red para Costa Rica es de 4.4 con una tendencia de crecimiento, mientras que el país líder es Singapur con un índice de 6.0.

Por otro lado, se puede consultar el puesto de Costa Rica con respecto al ancho de banda internacional de internet. Para el período 2015 Costa Rica se encontraba en el puesto 36, catorce puestos mejor que Panamá, el cual se colocaba en el puesto 50. Esto evidencia un interés profundo del gobierno costarricense por impulsar una política tecnológica en educación, que minimice las brechas digitales y además de ello posicionar a Costa Rica como un país altamente competente en el manejo de tecnologías digitales (World Economic Forum, 2012.)

Siguiendo con la línea de política tecnológica en educación, es importante tomar en cuenta un punto citado por García, Burgos, Estepa y Jaspez (2019), sobre que un plan de política tecnológica en educación no tiene que ver sólo con hardware y conectividad, sino fundamentalmente con la integración de las tecnologías en los programas educativos (p.2-3). Según Vanderlinde, Braaka y Dexter (2012), citados en García, Burgos, Estepa y Jaspez (2019), un plan de política tecnológica en educación debería estar basado en una visión compartida sobre la enseñanza y el aprendizaje, y en cómo las tecnologías pueden integrarse en conjunto. Es importante tomar en cuenta que, en el proceso de innovar en educación, se requiere valorar los diferentes actores y elementos que pueden jugar un papel crucial. Algunos de los elementos que se pueden considerar son los siguientes:

- Equidad
- Participación
- Transparencia
- Conectividad
- Evaluación y diseño del software
- Monitorización y evaluación
- Determinación del hardware
- Producción de contenidos digitales

Para los investigadores García, Burgos, Estepa y Jaspez (2019), existen diversas problemáticas asociadas a las capacidades digitales con las que se enfrentan los profesores, como personas encargadas en el proceso de mediación pedagógica. Dentro de los obstáculos

o barreras que plantean los profesores están: acceso, tiempo, apoyo, recursos, falta de confianza y resistencia al cambio.

El uso de tecnologías en la educación es un fenómeno cada vez más recurrente y según Tamim et al. (2011) (como se citó en Mojardín-Heraldez y Rocha-Ruiz, 2017), se rescata que, en 1913, Thomas Edison hizo la siguiente afirmación “los libros pronto serán obsoletos en la escuela y nuestro sistema escolar cambiará completamente dentro de 10 años”. Aunque los libros siguen estando presentes, ya tienen competidores con mejores prestaciones en el aprendizaje educativo, y en cuanto al cambio del sistema escolar, cada vez se aportan más recursos tecnológicos que se prestan para ser explotados en la enseñanza como tal.

## **2.2. Contexto Moderno**

Algunas investigaciones que han analizado el impacto de las Tecnologías de la Información y las Comunicaciones (TIC), son los estudios hechos por Cristia, Czerwonko y Garofalo para la UNESCO en los periodos (2011; 2013; 2014) (como se citó en Lugo, Briceño y González 2018). En estos resaltan la idea de desarrollar estrategias encaminadas a formar a los docentes y acompañar sus innovaciones educativas en el aula; con la ayuda de las TIC, se puede incidir en el aprendizaje, vinculando la diversidad de herramientas de hoy en día, al proceso de formación de los estudiantes. Según Lugo, Briceño y González (2018), es importante considerar dos puntos referentes a la formación de profesores:

- El docente haciendo uso de las TIC puede mejorar las actitudes de los estudiantes, incitando al aprendizaje autónomo.
- El docente debe contribuir al desarrollo de competencias científicas de sus estudiantes, integrando las TIC como una herramienta potente para acercar a los estudiantes a la experimentación, simulación, modelización e incluso predicción.

Es por todo esto que, entregar tecnología no mejora la calidad educativa, ya que el verdadero cambio consiste en crear un modelo que incide en la mejora de las prácticas de enseñanza, así como brindar una adecuada formación de los docentes, ya que sin esto el impacto no será tan significativo.

El Proyecto Regional de Educación para América Latina y el Caribe (PRELAC), reconoce que la educación es un bien público y un derecho humano fundamental, de los que

el conjunto de la sociedad es responsable y el Estado es garante obligado (Borchardt y Roggi, 2017, p.7). Para estos investigadores pensar en las TIC en educación desde una perspectiva de derechos, implica educar a los ciudadanos para usar las tecnologías con el propósito de investigar, decidir y movilizarse en torno a aquellos asuntos de su interés. Las tecnologías integran la relación social desde muchas aristas, es por ello que se alzan como nuevas opciones para la construcción de una sociedad más equilibrada. De aquí la necesidad de pensar que el estado tiene la obligación de garantizar la integración de las TIC en los sistemas educativos, no solo desde una perspectiva instrumental de acceso a dispositivos y conectividad, sino como un medio para mejorar la educación y generar transformaciones en el entorno pedagógico.

La educación juega un papel imprescindible en preparar a las personas con las habilidades, conocimientos y actitudes necesarias para moverse en un mundo tan dinámico y digitalizado. El sistema educativo debe adaptarse y evolucionar para aprovechar las herramientas y las fortalezas de las nuevas tecnologías. La educación no puede prepararse para el futuro utilizando solo lecciones del pasado, más bien es recomendable que resuelva el dilema de digitalizar, automatizar y externalizar la educación. Para esto se ha incursionado en las nuevas tendencias de innovación educativa, entre las que se quieren rescatar el Pensamiento Computacional (PC), la Gamificación, la Inteligencia Artificial en la Educación y por último la Realidad Aumentada. (OECD, 2019 p. 3)

El Pensamiento Computacional, ha irrumpido con gran fuerza y determinación sobre el currículo de la educación obligatoria de muchos países del globo. Según el informe del Joint Research Center de la Unión Europea (Bocconi, Chiccarierllo, Dettori, Ferrari y Engelhardt (2016), como se citó en Segura, Llopis, Mon, Valdeolivas (2019), en el cual se analizan las políticas de la Unión Europea y otros países, se afirma que, en el marco de la renovación educativa, emergen dos grandes tendencias.

La primera consiste en fomentar el desarrollo de habilidades de (PC) en niños y jóvenes, con la intención de que puedan pensar de manera diferente, expresarse a través de una variedad de medios, resolver problemas del mundo real y analizar temas cotidianos desde una perspectiva diferente.

La segunda, radica en la necesidad de impulsar el crecimiento económico, cubrir puestos de trabajo TIC y prepararse para futuros empleos (p.2). A pesar de que una buena

cantidad de gobiernos han decidido optar por la integración del PC en sus sistemas de formación educativa, siguen existiendo aspectos que se vuelven complicados de tratar. Algunos de estos son: desarrollar una evaluación válida y fiable, formación permanente del profesorado, desarrollar criterios para la integración en el currículo, y, por último, determinar cómo enseñarlo en las distintas etapas educativas.

Wing (2016), desarrolló un concepto de Pensamiento Computacional (PC) que fue publicado en la revista *Communications of the ACM* y que ha sido un referente, en él sostenía que:

“El PC implica resolver problemas, diseñar sistemas y comprender el comportamiento humano, basándose en los conceptos fundamentales de la ciencia de la computación. El pensamiento computacional incluye una amplia variedad de herramientas mentales, que reflejan la amplitud del campo de la computación, además representa una actitud y unas habilidades universales que todos los individuos, no sólo los científicos computacionales, deberían aprender y usar” (p.33).

Para este autor, hacer uso del PC permite desarrollar un conjunto de habilidades y destrezas, que no únicamente debería ser explotado por estudiosos de las ciencias de la computación, sino también, por todas aquellas personas que se interesan por las demás áreas del saber.

Según Lozada y Betancur (2016), existe una necesidad constante de actualizar los métodos educativos, por ello, cada vez es más frecuente recurrir a elementos como las TIC y aplicaciones lúdicas que apoyen el proceso. Según estos autores, la Gamificación está ganando un importante lugar en la educación, siendo utilizada como técnica para motivar a los estudiantes en su proceso de aprendizaje. El juego funciona de activador en la atención, y surge como alternativa para complementar los esquemas de enseñanza tradicional. Una manera sencilla de ver la Gamificación, ya que no presenta una definición universal, es la utilización de juegos en los diversos contextos de aprendizaje. Esta técnica de aprendizaje impacta de manera muy positiva tres áreas como la *Cognoscitiva*, *Emocional* y *Social*. La *Cognoscitiva* permite plantear objetivos medianamente difíciles que sirvan de motivación. La *Emocional* al utilizar los juegos para invocar variedad de emociones, experiencias y permitiendo observar el fracaso como una oportunidad de aprender. Por último, la *Social*,

utilizando los distintos roles o papeles de un juego que sirvan en la toma de decisiones (p.3-4).

Según Werbach y Hunter (2012), como se citó en Corchuelo-Rodriguez (2018), para implementar una estrategia exitosa de gamificación es oportuno tomar en cuenta seis elementos (p.2):

1. Definir las actitudes, habilidades y comportamientos en general, que se quieran conseguir en el aula, con el fin de diseñar con coherencia las estrategias de gamificación.
2. Delimitar estos comportamientos.
3. Seleccionar los jugadores, identificar rasgos y características que permitan diseñar actividades pertinentes a sus intereses reales.
4. Definir el ciclo de actividades en el que se describen los eventos y las estrategias a utilizar.
5. Que exista lo que todo juego necesita: diversión.
6. Seleccionar rigurosamente las herramientas que van a servir de ayuda en el desarrollo de la estrategia.

La Gamificación emerge como una herramienta pertinente para motivar el desarrollo de contenidos y la participación de los estudiantes en el aula, así como para potenciar un tipo de estudio más dinámico y significativo.

El área de la educación avanza de la mano de la sociedad, y ambas se encuentran atravesando una acelerada asimilación de toda esta nueva tecnología. Para Ocaña, Valenzuela y Lourdes (2018), es crucial generar una pregunta a raíz de todo esto, ¿hasta qué nivel la tecnología es capaz de revolucionar el universo de la educación? La forma, según este autor, es asumir de forma estructural un parámetro tan novedoso que requiere de un desarrollo constante de aplicaciones que sean realmente impactantes. La Inteligencia Artificial (IA), sin ninguna duda, es la que mejor puede asumir estos roles; la IA debe ser punto clave en las discusiones asociadas a propuestas novedosas en educación, y es necesario integrar desde los niveles más tempranos como lo es el jardín de infantes hasta los más elevados estándares de posgrado.

León y Viña (2017), se plantean una pregunta que permite explorar un campo de la IA y es ¿cómo desarrollar la Inteligencia Artificial y su aplicación en las actividades humanas, entre las que se encuentra la educación? (p.2). El abordaje de esta pregunta ha tenido que ser desarrollado por un equipo interdisciplinario que incluye actores en: educación, psicología, neuro ciencias, lingüística, sociología y antropología) cada uno aporta desde su enfoque y perspectiva. Según Red Tecnológica (2015), como se citó en León y Viña (2017), se plantean ocho formas o vías en las que la IA puede contribuir a la educación (p.4):

1. Automatización de tareas administrativas docentes.
2. Software para brindar educación personalizada.
3. Detectar qué temas necesitan más trabajo en clases.
4. Compañero y soporte de los estudiantes dentro y fuera del aula.
5. Información importante para avanzar en el curso.
6. Cambios en la búsqueda e interacción con la información.
7. Nuevo significado del rol docente.
8. Uso de datos de manera inteligente para enseñar y apoyar al estudiante.

Sin lugar a duda la Inteligencia Artificial podría cambiar cómo se aprende y cómo se enseña, recalcando que detrás todo esto lo que se pretende es lograr un aprendizaje real y significativo por parte del estudiante.

La educación cada vez acoge más sistemas tecnológicos, que permiten desarrollar los contenidos de una manera más interactiva, tal es el caso de la Realidad Aumentada. Para Blázquez (2017), la realidad aumentada podría definirse, como aquella información adicional que se obtiene de la observación del entorno, y que ha sido captada a través de la cámara de un dispositivo, en el que previamente se ha instalado un software específico. Esta información puede traducirse en diferentes formatos como; imagen, carrusel de imágenes, un archivo de audio, video o un enlace (p.5). Las experiencias que se describen en el uso de esta herramienta van desde, mejora motivacional, incentiva el trabajo colaborativo, permite la construcción del conocimiento por parte del estudiante, y ayuda ampliando la información disponible. A todo esto, se suma que la mayoría de las aplicaciones son gratuitas o tienen una versión gratis, fácil accesibilidad debido a que con un simple smartphone se puede realizar

realidad aumentada, y por último cataliza el desarrollo de destrezas tecnológicas, ya que implica el manejo constante tanto de dispositivos tecnológicos como de software.

Para Díaz-Campos (2016), la educación está empezando a sacar provecho de las (apps) y de la Realidad Aumentada. Estas apps de (RA), proporcionan tanto para estudiantes como para profesores, herramientas de aprendizaje muy entretenidas y útiles, explotando el componente visual al máximo. Por otro lado, el software educativo sirve como apoyo de actividades y, además, favorece al sistema educativo de un país, pues es una alternativa válida que ofrece al usuario un ambiente propicio para la construcción del conocimiento. Para terminar, este autor recalca la falta de cultura informática en la actualidad, y recomienda aplicarla obligatoriamente en los diversos contextos educativos.

### **2.3. Enseñanza de la Química a partir de la Computadora**

La enseñanza magistral en la Química ha permanecido por siglos, como la vía usada para transmitir el conocimiento, sin embargo, problemas como grandes matrículas estudiantiles y salones cargados de estudiantes, dificultan una entrega verbal de calidad para todos. Según Calderón e Iglesias (2018), a lo largo de décadas de experiencia en la docencia universitaria, se ha observado que la implementación de rutinas de cálculo, le imprimen efectividad y dinamismo al proceso enseñanza y aprendizaje. Estos autores mostraron una propuesta docente, cuyo objetivo fundamental fue el de usar la computación científica experimental, para mejorar el proceso de enseñanza en Ingeniería Química, promoviendo el desarrollo de habilidades computacionales y competencias, acordes al contexto tecnológico que se vive hoy en día.

Según Castillo et al. (2017), el desarrollo de programas de visualización para la educación en Química se ha generalizado a nivel internacional de una manera sorprendente. Los países en desarrollo requieren de la generación de programas computacionales para el estudio de la ciencia, adaptados a los programas de enseñanza y sus necesidades. La visualización computacional puede ser una herramienta fundamental para entender un fenómeno químico, tanto en el espacio tridimensional, como en su aspecto episódico, pues la Química es una ciencia experimental cuyos objetos de investigación están relacionados directamente con el tiempo y el espacio (p.3).

Según Torres, Varela, Frías y Flores (2016), la visualización de moléculas, por medio de programas computacionales, es un área que está tomando un gran auge como ente mediador en la educación científica. La sinergia entre la Química y la Computación se remonta a los trabajos de Paulin y Wilson en 1935. Sin embargo, su catarsis se dio en un área de la Química que demandaba visualizar los átomos y sus enlaces en las moléculas. En los años 70 es donde surgen los primeros programas computacionales tales como (GAUSSIAN, IBMOL, ATMOL y POLYAYTOM) (p.2). Estos visualizadores comenzaron a desarrollarse en la medida en que los investigadores ocupaban observar no solo la Geometría Molecular, sino también sus propiedades electrónicas una vez finalizado el Cálculo Computacional. Dentro de la alta gama de visualizadores y constructores moleculares gratuitos, se encuentra Avogadro, el cual es un software que mejora las estructuras iniciales de las moléculas insertadas a través de un minimizador de energía mecánico molecular. Sus cualidades para ayudar en la perspectiva de estructuras moleculares son especialmente importantes en cursos de Química donde la tridimensionalidad de las moléculas es la piedra angular de los contenidos (p.2).

En esta investigación se utilizó el software Avogadro, el cual es un programa muy solicitado en Química Computacional, modelado molecular, bioinformática, ciencia de materiales y otras áreas, algunas de las ventajas que tiene este programa es que su uso es muy sencillo e intuitivo para el usuario, entre sus funciones se destacan:

- Insertar elementos para construir una molécula
- Observar dicha molécula desde diferentes perspectivas
- Moverla y girarla
- Medir distancias entre ángulos y enlaces
- Optimizar sus geometrías
- Observar y obtener las propiedades generales de la molécula

Este software se rige bajo la licencia GNU Free Documentation License 1.2. y puede ser utilizado en sistemas operativos como Windows y Linux (Torres, Varela, Frías y Flores-Morales, 2016).

Otro software importante para esta investigación es ORCA, el cual es una herramienta de cálculo desarrollada por el Max-Planck-Institute for Chemical Energy Conversion, cuenta

con más de veinte años en el mercado y actualmente se posiciona entre los cinco programas de química cuántica más utilizados, entre sus características se destaca su eficiencia en los cálculos, es de carácter libre y la sintaxis que utiliza es sencilla e intuitiva. ORCA utiliza métodos modernos de estructura electrónica, los cuales son muy importantes en química computacional, ya que en estos se pueden estudiar moléculas muy variadas y tener resultados muy confiables. (Neese, 2017)

#### **2.4. Estrategias metacognitivas**

Para investigadores como Mayor, Suengas y Gonzáles (1995), como se citó en López, Márquez y Vera (2008), la metacognición se puede ver como un producto o bien como un proceso; como producto se refiere al conocimiento que tenemos de nuestro funcionamiento cognitivo, y como proceso, se refiere a las actividades de supervisión y regulación, cuando se enfrenta a una tarea cognitiva en un proceso de aprendizaje.

Por otro lado, para investigadores como Ladino y Tovar (2014), la metacognición es la capacidad que se tiene de autorregular el propio aprendizaje; además, se entiende como la manera de reflexionar sobre los recursos cognitivos que se posee, es decir, se concibe como una estrategia para potenciar los procesos cognitivos de quienes estudian.

La enseñanza en general ha venido incorporando valiosas metodologías, entre las que se destacan el estudio de procesos, tales como: la solución de problemas, la argumentación, el pensamiento crítico, la modelización y la metacognición. Con respecto a este último, según Valenzuela (2019), los principales hallazgos dan cuenta de que, sujetos que presentan niveles en conocimiento y regulación metacognitiva, tienden a presentar un aprendizaje más exitoso, además de ello se ha demostrado que el desarrollo metacognitivo actúa como variable, que ayuda a optimizar el rendimiento en situaciones de aprendizaje; según menciona este autor, el término metacognición cumple un poco más de cuatro décadas, ya que fue introducido por primera vez por John Flavell, en el capítulo *Metacognitive aspects of problem solving* del libro, *The nature of intelligence*, publicado en 1976, en este documento se describe que, pensar corresponde al conocimiento que un individuo tiene sobre sus propios procesos cognitivos, sin olvidar todos los aspectos que influyen en este proceso (ambiente, tarea y habilidades)(p.2).

A pesar de que las investigaciones asociadas a Metacognición han ido en aumento desde que John Flavell dio el banderazo de salida, existen escasos estudios que aborden la relación entre concepciones de aprendizaje y metacognición.

Para Sánchez (2017), en el estudio de la metacognición existen tantas modalidades como procesos cognitivos; sin embargo, recalca la importancia de cuatro modalidades en el entorno educativo, las cuales son: metamemoria, metaatención, metalectura y metaescritura.

**Metamemoria:** destaca la necesidad de realizar una memorización comprensiva en el proceso de aprendizaje. Algunas estrategias utilizadas son: uso de diagramas, esquemas y mapas conceptuales.

**Metaatención:** se define como el conocimiento y control que el sujeto posee sobre la acción de atender cuando se está ejecutando una actividad. Para ello el autor destaca 3 puntos que los alumnos deben considerar.

1. Ser conscientes cuando se produce una distracción de la atención.
2. Conocer las consecuencias que traerá esta distracción en su proceso de formación.
3. Conocer, controlar y aplicar de forma eficaz las estrategias según la tarea realizada.

**Metalectura:** hace referencia al conjunto de conocimientos, que se poseen para poder entender el significado del contenido de la lectura.

**Metaescritura:** Implica que el sujeto conozca y sepa controlar los procesos necesarios para escribir (págs.15-16).

## 2.5. Aportes de la metacognición a la enseñanza de la Química

Para investigadores como Parolo, Barbieri y Chrobak (2004), de la Universidad Nacional del Comahue (UNCo), urge tanto para profesores como para estudiantes, una mayor efectividad de los modelos de enseñanza y aprendizaje. En una investigación realizada por ellos se adoptó un modelo de instrucción, apoyado por fundamentos teóricos sobre el aprendizaje de Química, entre los que se encuentran: mapas conceptuales, entrevistas clínicas y la UVE heurística de Gowin, estas herramientas fueron utilizadas gracias a que facilitan el aprendizaje significativo, al permitir indagar sobre nuestro propio conocimiento. El objetivo que persigue esta investigación es que el alumno descubra por sí mismo la utilidad de las estrategias y desarrolle su metacognición, concientizando qué formas de actuación mental

son más eficaces en cada situación, es decir, que aprenda a aprender, por último, este trabajo proyecta que el estudiante trabaje por sí mismo y descubra nuevas técnicas de estudio y siga en un aprendizaje continuo sin la guía constante de otra persona.

## **2.6 ¿Qué es la Química-Computacional y cuál es su enfoque**

Según Ugliarolo y Celeste (2012), las personas viven en un mundo cargado de estímulos audiovisuales que nos instan a meditar, disfrutar y reflexionar (p.1). Para este autor, en el estudio de la Química se viven algunos problemas como el inconveniente de estudiar estructuras microscópicas entre ellas el átomo. Para solventar estos problemas, la Química se vale de representaciones y modelos didácticos para poder crear una imagen mental que sea válida para la enseñanza de esta ciencia.

Con el pasar de los años, se ha identificado en la enseñanza de la Química, que la concepción espacial resulta a menudo difícil de comprender, y esto no se debe a falta de conocimientos, sino más bien a la dificultad de explicar una estructura 3D en un plano 2D. La tecnología multimedia ha contribuido en gran medida a elevar el proceso de enseñanza, al permitir al alumno interactuar con un programa de simulación, el cual muestra la estructura espacial de una molécula, con una extraordinaria capacidad de detalle.

Según Suárez (2012), la Química Computacional consiste en una serie de técnicas utilizadas en la investigación de problemas químicos, en el que se integra el uso de una computadora para lograr un mejor análisis. Este autor describe cómo este campo viene creciendo desde las últimas décadas, gracias a los avances en hardware de las computadoras, así como el eficiente desarrollo de software que permiten la simulación.

Para García (2015), el objetivo principal de la Química Computacional es predecir e interpretar para un sistema químico, sus propiedades moleculares, sus reacciones químicas, y la relación de su estructura molecular con su reactividad; así mismo, la naturaleza del sistema molecular a estudiar determinará el método de cálculo a utilizar. Las habilidades en el uso del software no son únicamente para especialistas, sino para cualquiera que tenga conocimientos básicos en métodos teóricos, capacidad de análisis de resultados, cierta habilidad en el uso de software y conocimientos básicos en Química (p.44).

El uso de Química Computacional surge como una evolución de la Química teórica, con el objetivo de investigar el comportamiento de la materia a nivel molecular, utilizando

para esto métodos matemáticos que han sido programados e implementados en ordenadores. Las propiedades moleculares por investigar pueden ser muchas, algunas son: forma y tamaño relativo de las moléculas, energía de todo tipo de especies químicas, estados excitados o de transición, geometría molecular, entre otros.

Según Ortiz (2015), un área donde la Química Computacional es particularmente importante es en la enseñanza de la Química. Gracias al desarrollo de conceptos teóricos, la exposición de la Química a los estudiantes es cada vez más directa y lógica de lo que fue anteriormente, muchas de las carreras en Química hoy en día, integran en su malla curricular al menos, un curso de Química Computacional.

## **2.7 Habilidades de comunicación en la Química**

Según Nakamatsu (2012), el aprendizaje de la Química es difícil, y lo considera así, porque se requiere que el estudiante sea capaz de relacionar el mundo macroscópico, con un mundo microscópico, basado en átomos y moléculas que son imperceptibles a sus ojos (p.1). La enseñanza de esta ciencia no solo requiere de la transmisión de información, también requiere que esta información sea asimilada por parte del alumno; buscar ejemplos o resolver problemas aplicados, son maneras que ayudan al estudiante a establecer conexiones entre las ideas nuevas, y los conocimientos empíricos.

Para Galagovsky y Bekerman (2009), algunos estudiantes de Química construyen explicaciones y hacen predicciones, diferentes de las que son aceptadas por la ciencia, estas representaciones y conceptualizaciones erróneas, lamentablemente son arrastradas año con año (p 1). Identificar este problema es muy difícil, más si se toma en cuenta que la mayoría de las estrategias de evaluación utilizan preguntas cerradas, con respuestas únicas que deben coincidir con lo enseñado en clase. Estos autores lograron determinar que, muchas de las ideas erróneas que los estudiantes tenían, era también producto del propio y poco eficiente discurso explicativo de la Química escolar.

Es a todo esto que la Química, al igual que muchas de las áreas de la ciencia, busca poder crear analogías o brindar recursos que permitan comprender de manera más clara los diversos fenómenos abstractos por los que se interesa.

## **2.8. Aportes de la Química-Computacional a la enseñanza de la Química**

Para investigadores como Valles-Sánchez, Rosales-Marines, Serrato-Villegas y Farías-Cepeda (2014), la Química Computacional nace de la necesidad de comprender aspectos

importantes que no se pueden resolver de manera práctica. Esta rama de la Química aplica nuevas tecnologías electrónicas y las matemáticas para comprender un sistema; y es utilizada, por estudiantes y profesionales en áreas afines a la Química, Física y Química-Computacional (p.1).

Según Valles-Sánchez et al. (2014), la Química-Computacional es útil en la comprensión de sistemas químicos y también es utilizada como herramienta de aprendizaje y de respaldo en investigaciones experimentales.

Algunos de los logros que mencionan investigadores como Vela (2016), es que, en los últimos 40 años, los desarrollos teóricos y computacionales les permiten, tanto a profesores como alumnos, estudiar la estructura electrónica y molecular de manera *ab initio*, en moléculas 30 veces más grandes que las que se podían estudiar a principios de la década de los 70 (p.6).

## **2.9. Enseñanza de la Geometría Molecular**

Para investigadores como Flamini y Wainmaier (2012), la Química ha desarrollado con el pasar del tiempo, distintos modos de describir y representar la constitución de las moléculas, esto con el fin de caracterizar la inmensa cantidad de sustancias. En palabras de Hoffman y Laszlo (1991), como se citó en Flamini y Wainmaier (2012), los grafos son necesarios para el aprendizaje de la Química, así como para su enseñanza, y aprenderlos involucra apropiarse del lenguaje que los químicos utilizan en su trabajo de interpretar fenómenos (p.3).

En la enseñanza de las ciencias se utilizan lenguajes y explicaciones multimodales, para favorecer su comunicación, según Kress (2001), como se citó en Gómez (2008), las explicaciones multimodales se apoyan en representaciones externas (p.3), entendidas estas como la expresión concreta de un modelo en algún registro semiótico determinado (lenguaje natural, imagen, maqueta) Buckley (2000), (como se citó en Gómez 2008 p. 3). Esta expresión es creada con propósitos, ya sea comunicativo, significativo o cognitivo y tienen la característica de ser fácilmente observables.

En un trabajo de Galagovsky (2004), como se citó en Flamini y Wainmaier (2012), se menciona que el lenguaje de la Química es multimodal, ya que integra en su estudio diferentes expresiones que favorecen su comunicación, tomando en cuenta que en los procesos de enseñanza y de aprendizaje, la comunicación es efectiva cuando el docente y

alumno pueden compartir un lenguaje común, este primer autor valoriza cuatro tipos de forma complementaria:

- Lenguaje verbal: utilizado en descripciones e interpretaciones de fenómenos.
- Lenguaje visual: vinculado con los hechos macroscópicos, no requieren interpretación simbólica.
- Lenguaje gráfico: describe un contenido simbólico (Bolas, Varillas).
- Lenguaje formal: corresponde a los símbolos e incluye a las fórmulas.

La Geometría ha formado parte de currículo educativo y constituye un fragmento de una cultura universal, sus contextos de aplicación son múltiples y es por ello que su correcta aplicación permite el desarrollo de habilidades motrices, aplicación del concepto de estética, reconocimiento de fenómenos matemáticos en la naturaleza, y todo esto suma a la comprensión del arte y otras ramas.

Chivatá y Cifuentes (2017), encontraron que uno de los puntos más débiles de los alumnos en el estudio de la Química, está vinculado con las habilidades de percepción espacial. Para García y López (2008), citado también en el anterior trabajo, se debe considerar que para enseñar y aprender geometría se necesita cultivar la inteligencia del estudiante, incentivar estrategias de pensamiento, y potenciar el descubrimiento, ya que todo esto ayudará a que el alumno se interese e identifique la utilidad de esta materia. Según la investigación de Chivatá y Cifuentes (2017), los alumnos memorizan estructuras y las dibujan en un plano sin ser capaces de visualizarlas en tres dimensiones. Es por esto que recalca la importancia de utilizar modelos, pero no simplemente mostrar el modelo, sino que el estudiante pueda manipularlo con la idea de que interiorice de una mejor manera, por ejemplo, la tridimensionalidad de una molécula.

García (2018), se planteó desarrollar un aprendizaje del concepto Geometría Molecular, a partir de una estrategia didáctica basada en los modelos y el modelaje científico, en estudiantes de noveno año en Colombia. Tanto para este autor, como para la Química en general, el concepto de Geometría Molecular es de gran importancia, pues se hace necesario explicar algunas de las propiedades que caracterizan a las moléculas y que permite comprender su funcionalidad. Según Chang (2002), como se citó en García (2018), la Geometría Molecular es fundamental porque determina las propiedades físicas y químicas, como, por ejemplo, el punto de fusión, el punto de ebullición, la densidad y el tipo de

reacciones en que pueda participar. De acuerdo con Brown (2003), también citado en García (2018), el tamaño y la forma tridimensional de una sustancia dada, junto con la fuerza y la polaridad de sus enlaces, determinan en buena medida las propiedades de esa sustancia.

## **2.10. Estrategias universitarias promovidas para la enseñanza de la Geometría Molecular.**

A nivel universitario se está generando la incursión de nuevas tecnologías que permiten mediar de una mejor manera, el proceso de enseñanza y aprendizaje. En un trabajo de Martínez-Hung, García-López y Escalona-Arranz (2017), se constató que, con el advenimiento de la era digital se extiende la modelación 3D no solo a modelos moleculares, sino a otras representaciones gráficas, como orbitales, densidad de carga, entre otros (p.1). Entre los medios que se están aplicando está la Realidad Aumentada (RA), la cual permite al estudiante visualizar complejas relaciones espaciales de moléculas que se ubican en planos 2D y 3D, así como poder interactuar con estas estructuras.

Para Valdez y Pierce (2013), es posible implementar el uso de software tanto en la secundaria como a nivel universitario, la idea de utilizar estos recursos es ayudar a mejorar el aprendizaje de la Química. Estos investigadores utilizaron instrumentación moderna y programas de computación en Química, con el fin de despertar el interés de los estudiantes por esta rama de la ciencia. El trabajo desarrolló diversos tópicos, sin embargo, se quiere resaltar el que está asociado a enlace químico y geometría molecular. Para esto se utilizó la modelización molecular, haciendo uso de un programa de computación llamado *CAChe*, el cual permite a los estudiantes visualizar la geometría tridimensional de las moléculas, determinar distancias entre enlaces, la medida de los ángulos en una molécula, predecir polaridad, realizar cálculos orbitales, simular espectros infrarrojos y predecir el tipo de enlace por la absorción en el infrarrojo. La utilización de este tipo de programas cataliza el interés del estudiante por aprender, lo enfrenta a un tipo de retos asociados al uso de recursos tecnológicos y facilita el aprendizaje de los tópicos planteados.

Caballero y Vidal (2014), describieron como la práctica experimental de la Química y el empleo de software educativo en la formación del docente, ayuda en la progresiva multiplicación de los conocimientos. Para ellos el avance tecnológico y el imprescindible perfeccionamiento de la didáctica de las ciencias, precisa de un recurso que permite integrar

múltiples componentes, la Química hace grandes esfuerzos por integrar estas variables antes mencionadas, lo cual le resulta difícil de ejecutar sin concebir la actividad práctica experimental, y el empleo de los softwares educativos como un recurso que permita una formación y experimentación al docente.

En este artículo presentado en el simposio “Didáctica de las Ciencias en el nuevo milenio”, se analizó como la utilización de las computadoras quizá sea la modificación más palpable que ha tenido lugar en la actividad científico-investigadora, esta ha sido vinculada en la enseñanza de las ciencias con diversos enfoques, y ha demostrado ser un poderoso recurso para la solución de problemas (p.50). Según estos autores las siguientes son algunas de las funciones principales con que deben utilizarse los softwares en educación:

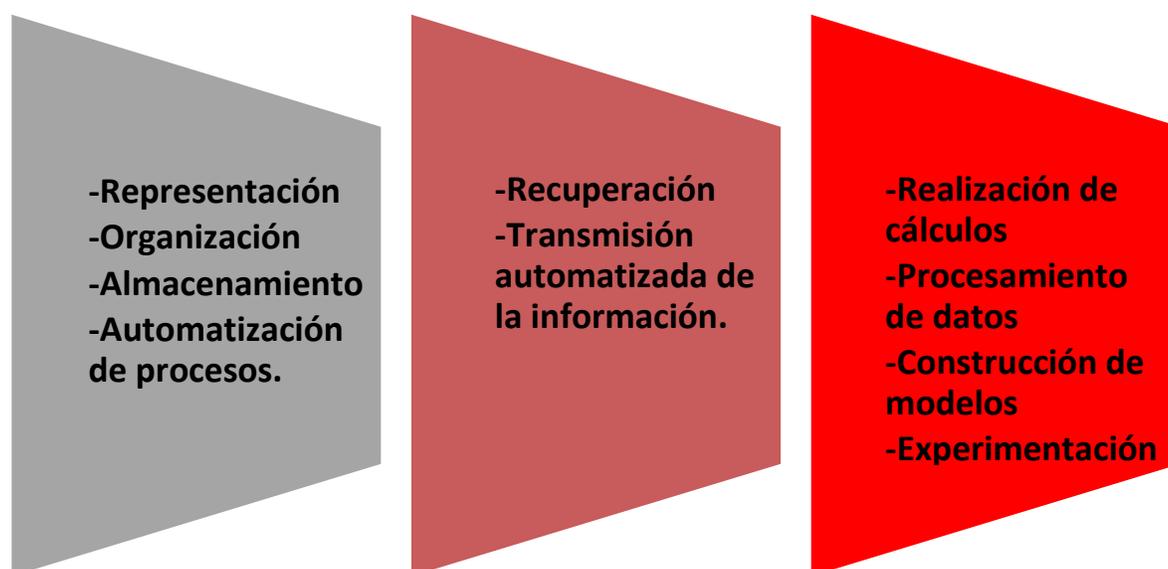


Figura 1. Funciones del software Caballero y Vidal (2014), elaboración propia.

Según Ordenes, Arellano, Jara y Merino (2014), como se citó en Ramírez (2019), la enseñanza la Química se caracteriza por tener un discurso magistral, complementado con las prácticas de laboratorio que en su mayoría son un diseño de receta, en la que poco se incentiva una construcción consciente por parte del estudiante.

Para Galagovsky (2014), como se citó en Ramírez (2019), el discurso del docente de Química puede verse tergiversado debido al recorte y estereotipos producto de las mediaciones didácticas utilizadas, aunado a las dificultades inherentes en cuanto a la comprensión de los fenómenos por los que se interesa la Química, “el complejo discurso de

esta ciencia es una de las causas de la dificultad que tienen los estudiantes para comprender lo que el docente busca enseñar (p.17). En este trabajo se enfatizaba la prioridad de pensar en estrategias enfocadas hacia la implementación de los diversos lenguajes de la Química como mediadores del proceso de enseñanza y aprendizaje, con la intención de generar motivación y un aprendizaje más significativo del estudiante. En sus conclusiones destacaron que el uso del lenguaje gráfico permite al alumno adquirir diversas perspectivas sobre el tema de estudio, además, consigue desarrollar mejores competencias a nivel conceptual.

### **2.11. Buenas prácticas**

Para autores como Gutiérrez, Villareal y Espinosa (2017), una buena práctica docente en la educación superior, implica que el estudiante desarrolle y posibilite una autonomía en los diferentes ámbitos de su persona, alcanzando propósitos y habilidades muy pertinentes para su desarrollo. Para alcanzar una buena práctica en educación superior, es necesario integrar un alto protagonismo del estudiante y plantear nuevas estrategias y técnicas que le permitan reflexionar, planear y practicar.

Para Rodríguez, (2012) (como se citó en Durán, Estay-Nicular y Christian, 2016) los estudios realizados sobre buenas prácticas en el sector educativo deberían compartirse, difundirse e instrumentarse con el propósito de alcanzar objetivos de calidad y equidad, la buena práctica docente es un conjunto de intervenciones educativas que facilitan el desarrollo de actividades de aprendizaje en las que se logre con eficiencia los objetivos formativos previstos y también otros aprendizajes de alto valor educativo (Grupo DIM, 2014, como se citó en Rodríguez, Estay-Nicular y Christian, 2016). La buena práctica universitaria se basa en una experiencia que favorece significativamente la pertinencia social de las instituciones de Educación Superior, además promueve un papel activo en la construcción de una sociedad más justa.

Autores como Zabalza 2012, p.18 (como se citó en Agencia de Calidad de la educación 2014) han señalado que algo “bueno” es aquello que es valorado por quienes son protagonistas o beneficiarios del ejercicio de una práctica en particular, y no desde un juicio externo, sin embargo, hay que considerar que algo que funciona bien en un contexto determinado, no tiene por qué hacerlo en otro, a todo esto los investigadores determinaron

que una buena práctica es aquella modalidad de responder con eficacia y satisfacción a las diferentes demandas educativas.

Chickering y Gamson (citados en Ramón 2012), definieron siete principios de buenas prácticas, la número tres es realmente valiosa para esta investigación, ya que describe lo siguiente: *“Estimular el aprendizaje activo y reflexivo de búsqueda de información y construcción social del conocimiento. La Web y el uso por ejemplo de software de simulación entre otras aplicaciones tecnológica permiten como nunca antes adquirir y comprender conceptos de gran nivel de complejidad por las abstracciones que implican. En el plano económico el empleo de software interactivos y de simuladores pueden significar ahorros considerables de dinero en cursos eminentemente prácticos y de laboratorios como en química, física y otras materias escolares”*.

El valor metodológico y práctico del concepto de “buenas prácticas” radica en el diseño de nuevos ambientes de aprendizaje, el estudiante precisa de herramientas experimentales y recursos que le permitan comprender de una manera más integral los contenidos.

Según Durán (2015), el término o concepto de buenas prácticas fue acuñado por Hammer en 1990, y se define “como una manera de realizar un trabajo que produce un buen resultado. Una práctica exitosa es reconocida por ser innovadora, replicable, evaluada y que transforma desde el ejercicio responsable de su autonomía.

Una buena práctica universitaria es aquel proyecto o programa que favorece significativamente la educación superior, promueve un aprendizaje activo y aporta una sociedad más justa. Por último, debe cumplir con cuatro criterios los cuales son; ser innovadora, ser eficaz, ser sostenible ser replicable.

En este capítulo fueron expuestos los fundamentos teóricos de esta investigación, este apartado sirve de sustento para entender la metodología planteada, además procura servir de insumo para quienes estén interesados en utilizar herramientas computacionales ya sea para la mediación en la Química, como para otras áreas de las Ciencias Naturales, la articulación de estas herramientas puede generar mejoras en el proceso de investigación, docencia y enseñanza, sirviendo de insumo para los actores de estas tres áreas.

## Capítulo III.

### 3. Marco Metodológico

#### 3.1. Paradigma

En lo que respecta a la selección del paradigma de investigación, para el desarrollo de este trabajo se optó por el interpretativo. Se considera que dicho paradigma se ajusta con el objeto de estudio de esta investigación debido a que este se centra en comprender a profundidad los fenómenos de interés desde perspectivas sociales y culturales (Valles, 1999).

Por otra parte, (Creswell, 2014) sugiere como el propósito de este paradigma, considerar el conocimiento como algo emergente y construido en interacción con el contexto y los participantes, así como la posibilidad de priorizar la recolección de resultados centrados en la perspectiva de los sujetos involucrados en el estudio.

En este trabajo, se busca documentar perspectivas de personas con rol de docente, estudiante e investigador con respecto al uso de dos herramientas computacionales para abordar el tema de Geometría Molecular en la Enseñanza de la Química en un contexto de educación superior. Dicha documentación permitirá comprender cuál es el estado actual de implementación de este tipo de recursos en la UNA con fines de investigación, docencia y aprendizaje vinculados de alguna manera con el tema de Geometría Molecular, por lo que se espera lograr visibilizar a través de resultados, potenciales buenas prácticas educativas que permitan agilizar su aprovechamiento en actividades prácticas de asignaturas que demandan la comprensión e interpretación de fenómenos complejos vinculados con este tema.

En resumen, el paradigma naturalista se ajusta al propósito de este estudio ya que permite entender la realidad social de manera dinámica y compleja y se centra en la perspectiva de los sujetos involucrados en el estudio (Rodríguez, 2003).

### **3.2. Enfoque**

En concordancia con lo desarrollado en el apartado anterior, para este trabajo se optó por el enfoque de tipo cualitativo, ya que se requería explorar e interpretar experiencias y percepciones de las fuentes de información que representan las personas vinculadas con el contexto de interés.

De acuerdo con Bautista (2011), el enfoque cualitativo utiliza la subjetividad para entender el significado social y considera al investigador como parte de la realidad que está siendo investigada. Este enfoque no se centra en probar teorías o hipótesis, sino que es un método inductivo que genera teorías significativas o adapta las existentes a las realidades emergentes.

Por otra parte, (Rodríguez, 2003) sugiere que, por lo general, la recopilación de datos en este enfoque se realiza mediante técnicas cualitativas, tales como entrevistas, observaciones y análisis de documentos, con el objetivo de comprender la realidad social de manera dinámica y compleja.

Por lo tanto, para la recolección de datos, se optó por técnicas tales como la entrevista semiestructurada y el grupo focal, de tal forma que fuera posible desarrollar instrumentos que guiarán la interacción entre la persona investigadora y el público que conformaría la muestra del estudio.

### **3.3. Diseño**

Este trabajo se concibió como un estudio de caso, debido a que se buscaba comprender elementos particulares de un escenario específico, de acuerdo con Stake, (1999) en este tipo de trabajos se busca profundizar en las realidades que determinan la participación e interacción de personas relacionadas con el objeto de estudio.

Para Pérez Serrano (1994), como se citó en Álvarez y Maroto (2012), el objetivo de los estudios de caso en la investigación educativa es el de comprender el significado de una experiencia que se desarrolla en un contexto de enseñanza aprendizaje bajo ciertas características específicas.

Para el caso concreto en el objeto de estudio de este trabajo, la mediación del tema Geometría Molecular haciendo uso de herramientas computacionales posee dichas

particularidades, algunos de esos factores determinantes son consecuencia del alto grado de abstracción que representa la interpretación de fenómenos a escala molecular que demandan el dominio de habilidades de conciencia espacial para la visualización de figuras representativas en tres dimensiones, dominio de reglas y convenciones de nomenclatura, así como el dominio de lenguajes de programación o herramientas de cálculo computacional que aunque aceleran la obtención de resultados experimentales, también pueden generar barreras de aprovechamiento a aquellos usuarios que no tengan la experiencia previa o el tiempo suficiente para superar las curvas de aprendizaje que implica poder dominarlas.

Por lo tanto, considerando lo anterior para el desarrollo del trabajo se abordó al público meta con el propósito de documentar sus perspectivas y experiencias mediante actividades e instrumentos guía que permitieran recolectar la información necesaria para concretar los objetivos del trabajo planteados anteriormente.

Además, es importante aclarar que la ejecución de dos de las entrevistas semiestructuradas, así como el grupo focal que se planearon para la recolección de datos de este estudio se dio siguiendo las adaptaciones establecidas por la Facultad de Ciencias Exactas en atención a las normativas del Ministerio de Salud, en respuesta a la situación de pandemia causada por el virus Covid-19. Por lo que, se digitalizaron los instrumentos mediante la plataforma Google Forms y los grupos focales se desarrollaron mediante la plataforma de videoconferencia Zoom durante el primer ciclo del año 2020.

### **3.4. Categorías de análisis**

A continuación, se describen las definiciones conceptual y operacional de las categorías de análisis derivadas del planteamiento de los objetivos específicos de esta propuesta.

#### **3.4.1. Dificultades en la comprensión del tema Geometría Molecular**

Según Mesonero y Núñez, (1995, p.384), como se citó en Castejón et al. (2018), las dificultades de aprendizaje ocurren cuando el estudiante procesa la información de manera inusual, o cuando los métodos de enseñanza no reflejan un aporte considerable en el proceso de formación.

El tema Geometría Molecular es la base estructural de la Química, y comprenderlo significa poder describir la disposición tridimensional de los átomos que conforman cada molécula, como afecta sus propiedades físicas y químicas, así como el tipo de reacciones en que puede participar (Chang y College, 2003), como se citó en (Naranjo y Peña, 2019).

Las principales dificultades en la comprensión de la Química se deben a que se trabaja simultáneamente en los niveles macro, micro y simbólico, tanto para sus leyes, conceptos y modelos como para su lenguaje altamente simbólico, lo que la hace una disciplina con un alto nivel de abstracción (García, 2018).

Esta categoría se centra en determinar cuáles son las dificultades que investigadores, docentes y estudiantes perciben al abordar el tema de Geometría Molecular desde sus actividades inherentes, además, se pretende identificar cuáles son los recursos que dichos autores utilizan para abordar el tema de Geometría Molecular, por último, procura documentar el grado de interés de estas personas en el uso de herramientas computacionales en sus actividades de docencia, investigación y aprendizaje permanente.

#### **Subcategorías:**

1. Dificultades que enfrentan personas investigadoras para comprender el tema geometría molecular.
2. Dificultades que enfrentan personas docentes para comprender el tema de geometría molecular.
3. Dificultades que enfrentan estudiantes universitarios para comprender el tema geometría molecular.

#### **3.4.2. Potencial Pedagógico de dos herramientas computacionales (ORCA y Avogadro), como recursos didácticos para la mediación del tema Geometría Molecular.**

Las tecnologías tienen el potencial para desarrollar innovaciones educativas, dado que entre sus funciones se encuentran: contribuir a la extensión de la mente humana, complementar la memoria a corto y largo plazo, mejorar la atención resaltando contenido específico y de manera general, contribuye en los procesos cognitivos (Santos, Domínguez, Miranda, Cenich, 2017, p.4).

Una de las utilidades de las herramientas computacionales en la Química, es la obtención de información de sistemas químicos por medio de cálculos matemáticos basados en leyes fundamentales de la Física y la Química (Villagra, Guidugli y Masman, 2005).

El objetivo de esta categoría es examinar el posible potencial que investigadores, docentes y estudiantes le dan, al uso de herramientas computacionales como un recurso experimental adecuado según sus contextos y roles.

**Subcategoría:**

1. Potencial pedagógico que perciben personas investigadoras, sobre el uso de dos herramientas de Química Computacional, como recurso didáctico para la mediación del tema Geometría Molecular.
2. Potencial pedagógico que perciben personas docentes, sobre el uso de dos herramientas de Química Computacional, como recurso didáctico para la mediación del tema Geometría Molecular.
3. Potencial pedagógico que perciben personas estudiantes, sobre el uso de dos herramientas de Química Computacional, como recurso didáctico para la mediación del tema Geometría Molecular.

**3.4.3. Buenas prácticas educativas derivadas del uso de la Química Computacional en actividades de investigación, docencia y estudio de fenómenos vinculados con el tema de Geometría molecular.**

De acuerdo con experiencias de implementación en otras latitudes, las herramientas ORCA y Avogadro que se propone analizar en este trabajo han demostrado ser de utilidad para enseñar, investigar y estudiar el tópico geometría molecular debido a su facilidad de uso, accesibilidad gratuita, capacidad de representación en tres dimensiones, y posibilidad de realizar cálculos y análisis avanzados.

Este apartado pretende recolectar y sistematizar consideraciones, experiencias y recomendaciones de personas investigadoras, docentes y estudiantes sobre el uso de dos herramientas computacionales como recurso didáctico para la mediación pedagógica del tema Geometría Molecular, por lo que a través de esta categoría de análisis se busca

establecer buenas prácticas educativas relacionadas con el uso de estos recursos para el abordaje del tema mencionado.

#### **Subcategorías:**

1. Buenas prácticas educativas derivadas del uso de la Química Computacional en actividades de investigación.
2. Buenas prácticas educativas derivadas del uso de la Química Computacional en actividades de docencia.
3. Buenas prácticas educativas derivadas del uso de la Química Computacional en actividades de autoaprendizaje.

#### **3.5. Fuentes de Información**

Las fuentes de información consultadas para el desarrollo de este trabajo fueron de naturaleza humana y documental.

##### **3.5.1. Humanas**

- a) Investigador de la Universidad Nacional con conocimientos en software de altas prestaciones, estudiantes del curso de Química Orgánica, un profesor a cargo del curso Química Orgánica, para la carrera de Química industrial de la Universidad Nacional, año 2020, y 16 estudiantes de segundo año de la carrera de bioprocesos.

##### **3.5.2. Computacionales**

- a) Dos herramientas computacionales, una de modelado molecular (Avogadro) y otra de cálculo (ORCA).

### **3.6. Objeto de Estudio**

EL objeto de estudio de este trabajo es el aprovechamiento de herramientas de Química computacional como recurso de apoyo de actividades de investigación, docencia y autoaprendizaje en un contexto de educación superior. Por lo que se pretende consultar, sistematizar, documentar y compartir información que permita extender su aplicación hacia otras experiencias de aprendizaje que requieran la comprensión de fenómenos en la escala molecular tanto a nivel universitario como de los niveles más básicos del sistema educativo en el que se estudian los fundamentos de la química, como una disciplina con una componente experimental significativa que demanda la comprensión de conceptos y temas abstractos como es el caso de la Geometría Molecular..

### **3.7. Población y Muestra**

Para este trabajo la población de interés está conformada de la siguiente manera:

- Estudiantes matriculados en cursos de Química de la Escuela de Química de la UNA.
- Profesor que imparte cursos en la escuela de Química que abordan el tema de Geometría Molecular.
- Académico con experiencia de participación en proyectos relacionados con el objeto de estudio de este trabajo.

**Cuadro 1.1. Tipos de instrumento y muestra utilizados para la recolección de datos**

<b>Instrumento</b>	<b>Muestra</b>
Entrevista semiestructurada para docentes	Un docente que imparte cursos de Química en el que se aborda el tema de Geometría Molecular.
Entrevista semiestructurada a investigador	Un investigador académico con experiencia en el uso de software de altas prestaciones.
Cuestionario	Un investigador, un docente y 16 estudiantes universitarios.
Grupo focal estudiantes	16 estudiantes que hayan cursado asignaturas en la Escuela de Química en las que se aborde el tema de Geometría Molecular.

### **3.8. Descripción de instrumentos a utilizar**

Con la intención de recabar la información de interés se utilizaron en esta investigación, un grupo focal con estudiantes a los que se les aplicó tres instrumentos, un conjunto de 8 frases incompletas y dos cuestionarios, uno con 5 preguntas abiertas y el otro con cinco preguntas cerradas. Así mismo se realizaron dos entrevistas semiestructuradas, una para el docente y otra al investigador.

#### **3.8.1. Entrevista semiestructurada a personas investigadoras**

La entrevista semiestructurada según Bautista (2011), se describe como un procedimiento de conversación libre del protagonista, acompañado de una escucha receptiva del investigador. Las preguntas son abiertas, reflexivas y pretenden develar tanto de manera verbal como no verbal, los comportamientos de los protagonistas, clarificando sus conductas e identificando y clasificando sus problemas.

El instrumento estuvo compuesto por un total de nueve preguntas generadoras, las cuales se enfocaron en recabar información con base a las ventajas que percibieron investigadores, en cuanto al uso de herramientas computacionales como complemento pedagógico para la enseñanza del tema Geometría Molecular y su valor como buena práctica educativa (Anexo 1).

### **3.8.2. Entrevista semiestructurada para docentes**

Este instrumento consistió en un conjunto de nueve preguntas, que pretendió identificar las problemáticas e inquietudes que afrontaron los docentes universitarios para mediar el tema de Geometría Molecular. Así mismo, buscó determinar las buenas prácticas educativas que perciben, en cuanto al uso de dos herramientas computacionales, para la enseñanza de la Geometría Molecular.

### **3.8.3. Grupo focal para estudiantes**

Un grupo focal se caracteriza por brindarle a los entrevistados una exposición sobre una experiencia social concreta, esta se enfoca en un problema en específico y la intención es explorar, poco a poco, toda la riqueza temática asociada (Bautista,2011, p.174). La temática es recabar las reacciones que tienen los entrevistados al ser expuestos a una situación, todas las fuentes tanto cognitivas como emocionales, son de gran importancia.

Para cumplir con los objetivos planteados se planteó un grupo focal, el cual permitió recolectar datos sobre las experiencias vividas por parte de estudiantes que hubieran cursado asignaturas en la Escuela de Química de la UNA, al utilizar dos herramientas computacionales para el abordaje del tema Geometría Molecular. En estos grupos se promovió la libre expresión, la participación y una comunicación profunda. Se organizó un taller el cual se dividió en cuatro etapas que se describen a continuación (Anexo 3):

**1º Etapa:** Se dio la bienvenida a los estudiantes, agradeciendo su colaboración en el taller. Seguidamente se procedió a brindar una base teórica y operacional sobre el tema a tratar, las moléculas a estudiar, así como el uso correcto de las herramientas a utilizar.

**2º Etapa:** Se desarrolló una demostración guiada sobre cómo realizar optimización de geometrías.

- a) Haciendo uso de las herramientas de optimización automática de Avogadro.

- b) Ejecutando un cálculo computacional haciendo uso de Avogadro y ORCA.
- c) Guiando a un estudiante en su primer cálculo computacional.

**3º Etapa:** En esta se procedió a dar respuesta a un conjunto de ocho frases incompletas que pretenden generar fuentes cognitivas y emocionales de las reacciones de los entrevistados sobre las herramientas computacionales.

**4º Etapa:** A modo de cierre se proyectó la idea de generar un conversatorio, en el cual los estudiantes describieron algunas razones por las que decidieron utilizar esa frase. Esto con la intención de conjuntar una información más amplia sobre sus percepciones.

#### **3.8.4. Cuestionario para investigadores, docentes y estudiantes**

Según McMillan y Schumacher (2005), un cuestionario se construye mediante el desarrollo de un conjunto de preguntas adecuadas al contexto que el investigador esté explorando, esta técnica de recolección de datos permitió recabar información en cuanto a reacciones, opiniones y actitudes que el entrevistado tiene del tema en estudio.

#### **3.9. Criterios de Validación**

Los instrumentos utilizados en esta investigación fueron validados gracias a los criterios de expertos en el área de ciencias básicas, así como por su experiencia en el uso de las tecnologías educativas aplicadas a las Ciencias Naturales.

Los profesionales aportaron sus observaciones y sugerencias tomando en cuenta los siguientes criterios de validación:

- Pertinencia del contenido de los enunciados
- Contextualización de las preguntas a la población meta
- Claridad de las preguntas
- Relación con la teoría
- Coherencia con los objetivos de investigación y sus categorías de análisis

#### **3.10. Descripción del análisis a utilizar**

Para el análisis de una entrevista cualitativa, lo que se buscó fue obtener datos que luego iban a hacer traducidos a información sobre situaciones, procesos y percepciones que

los participantes ya sea de manera individual, grupal o colectiva que aportaron sobre una situación en concreto (Hernández, Fernández, Baptista 2014).

En la sistematización de los datos dio inicio con el primer cuestionario, seguido de las frases incompletas, ya que en estas podría haber información que no se ajustara a las circunstancias de la investigación, para esto se les aplicó una serie de preguntas que pretendían depurar dicha información, las cuales fueron:

1. ¿El estudiante responde según su experiencia en el uso de dos herramientas computacionales, o bien, a un impulso por completar el ejercicio?
2. ¿Las respuestas reflejan un sentido coherente con respecto a la frase correspondiente, o no presenta una adecuada consideración al contexto?
3. ¿Las frases corresponden a un pensamiento realista o fantástico?

Los datos obtenidos del grupo focal con estudiantes fueron sistematizados y clasificados según los objetivos correspondientes, se realizó una triangulación específica utilizando las frases incompletas y la entrevista semiestructurada de los docentes, esto con la intención de comprobar si los argumentos de los docentes coincidían con las vivencias de los estudiantes. La información fue organizada separando lo trivial de lo significativo, identificando patrones de similitud.

Seguidamente se realizó un cuestionario el cual según Meneses (2016), es un instrumento que permite al investigador plantear un conjunto de preguntas para recoger información estructurada sobre una muestra de personas. Este instrumento tuvo como objetivo, identificar las principales dificultades que los estudiantes presentan al estudiar el tema Geometría Molecular, la información fue organizada mediante un gráfico.

Según Okuda y Gómez (2005), (como se citó en Coto y Villalobos, 2018), la triangulación “es una herramienta enriquecedora que le confiere a un estudio rigor, profundidad y complejidad, además permite dar grados variables de consistencia a los hallazgos”, esto mejora significativamente la comprensión del fenómeno que se estudia (p. 109).

Para finalizar se realizó una triangulación de las frases incompletas, las entrevistas semiestructuradas y los dos cuestionarios, clasificando la información según cada objetivo,

y lo que se pretendió en este ejercicio fue primero identificar las principales dificultades que los actores asociaban cuando se quería comprender el tema Geometría Molecular, seguidamente se determinó el potencial que ellos le daban al uso de dos herramientas computacionales en la enseñanza del tema Geometría Molecular, todo esto con la intención final de analizar las consideraciones de buenas prácticas y opiniones del docente, investigador y estudiantes. Con el fin de ayudar en la búsqueda de argumentos que de alguna manera se vinculara, se utilizó software de análisis de datos cualitativos para facilitar la sistematización de la información recolectada y poder generar representaciones gráficas de los resultados que contribuyeran al análisis. Toda esta información fue organizada utilizando esquemas conceptuales e infografías, dependía si la información se adaptaba a este tipo de herramienta (Hernández, Fernández, Baptista, 2014).

## **Capítulo IV.**

### **4. Resultados y análisis**

La tecnología ha revolucionado la forma en que los estudiantes aprenden, y en este contexto, el uso de herramientas computacionales como complemento pedagógico se ha convertido en una oportunidad para mejorar el aprendizaje en el aula. En esta tesis, se exploraron las dificultades, potencialidades y buenas prácticas percibidas por docentes, investigadores y estudiantes universitarios en relación al uso de dos softwares como recurso didáctico para abordar el tema Geometría Molecular.

Los resultados obtenidos revelaron un panorama complejo y diverso en cuanto a la percepción y uso de estas herramientas. Por un lado, el docente enfrenta dificultades en la implementación de las herramientas en el aula, mientras que el investigador percibió su potencial en el desarrollo de nuevas metodologías de investigación. Para los estudiantes las herramientas son, sin duda, útiles para mejorar su comprensión del tema Geometría Molecular.

Estos resultados nos brindan la oportunidad de plantear nuevos retos y desafíos, y de crear estrategias de aprendizaje innovadoras que solucionen las dificultades del docente y generen motivación en los estudiantes. Una capacitación adecuada de los docentes en el uso de estas herramientas, la incorporación de metodologías activas en el aula y la colaboración entre docentes e investigadores son claves para lograr estos objetivos. Además, es importante continuar investigando sobre la efectividad que tienen algunas herramientas computacionales para mediar algunos temas abstractos de la Química.

#### **4.1. Dificultades afrontadas en la comprensión del tema Geometría Molecular**

##### **4.1.1 Dificultades afrontadas desde la perspectiva docente**

En el presente estudio se ha identificado que los docentes de química se enfrentan a diversas dificultades al enseñar el tema de Geometría Molecular. A través de entrevistas semiestructuradas, se pudo observar que el docente enfrenta desafíos en cuanto a la

representación de las moléculas que les brindan a los estudiantes, especialmente cuando se trata de representar una estructura tridimensional. Por otro lado, tenemos la limitante de tiempo, según el docente el volumen de información por cumplir compromete la posibilidad de ver los detalles geométricos o los arreglos estructurales de las moléculas en forma profunda. La falta de recursos tecnológicos y la variedad de sistemas operativos utilizados por los estudiantes dificultan aún más la enseñanza y la eficacia de la misma, aunado a esto el docente resalta que no se puede generalizar el hecho de que todos los estudiantes universitarios tienen buenas habilidades tecnológicas, ya que él ha notado que algunos no pueden descargar los programas que él sugiere.

Otra barrera identificada por el docente es la dificultad de los estudiantes para comprender las representaciones en la pizarra, lo que puede generar malos constructos y errores conceptuales. En general, el docente percibe que la enseñanza de Geometría Molecular es un desafío importante debido a la complejidad de los conceptos involucrados y la necesidad de una enseñanza experiencial que promueva un aprendizaje significativo de los estudiantes.

Es importante destacar que la pandemia del Covid-19 ha agravado estas dificultades para el docente, ya que la enseñanza remota limita aún más la capacidad que tiene para ofrecer una enseñanza experimental y una visualización adecuada de las moléculas.

Para autores como Sandí y Cruz (2016), las dificultades en la enseñanza de la GEOM, son didácticas, epistemológicas y sociológicas. Las dificultades didácticas se refieren a la falta de comprensión de algunos conceptos básicos de geometría molecular, las epistemológicas van en función de la falta de comprensión de conceptos teóricos y la carencia de habilidades para solucionar problemas reales. Por último, las sociológicas se refieren a la falta de motivación y al desinterés por el tema debido a su complejidad.

Para abordar estas dificultades, los autores proponen el uso de modelos moleculares y realización de ejercicios prácticos de carácter digital para subsanar los problemas didácticos, en cuanto a los epistemológicos se precisa una sinergia entre la enseñanza teórica y práctica, mientras que, para las dificultades sociológicas, recomendaron fomentar la motivación e interés de los estudiantes en la Geometría Molecular.

Las barreras didácticas, epistemológicas y sociológicas que se presentan pueden dificultar la comprensión y el aprendizaje de los estudiantes, especialmente en el contexto actual de enseñanza remota debido a la pandemia. Sin embargo, la propuesta de expertos en la materia de utilizar modelos moleculares y ejercicios prácticos de carácter digital para abordar estas dificultades, puede ser una solución efectiva para mejorar el aprendizaje y la comprensión de los conceptos básicos del tema Geometría Molecular. Al fomentar la motivación y el interés de los estudiantes en esta disciplina, se puede superar las barreras sociológicas y garantizar un aprendizaje significativo y efectivo.

La enseñanza de la Geometría molecular tuvo que reinventarse en los tiempos de pandemia, para el docente las dificultades eran más de carácter externo, ya que los estudiantes también tenían falta de acceso a dispositivos tecnológicos, así como mala conectividad, para él significaba no poder estar ejecutando una enseñanza uniforme. El docente durante este periodo de pandemia sacó un mayor provecho de los simuladores químicos y construyó una práctica basada en la indagación de moléculas. Los estudiantes debían estudiar las distancias interatómicas, los ángulos de enlace, y el peso atómico, utilizando el software Avogadro.

Quizás si el docente hubiera conocido un poco más sobre las virtudes del software Avogadro, podría haber explorado las extensiones que tiene por ejemplo con ORCA, el cual es un software de cálculo computacional que permite realizar optimización de geometrías, estados de transición y espectros IR, por citar algunas de sus funciones. Estos vínculos de trabajo computacional permiten diseñar experimentos con resultados muy fiables y que podrían no poder replicarse en un laboratorio convencional. ORCA es un software de código abierto, su comunidad es muy colaborativa y están constantemente desarrollando nuevos métodos y funcionalidades. También mantiene una lista de correo llamada ORCA Forum, donde los usuarios pueden hacer preguntas y discutir problemas relacionados con software, por último, se resalta el hecho de que los desarrolladores ofrecen cursos y talleres para usuarios nuevos, así como documentación detallada sobre sus capacidades. Es importante que los docentes puedan hacer uso de esta herramienta y así provean una enseñanza de la GEOM alineada a las tendencias tecnológicas.

Según Álvarez, Hernández, Domínguez y González (2019), un desarrollo importante del aprendizaje de la química es generar modelos de visualización dinámicos, que permitan

observar las propiedades geométricas y electrónicas de los átomos y las relaciones que hay entre las moléculas. Para estos autores el diseño de modelos visuales para conceptos abstractos ha demostrado que facilita a los estudiantes la captación y retención de la información. Otro motivo que se resalta, es que la Química Computacional cada día se está incorporando más a las universidades, esto conlleva a que el estudiante tenga que generar códigos y metodologías computacionales, donde se ponen en práctica los conocimientos en programación, álgebra lineal, física, química e inglés. Todo esto provee al estudiante de habilidades extras, las cuales marcan mucho la diferencia.

#### **4.1.2. Dificultades afrontadas desde la perspectiva del investigador.**

Los resultados indican que el investigador enfrenta varios obstáculos en su trabajo, uno de los más significativos es el de conectar precisamente la información con su aplicación correspondiente. Según describe, es difícil transmitir la utilidad de un proceso de investigación a estudiantes o a la comunidad, y es esencial revisar y contrastar cuidadosamente los resultados obtenidos con la teoría para garantizar que el proceso investigativo cumpla con altos estándares.

En cuanto a la dificultad de conectar la información con su aplicación correspondiente, algunos autores han señalado la importancia de que la investigación en ciencias naturales tenga una clara orientación hacia la resolución de problemas y necesidades prácticas. Además, se ha destacado la importancia de que los investigadores sean capaces de comunicar efectivamente los resultados de sus investigaciones a diferentes públicos, incluyendo estudiantes y la comunidad en general.

El investigador destaca la importancia de que los profesionales en química reconozcan y demuestren a sus estudiantes el amplio y fascinante campo de actuación de esta ciencia, y que los estudiantes comprendan y manejen la multidisciplinariedad en la que opera la química.

La figura 2 muestra que algunos de los desafíos del investigador, vienen en función de la accesibilidad al software y de la necesidad de mantener una actualización continua, también menciona que la compra de software se ha vuelto más crucial después de la pandemia del Covid-19, ya que esto ha supuesto una necesidad de reinventar la forma de mediar la

investigación. La revista Forbes informa que, durante la pandemia, las Tecnologías de la Información y Comunicación experimentaron un auge, permitiendo a las personas comunicarse con solo un clic, realizar reuniones, tomar decisiones, hacer compras y estudiar. Hoy más que nunca, las TICs muestran su importancia para la sociedad.

El investigador afirma que la mayor demanda de la tarea puede estar en interpretar correctamente los datos proporcionados por el cálculo computacional. Detrás de ese conjunto de comandos se encuentra un análisis matemático sólido que a menudo se pasa por alto. Sin embargo, factores como el tipo de teoría utilizada, el tipo de cálculo, si tiene o no carga, son solo algunos aspectos a considerar, pero en realidad su alcance es mucho más amplio. Por lo tanto, quien aborde este tema se beneficiará con una información que ampliará su perspectiva. Además de los desafíos mencionados previamente, el investigador también destaca la falta de tecnología en la UNA para estudiar la Geometría Molecular de manera profunda.

En este sentido, es necesario destacar que nuestro país se ha enfocado más en la investigación aplicada, lo que ha generado que este tema de la química no haya sido un interés priorizado. A pesar de ello, es importante mencionar que la Geometría Molecular es un aspecto fundamental de la química y su estudio es esencial para comprender la estructura de las moléculas y cómo esta estructura afecta a sus propiedades. Por tanto, sería necesario considerar la inversión en tecnología para mejorar la capacidad investigativa en este campo, a fin de que los investigadores puedan estudiar la Geometría Molecular con mayor precisión y profundidad. Esto permitiría no sólo mejorar la forma de investigar, sino también contribuir al avance de la química en general.

En su oficio, el investigador ha utilizado software principalmente para visualizar información, pero nunca para realizar experimentos, ha utilizado principalmente programas conocidos como dibujadores químicos, los cuales permiten representar visualmente la estructura molecular. Sin embargo, estos programas trabajan con valores preestablecidos y no permiten modificarlos, lo que limita la capacidad del investigador para realizar experimentos.

En relación a la accesibilidad al software y la necesidad de mantener una actualización continua, algunos autores han destacado el papel fundamental que juegan las TICs en la educación superior y la investigación científica. Además, se ha señalado que la

pandemia del Covid-19 ha acelerado la implementación de tecnologías en la educación superior.

En cuanto a la interpretación correcta de los datos proporcionados por el cálculo computacional, el investigador ha enfatizado la importancia de la formación en matemáticas, programación y estadística en la investigación científica, también se ha destacado la necesidad de que los investigadores dominen la teoría subyacente a los métodos computacionales que utilizan en sus investigaciones.

Por otro lado, la adquisición de licencias para los programas utilizados ha representado un obstáculo significativo para el investigador. El costo de estas es elevado y puede impedir que algunos investigadores accedan a estos recursos valiosos. A pesar de estas limitaciones, los programas utilizados han sido esenciales para visualizar y comprender la estructura molecular y sus propiedades. Por último, resaltó la importancia de que esta investigación aborde herramientas gratuitas de alto calibre, ya que verdaderamente suponen una alternativa para llevar a cabo innumerables estudios.

En el trabajo de Hernández, Barrera, Mendoza y Peña (2017), se realizó una revisión de varias herramientas de software libre y de código abierto, que se pueden utilizar para la enseñanza de la visualización y diseño molecular de metabolitos y macromoléculas. Dicha investigación también presenta algunos ejemplos de actividades y prácticas pedagógicas, que se pueden realizar utilizando herramientas de visualización y diseño molecular, por último, demuestra que la selección de las herramientas computacionales permitió al docente desarrollar imágenes didácticas originales de su interés y útiles para su práctica docente, es así como se evidencia la importancia que juegan las herramientas computacionales cuando lo que se quiere estudiar es muy pequeño y abstracto.

En cuanto a la adquisición de licencias para programas de software utilizados en investigación, estos autores han destacado la necesidad de promover el uso de herramientas de software libre y de código abierto en la investigación científica, como una forma de mejorar la accesibilidad y reducir los costos.

En la actualidad, las Tecnologías de la Información y las Comunicaciones (TICs) han tenido un gran impacto en todas las actividades humanas, incluyendo la química. La Química

Computacional es una rama moderna de la química, que utiliza la computadora para resolver problemas químicos mediante la aplicación de resultados de la química teórica. Esta técnica ha permitido la creación de programas de visualización y modelación molecular, lo que ha mejorado significativamente la comprensión de los temas de estudio. Por ejemplo, en Cuba, las universidades están enfrentando el desafío de organizar un nuevo plan de estudio para reducir la duración de las carreras a cuatro años, y así adaptarse a las necesidades socioeconómicas del país. Por lo tanto, es crucial utilizar las TICs en el diseño de actividades que promuevan la autogestión del estudio, el aprendizaje por parte de los estudiantes, y que permitan la optimización del tiempo necesario para la comprensión de los saberes básicos Gamboa et al. (2017).

#### **4.1.3. Dificultades afrontadas desde la perspectiva estudiantil.**

Los resultados de la presente investigación muestran que los estudiantes enfrentan dificultades significativas al estudiar el tema de Geometría Molecular (GEOM). Se identificaron tres principales obstáculos que experimentan al aprender este tema:

En primer lugar, se observó que los estudiantes tienen dificultades para dibujar estructuras químicas de manera correcta y darles un nombre apropiado. Los estudiantes también tienen dificultades para representar las distancias interatómicas y los ángulos de enlace.

En segundo lugar, los estudiantes enfrentan dificultades para visualizar estructuras tridimensionales de moléculas en un plano 2D como lo es en el cuaderno. La representación de la geometría molecular en una forma “real” también se presenta como un obstáculo importante para los estudiantes. En tercer lugar, se encontró que la falta de prácticas y ejercicios a disposición de los estudiantes es un factor crítico que contribuye a las dificultades en el aprendizaje del tema GEOM.

Ante estos desafíos, se exploraron soluciones pedagógicas y tecnológicas propuestas por los estudiantes para mejorar su aprendizaje. Se encontró que los estudiantes sugirieron el desarrollo de programas educativos específicos, la incorporación de visualizaciones 3D en el aula y la utilización de metodologías de enseñanza innovadoras como la realidad virtual y la

Inteligencia Artificial. Además, destacaron la importancia de una enseñanza de la química más clara, objetiva y gráfica.

Los resultados de esta investigación sugieren que el aprendizaje del tema GEOM, supone un desafío importante para los estudiantes de ingeniería química. Se destaca la necesidad de encontrar soluciones efectivas para superar las dificultades identificadas. La relación entre GEOM y las propiedades de las sustancias hace que sea un tema de vital importancia en la enseñanza de la química. Se sugiere continuar investigando para encontrar soluciones más efectivas en pro de mejorar el aprendizaje de GEOM y de la química en general.

A continuación, se resumen las principales dificultades que identificaron el docente, investigador y estudiantes.

**Dificultades que se perciben ante el tema GEOM**

**Docente**

- Representar los acomodos de la molécula, o sus movimientos.
- Tener que recurrir siempre a la imaginación.
- Tiempo limitado para abordar los contenidos.



**Investigador**

- Poco interés de la Universidad por obtener software.
- Estar actualizado en el uso correcto del software.
- Falta de capacitación.



**Estudiantes**

**Representación de las moléculas**

- Visualizar, modelar y dibujar estructuras químicas.
- Acomodar los ángulos y enlaces correctamente.
- Dimensionar la forma precisa de las moléculas
- Se me dificulta saber la forma correcta que va adoptar la molécula.



Figura 2. Dificultades para abordar el tema Geometría Molecular, según docente, investigador y estudiantes (elaboración propia).

En resumen, la triangulación de la información muestra que existen dificultades comunes desde diferentes perspectivas. Estas dificultades pueden superarse mediante el uso de tecnologías, el diseño de actividades prácticas y la promoción de la motivación e interés de los estudiantes. Por último, es importante considerar la inversión en tecnología si lo que se quiere es mejorar la capacidad investigativa en el campo de la Geometría Molecular.

La figura 2, expone lo que está sucediendo con el tema GEOM a nivel de dificultades, las moléculas deberían ser representadas y visualizadas en modelos 3D, como si fuera un paisaje vibrante y en constante evolución. Sin embargo, el camino hacia esta representación no es sencillo. Hay tres grupos clave que se enfrentan a dificultades en este proceso: docentes, investigadores y estudiantes.

Los docentes son como guías en un terreno desconocido, tratando de navegar por un mundo informático monolingüe, con obstáculos a su alrededor que limitan su capacidad para enseñar. Los investigadores son como exploradores, tratando de transmitir la importancia de sus hallazgos a una comunidad ajena, pero enfrentándose a barreras en la accesibilidad al software y la comprensión de los datos matemáticos detrás de los cálculos. Los estudiantes son como viajeros en un paisaje abstracto y simbólico, tratando de visualizar, modelar y dibujar estructuras químicas, pero con obstáculos en su camino como la falta de habilidades digitales y la monocultura de software.

Los investigadores Brown, C. Almuny, D. Williams, M. Whaley, B. Hyslop, R. (2012), de manera similar encontraron que la estrategia de utilizar software y modelos de visualización molecular puede ser una herramienta útil para mejorar el aprendizaje del tema GEOM. Los autores desarrollaron una estrategia de enseñanza centrada en el vínculo entre la Geometría Molecular y la hibridación del átomo central, para ello los estudiantes, utilizando el software, modelaron algunas moléculas y exploraron la hibridación del átomo central utilizando modelos de visualización molecular. Se encontraron que la estrategia mejoró significativamente la comprensión de los estudiantes sobre la geometría molecular y la hibridación del átomo central.

Es importante abordar estas dificultades para permitir que los docentes, investigadores y estudiantes puedan ver claramente la belleza y complejidad de la representación de las moléculas, al igual que un paisaje, y poder aprender, enseñar e investigar de manera efectiva en el mundo de la química.

#### **4.2. Potencial Pedagógico de dos herramientas computacionales (ORCA y Avogadro), como recursos didácticos para la mediación del tema Geometría Molecular.**

##### **4.2.1. Potencial pedagógico que perciben personas docentes, sobre el uso de dos herramientas de Química Computacional, como recurso didáctico para la mediación del tema Geometría Molecular.**

Los resultados de esta investigación muestran que el potencial percibido por el docente en cuanto al uso de herramientas computacionales en la enseñanza de la geometría molecular (GEOM) es elevado. Se encontró que el docente considera que estas herramientas tienen un gran potencial en cursos de química general, orgánica e inorgánica, ya que permiten una comprensión más precisa y visual del mundo molecular.

El docente entrevistado señaló que el uso de herramientas como Avogadro y Chemwindows es beneficioso para la enseñanza de la GEOM, ya que eliminan la necesidad de imaginar la molécula, muestran su tridimensionalidad y dinamicidad, además, estas herramientas solucionan las dificultades de dibujo y permiten a los estudiantes interactuar con las estructuras moleculares, fomentando así la indagación y la experimentación.

En cuanto a los recursos tecnológicos utilizados para enseñar GEOM, se encontró que prepara guías mediante las cuales los estudiantes pueden comparar y ver las longitudes de enlace utilizando el software Avogadro, esto desde su perspectiva, permite una mejor comprensión de los fenómenos químicos. Asimismo, se señaló la posibilidad de obtener el espectro infrarrojo de una molécula a través de estas herramientas, lo cual permite identificar si se llevó a cabo una reacción y generar trazabilidad a través de los espectros IR.

El docente también sugiere que con creatividad se podrían generar prácticas computacionales que muestren los fundamentos de la química molecular, permitiendo a cada docente crear su propio acervo de contenido (videos, simulaciones, imágenes de alta calidad, entre otras cosas). En este sentido, se considera que el uso de herramientas computacionales

en la enseñanza de la GEOM tiene un gran potencial para mejorar la comprensión y la experimentación de los estudiantes en el tema.

Sin embargo, se hizo hincapié en la necesidad de una capacitación adecuada en el uso de estas herramientas, ya que su implementación efectiva requiere un conocimiento técnico especializado.

Según el trabajo de Paredes y Molina (2018), los simuladores permiten la modelación de prácticas científicas, han logrado una gran adaptabilidad a los espacios destinados a la experimentación en el ámbito educativo. Estos medios tecnológicos facilitan la tarea de los profesores y estudiantes, dando oportunidad a que se equivoquen y puedan repetir la actividad sin ningún costo alguno. El uso de las TIC en la enseñanza de la química constituye un material fundamental que permite apoyar el descubrimiento y la construcción de los conceptos y habilidades a través de la interacción con herramientas virtuales de aprendizaje.

#### **4.2.2. Potencial pedagógico que perciben personas investigadoras, sobre el uso de dos herramientas de Química Computacional, como recurso didáctico para la mediación del tema Geometría Molecular.**

Para el investigador los factores más importantes a considerar en el análisis de optimización de geometría es el dominio del software y el conocimiento de la teoría. En cuanto al potencial de las herramientas de modelado y cálculo computacional, el investigador encuestado considera que estas pueden ser utilizadas como complemento, pero no como sustituto de la experimentación tradicional. Además, destaca la ventaja de la simulación en la optimización de procesos, ya que permite reducir el número de experimentos necesarios y ahorrar tiempo y recursos.

El investigador también valora el hecho de que las herramientas computacionales pueden ser importantes para atraer la atención de los estudiantes y sugiere que son más adecuadas para estudiantes de nivel medio debido a su madurez académica y mental. Por último, recomienda garantizar el acceso a software libre o la compra de licencias para fomentar la experimentación continua en los estudiantes.

#### **4.2.3. Potencial pedagógico que perciben personas estudiantes, sobre el uso de dos herramientas de Química Computacional, como recurso didáctico para la mediación del tema Geometría Molecular.**

Los resultados de la investigación señalan que los estudiantes identifican un gran potencial en el uso de tecnologías de simulación molecular y visualización 3D para mejorar la enseñanza de la química, específicamente el tema Geometría Molecular. Según los estudiantes, estos recursos permiten una virtualización de las moléculas, las cuales son imperceptibles a nuestros ojos, estas herramientas proveen experimentación y un mejor estudio de la estructura y comportamiento de la materia a nivel molecular.

Además, los estudiantes destacaron que estas herramientas son útiles para cualquier químico en el contexto tecnológico actual, en el que la computación es una parte integral del trabajo de laboratorio. Asimismo, la posibilidad de interactuar con las moléculas de manera gráfica y en tiempo real, permite una mayor comprensión de los conceptos teóricos y, por tanto, una mejor capacidad para aplicarlos en la práctica.

Cabe destacar que otra ventaja importante identificada por los estudiantes, es que estas herramientas son de carácter gratuito, lo que las hace accesibles para cualquier estudiante o profesional interesado en mejorar sus habilidades en química. En conjunto, estos resultados sugieren que la implementación de tecnologías de simulación molecular y visualización 3D puede ser una estrategia efectiva para mejorar la enseñanza de la química, y se recomienda su uso en programas educativos específicos y en metodologías de enseñanza innovadoras.

Basándonos en la información anterior, se generó la figura 2, la cual muestra el valor potencial de las herramientas computacionales para estudiar el tema GEOM, según el investigador, el docente y los estudiantes.

Beneficios	Investigador	Docente	Estudiantes
Innovación	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Mejora la calidad de la investigación	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Mejora en la enseñanza de la GEOM		<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Reduce la carga de trabajo	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Incrementa la eficacia en la enseñanza		<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Facilita la comprensión del tema GEOM	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Incrementa la motivación por la materia			<input checked="" type="checkbox"/>
Provee una mayor interactividad y participación en clase		<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Reduce la carga de estudio			<input checked="" type="checkbox"/>

Figura 3. Valor potencial de las herramientas computacionales ORCA y Avogadro (elaboración propia).

Para el investigador, el uso de herramientas computacionales en la enseñanza universitaria del tema geometría molecular, puede proporcionar varias ventajas. En primer lugar, el uso de estas herramientas puede permitir una mayor precisión y rapidez en el análisis de datos y resultados, lo que puede aumentar la eficiencia de la investigación. Además, el uso de herramientas computacionales puede proporcionar una perspectiva más amplia y

detallada de los resultados, lo que puede facilitar la interpretación de los mismos y la identificación de posibles patrones o tendencias. También, el uso de estas herramientas puede permitir la realización de experimentos y simulaciones en un entorno virtual, lo que puede reducir costos y aumentar la seguridad en la realización de experimentos en el laboratorio. Por último, el uso de herramientas computacionales puede ayudar al investigador a mantenerse actualizado y familiarizado con las últimas tendencias y avances en la enseñanza y la investigación de la geometría molecular y en Química general.

Para el docente, estas herramientas pueden mejorar la eficiencia en la enseñanza y el aprendizaje del tema, permitiendo una mejor comprensión y retención de los conceptos por parte de los estudiantes. Además, el uso de estas herramientas puede proporcionar al docente una mayor variedad de recursos para enseñar el tema y hacer que la experiencia de aprendizaje sea más interesante y atractiva para los estudiantes.

En cuanto a los estudiantes, las herramientas ayudan a visualizar y comprender mejor los conceptos de la geometría molecular, lo que puede conducir a una mejor comprensión y retención del tema. Además, el uso de herramientas computacionales puede hacer que la experiencia de aprendizaje sea más interesante y atractiva para los estudiantes, lo que puede aumentar su motivación y compromiso con el tema. En resumen, se observa un gran potencial para el uso de herramientas computacionales en la enseñanza del tema geometría molecular a nivel universitario, tanto para el investigador, el docente y los estudiantes.

Esta matriz puede ser utilizada como un recurso útil para ilustrar los beneficios potenciales de la integración de herramientas computacionales en la enseñanza universitaria del tema Geometría Molecular, además, puede ayudar a convencer a los docentes y a los estudiantes de la importancia en la implementación de estas herramientas en sus diversos contextos.

#### **4.3. Buenas prácticas educativas derivadas del uso de la Química Computacional en actividades de investigación, docencia y estudio de fenómenos vinculados con el tema de Geometría molecular.**

Los resultados de esta investigación sugieren que, para los encuestados, el uso de herramientas computacionales como ORCA y Avogadro es considerado como oportuno y

beneficioso. Además, se recolectó información que indica que el uso de estas herramientas representa buenas prácticas educativas, ya que ayudan a orientar, apoyar y simplificar el estudio del tema. En cuanto a la transferibilidad de estas prácticas, se llevaron a cabo experimentos computacionales en un contexto virtual debido a la pandemia del COVID-19. Se utilizó Zoom como herramienta para dirigir a un estudiante durante el proceso de experimentación, mientras los demás eran partícipes, lo que demuestra que estas prácticas son extrapolables a otros contextos universitarios.

#### **4.3.1. Buenas prácticas educativas derivadas del uso de la Química Computacional en actividades de docencia.**

Según los comentarios del docente, estas herramientas son consideradas como recursos valiosos para fomentar la experimentación y el cálculo químico. Además, son eficaces y útiles para comprender el tema de GEOM. Sin embargo, mostró preocupación al mencionar que el manejo de estas herramientas puede ser complejo y requiere de una formación continua debido a las constantes actualizaciones. El docente utiliza la herramienta Avogadro como medio de simulación en algunos momentos de su enseñanza, muestra la estructura de algunas moléculas complejas y explica las energías asociadas a los tres tipos de enlaces (simple, doble y triple).

El docente menciona que la Universidad no provee capacitación específica para el manejo de estas herramientas, lo que hace que el trabajo sea muy individual. Sin embargo, es importante mencionar que existe una comunidad amplia en torno a ORCA, cuyos desarrolladores trabajan en conjunto con la comunidad para brindar mejoras al sistema. Además, existen repositorios detallados y tutoriales en línea para ejecutar diversos análisis utilizando Avogadro y ORCA.

Según un informe de la UNESCO (2004), como se citó en Erika, et al (2009), señala que uno de los errores más significativos que se ha cometido, es que se ha tenido una visión demasiado técnica e instrumental en la formación de los docentes. Se han dedicado pocos esfuerzos para ayudarlos a incorporar la tecnología a la práctica didáctica curricular, y transformar entornos diferenciados para el aprendizaje. Las TIC no deben convertirse en la

única herramienta para enseñar química, pero deben ser un recurso usado, y usado con criticidad de un docente universitario.

Por último, destaca la versatilidad de estas herramientas como un factor a considerar, ya que son muy intuitivas y fáciles de usar, lo que puede favorecer su aceptación entre los estudiantes. Sin embargo, también menciona que operar ORCA sin una interfaz gráfica puede ser un desafío para los estudiantes, por lo que es importante simplificar la operabilidad lo más posible. En resumen, para el docente el uso de herramientas computacionales como ORCA y Avogadro son fundamentales para el estudio del tema GEOM, y son valoradas como recursos importantes para la experimentación y el cálculo químico, pero requieren de una formación continua y una comunidad amplia que brinde apoyo y mejoras constantes.

En esta línea Durán y Estay-Niculcar (2016), se refiere a las buenas prácticas universitarias, como una experiencia (programa o proyecto), que favorece significativamente la pertinencia social de las instituciones de Educación Superior, promoviendo un papel activo en la construcción de una sociedad más justa y sostenible social, política, cultural, medioambiental y económica. Según Grupo DIM, (2014), como se citó en (Durán y Estay-Niculcar 2016), la buena práctica docente es un conjunto de intervenciones educativas que facilitan el desarrollo de actividades de aprendizaje, logrando con eficiencia los objetivos previstos, así como otros aprendizajes de alto valor educativo.

Según Yáñez-Galleguillos y Soria- Barreto (2017), ha quedado constatado, que las buenas prácticas se relacionan directamente con el cambio metodológico en el proceso de enseñanza-aprendizaje, particularmente con la inclusión de las tecnologías, ajustado al nuevo perfil del estudiante. Las buenas prácticas que describen los participantes tienen una relación de simetría y de interdependencia, ya que cada uno se retroalimenta del otro. Para Zabalza (2012), (como se citó en Yáñez-Galleguillos y Soria- Barreto 2017), las buenas prácticas docentes, intencionan aprendizajes profundos y significativos en los estudiantes, además de motivación y efectividad.

#### **4.3.2. Buenas prácticas educativas derivadas del uso de la Química Computacional en actividades de investigación.**

El investigador comparte muchas opiniones con el docente, aunque las entrevistas fueron en tiempos distintos, acorde con lo encontrado, para ambos las herramientas computacionales, ORCA y Avogadro, son intuitivas de usar y resuelven problemas relacionados con el estudio de la Química. Sin embargo, el investigador enfatiza que la experimentación computacional no debe reemplazar completamente al laboratorio clásico, especialmente en carreras como la química industrial o la ingeniería en bioprocesos. En su opinión, estas herramientas pueden ser utilizadas para acelerar procesos y obtener datos precisos y rápidos, pero no pueden llenar las expectativas necesarias para una experimentación química.

Los datos recolectados también revelan que el investigador considera el manejo de estas herramientas como un reto considerable, esto debido a la poca capacitación que se proporciona. Sin embargo, es enfático en señalar que estas herramientas pueden tener un impacto positivo siempre y cuando se brinde una orientación constante. El investigador también ha notado un aumento gradual de material audiovisual en línea donde se utilizan estas herramientas, lo que le brinda confiabilidad en su uso.

Según Cuesta y Meneses (2020), la química computacional se ha convertido en pieza clave de las investigaciones científicas, permite entender diferentes procesos químicos desde un punto de vista molecular, lo que muchas veces es imposible conseguir mediante la experimentación, procesos como el descubrimiento de nuevos medicamentos, han dejado de depender del factor del azar para transformarse en procesos más eficientes, llegando a reducir tiempo en un 50%. Los investigadores alrededor del mundo pueden abordar una infinidad de problemas y sentar las bases para procesos químicos más eficientes.

#### **4.3.3. Buenas prácticas educativas derivadas del uso de la Química Computacional en actividades de autoaprendizaje.**

Los resultados de esta investigación sugieren que el uso de herramientas computacionales como Avogadro y ORCA es percibido por los estudiantes, como

beneficioso para el proceso de enseñanza-aprendizaje en el estudio del tema Geometría Molecular. Según los datos recabados en los cuestionarios y frases incompletas, los estudiantes argumentaron que estos softwares pueden ayudar a mejorar la representación visual de una molécula, brindando una mejor aproximación a la realidad. Además, se identificó que los estudiantes enfrentan problemas visoespaciales complejos en el estudio de la geometría molecular, los cuales son difíciles de resolver mediante técnicas de enseñanza tradicionales. Se argumentó que el uso de herramientas computacionales puede ayudar a mejorar las posibilidades de investigación y diseñar experimentos rápidos y con resultados fiables.

Los estudiantes valoraron altamente la multidisciplinariedad que presenta el uso de herramientas computacionales en el estudio de la geometría molecular, y consideran que estas herramientas suponen una innovación y una transformación en la forma de enseñar y aprender el tema.

A continuación, se presenta una matriz que sirve para describir de forma clara y concisa las consideraciones de buenas prácticas percibidas por el docente, investigador y estudiantes, sobre la idea de utilizar herramientas computacionales para estudiar el tema GEOM.

# Buenas Prácticas

PARÁMETROS	DOCENTE	INVESTIGADOR	ESTUDIANTES
Funcionalidad	Se elimina "parcialmente" la abstracción que tiene la química molecular.	Valiosa para experimentación y cálculo químico.	Simplifican el estudio del tema GEOM
Interfaz intuitiva	Avogadro lo conozco, veo como desafío trabajar sin una interfaz gráfica en ORCA	ORCA supone un reto, cada software tiene su peculiaridad.	Avogadro es intuitivo, ORCA utiliza comandos que hay que aprender.
Precisión y confiabilidad	Proveen resultados eficaces y confiables	Es importante siempre contrastar los resultados con la teoría.	Es fascinante experimentar con la computadora y llegar al valor teórico.
Comunidad y recursos	Es necesario una comunidad activa	Son importantes las discusiones y retroalimentaciones.	Hay disponibles tutoriales, ejemplos y prácticas en la red.
Soporte y actualizaciones	Hay que seguir el paso de las actualizaciones y no es fácil.	Hay que escoger un software con soporte serio.	La actualización es compleja y necesaria.
Accesibilidad (ORCA y Avogadro)	<b>GRATIS</b>	<b>GRATIS</b>	<b>GRATIS</b>

Figura 4. Consideraciones de buenas prácticas al utilizar herramientas computacionales para abordar el tema GEOM (elaboración propia).

Los resultados de la investigación sobre el uso de herramientas computacionales en química demuestran que estas herramientas son valoradas por el docente, investigador y estudiantes, por su potencial para mejorar la experimentación, el cálculo y la resolución de problemas relacionados con el tema GEOM.

En cuanto a la accesibilidad, los resultados sugieren que la versatilidad y facilidad de uso son importantes para su aceptación, pero también se reconocen desafíos en su implementación.

En resumen, la matriz 1.2 muestra que los comentarios y opiniones sobre las herramientas computacionales ORCA y Avogadro varían entre los diferentes grupos, aunque en general son percibidas de manera positiva. El docente y los estudiantes las ven como

valiosas y útiles, mientras que el investigador tiene una opinión más equilibrada, destacando tanto las fortalezas como las preocupaciones.

Según el estudio de Patiño (2017), la Química computacional puede ayudar a los estudiantes a comprender conceptos complejos de química, como la estructura molecular, las reacciones químicas y termodinámicas, además puede ser una herramienta útil para enseñar a los estudiantes cómo se lleva a cabo la investigación en química, así como para desarrollar habilidades computacionales y de programación. El uso de la química computacional también puede ayudar a los estudiantes a realizar experimentos virtuales, lo que les permite explorar diferentes escenarios y observar resultados sin los costos y riesgos asociados con los experimentos físicos.

En la era digital, las herramientas computacionales se han vuelto cada vez más relevantes en una variedad de campos, incluyendo la química. Las herramientas computacionales ofrecen una amplia gama de funciones, desde la experimentación hasta el cálculo químico, y se han utilizado tanto en investigación como en enseñanza. Sin embargo, la evaluación de su uso desde diferentes perspectivas es fundamental para comprender su verdadero valor en la química.

En este estudio, se ha evaluado el punto de vista de tres grupos: docente, investigador y estudiantes, para comprender mejor la valoración y preocupaciones que se tienen en cuanto a estas herramientas. A continuación, se presentarán los resultados de las valoraciones, incluyendo las fortalezas y las preocupaciones de cada grupo en cuanto al uso de herramientas computacionales en la química.

## Valoraciones, fortalezas y preocupaciones de utilizar herramientas computacionales.

Participantes	Docente	Investigador	Estudiantes
Punto de vista	Favorable	Mezcla de opiniones	Favorable
Valoración de ORCA y Avogadro	<ul style="list-style-type: none"> <li>Solventa las dificultades de dibujo.</li> <li>Son gratuitas.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Simplifican las tareas</li> <li>Ahorran tiempo y recursos.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Abanico de nuevas posibilidades para investigar.</li> </ul>
Fortalezas	<ul style="list-style-type: none"> <li>Logran representar la tridimensionalidad de la molécula y la dinamicidad de la misma.</li> <li>Elimina el hecho de tener que imaginar la molécula.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Son de carácter gratuito.</li> <li>Importantes para el desempeño laboral de un químico.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Logra representar las características intrínsecas de la molécula.</li> <li>Son gratuitas.</li> </ul>
Preocupaciones	<ul style="list-style-type: none"> <li>Se necesita una actualización constante.</li> <li>La descarga e instalación de ORCA no es intuitiva.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Tener una correcta interpretación de los datos.</li> <li>Vincular los datos con la aplicación.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Utilizar una herramienta sin interfaz gráfica.</li> <li>Utilizar comandos.</li> </ul>

Figura 5. Fortalezas y preocupaciones en el uso de las herramientas computacionales ORCA y Avogadro, (elaboración propia).

Este estudio encontró que estas herramientas son recursos valiosos para la experimentación y el cálculo químico, y sus fortalezas radican en su versatilidad, facilidad y variedad de utilidades.

Sin embargo, se observó que la falta de capacitación adecuada en el manejo de estas herramientas es una preocupación común entre los encuestados (as). Es evidente la necesidad de una formación continua y especializada para aprovechar todo el potencial de estas herramientas y evitar que estas oportunidades se disipen sin generar el impacto que deberían.

Además, el investigador reconoce que estas herramientas no deben reemplazar completamente la experimentación en el laboratorio, sino complementarla. Por lo tanto, es crucial encontrar el equilibrio correcto entre el uso de herramientas computacionales y la experimentación en el laboratorio.

Por otro lado, los estudiantes consideran que estas herramientas son fundamentales para el proceso de enseñanza-aprendizaje, ya que mejoran la representación visual de las moléculas y facilitan la comprensión de los conceptos químicos.

El presente estudio pone de relieve la importancia que tienen las herramientas computacionales en la química, pero a su vez, subraya la necesidad imperante de una adecuada formación y balance en su uso en conjunto con la experimentación en el laboratorio. Es esencial que se encuentre un equilibrio adecuado entre el uso de las herramientas computacionales y la experimentación en el laboratorio “clásico”, ya que ambos enfoques son complementarios y esencialmente necesarios en el estudio de la química. Para aprovechar el máximo potencial de estas herramientas, se requiere una capacitación especializada y continua, lo que garantiza su correcta aplicación en la investigación y enseñanza de la química. En consecuencia, el uso adecuado de herramientas computacionales en química puede acelerar procesos, proporcionar datos que no se pueden obtener en el laboratorio y, en general, mejorar la eficacia, la enseñanza y eficiencia de la investigación en el tema Geometría Molecular.

## Capítulo V.

### 5. Conclusiones y Recomendaciones

#### 5.1. Conclusiones

A continuación, se presentan las conclusiones obtenidas de los principales resultados y su respectivo análisis con base en las categorías descritas en apartados anteriores, además se incorporan recomendaciones dirigidas a otros investigadores interesados en abordar el objeto de estudio de este trabajo, Finalmente se brindan recomendaciones dirigidas a la Facultad de Ciencias Exactas, a personal docente interesado en el aprovechamiento de las herramientas de Química Computacional y a otras personas investigadoras de la carrera Enseñanza de las Ciencias interesadas en el objeto de estudio de este trabajo.

##### 5.1.1. Dificultades en la comprensión del tema Geometría Molecular

- En cuanto a la percepción general de los estudiantes acerca de la Geometría Molecular, la mayoría la considera una temática interesante y relevante. No obstante, un pequeño porcentaje de estudiantes presenta mayores dificultades en su comprensión.
- La falta de herramientas adecuadas para visualizar estructuras tridimensionales de las moléculas es una de las principales dificultades que enfrentan estudiantes al estudiar el tópico de Geometría Molecular.
- Los programas de modelado molecular y los visualizadores tridimensionales representan una alternativa accesible para lograr visualizar y comprender la disposición espacial de los átomos y las moléculas.
- La información recolectada y sistematizada sugiere que la comprensión de la estructura tridimensional de las moléculas sigue siendo un reto para las personas estudiantes. En particular, se observa que la transición de una estructura bidimensional a una estructura tridimensional puede ser difícil para algunos estudiantes.
- Por otro lado, se identificó que los estudiantes que utilizan herramientas tecnológicas para el estudio de la Geometría Molecular, como programas de modelado molecular y visualizadores tridimensionales, presentan mejores experiencias y una mayor comprensión del tema.

##### 5.1.2. Potencial Pedagógico de dos herramientas computacionales (ORCA y Avogadro), como recursos didácticos para la mediación del tema Geometría Molecular.

- Los resultados de esta investigación demuestran que las herramientas computacionales Avogadro y ORCA presentan un gran potencial como recursos didácticos para el desarrollo de actividades experimentales en el tema de Geometría Molecular.

- Las personas estudiantes que participaron en este estudio perciben a ambas herramientas como útiles y valiosas para su formación académica, lo que sugiere una alta aceptación y demanda de este tipo de recursos.
- Se destaca la gran utilidad que ofrecen estas herramientas para el aprendizaje de la Geometría Molecular gracias al desarrollo de habilidades visoespaciales en personas estudiantes.
- Se evidenció que una de las principales dificultades para las personas estudiantes es la necesidad de no contar con acompañamiento para lograr un aprovechamiento óptimo del recurso.

### **5.1.3. Buenas prácticas educativas derivadas del uso de la Química Computacional en actividades de investigación, docencia y estudio de fenómenos vinculados con el tema de Geometría molecular.**

- De acuerdo con las perspectivas de las personas consultadas se ha comprobado que las herramientas computacionales ORCA y Avogadro podrían ser recursos de gran utilidad para abordar el tema de Geometría molecular, capaces de captar el interés de estudiantes y promover la comprensión de fenómenos abstractos.
- Las herramientas de Química Computacional analizadas cumplen criterios de aplicabilidad en diversos escenarios educativos, las personas consultadas concuerdan e identifican una oportunidad de innovación en su aprovechamiento desde la Enseñanza de la Química.
- Aunque existen experiencias puntuales relacionadas con el uso de estas herramientas en actividades de investigación, docencia y autoaprendizaje por parte de las personas consultadas en la UNA, es probable que en el momento de la ejecución de este estudio no existía un nivel de madurez adecuado en su implementación como para poder establecer una lista robusta de buenas prácticas educativas en el aprovechamiento de herramientas de química computacional para el abordaje del tema Geometría molecular.

## **5.2. Recomendaciones**

### **5.2.1. A la Facultad de Ciencias Exactas**

- Promover la integración de tecnologías de computación de alto rendimiento que permitan desarrollar simulaciones y cálculo computacional en cursos de ciencias básicas con componente experimental como es el caso de los cursos de Química Orgánica.
- Fomentar la capacitación de docentes y estudiantes en el aprovechamiento de herramientas de Química Computacional para su incorporación en actividades de docencia y éxito académico de la comunidad universitaria.
- Sistematizar mecanismos de documentación de buenas prácticas educativas en cursos de ciencias experimentales que utilizan herramientas computacionales para el abordaje de fenómenos abstractos como la Geometría Molecular.
- Promover colaboraciones académicas entre expertos en Química Computacional, Ciencias de la Computación y Enseñanza de las Ciencias para generar los espacios de acompañamiento y estrategias organizacionales que permitan incorporar estas herramientas en las ofertas académicas de manera efectiva.

### **5.2.2. A docentes de Química Orgánica**

- Fomentar la incorporación de herramientas computacionales en la estrategia metodológica de cursos teóricos y de laboratorio, para contribuir en la comprensión y representación visual de las moléculas.
- Promover actividades de transferencia de conocimiento sobre el aprovechamiento de software especializado y herramientas de computación avanzada disponibles para la docencia que evidencien sus potencialidades y aplicabilidad en los cursos que imparten.
- Promover la participación de estudiantes de Enseñanza de las Ciencias en proyectos relacionados con el aprovechamiento de herramientas computacionales de tal forma que puedan aplicar las lecciones aprendidas en su práctica profesional.

### **5.2.3. A personas investigadoras en Enseñanza de las Ciencias**

- Promover el desarrollo de experiencias de aprendizaje y espacios de discusión que permitan realizar demostraciones, comunicar resultados de implementación en programas de investigación y realizar consultas a personas expertas con amplia experiencia en el aprovechamiento de las herramientas en contextos de investigación y docencia.
- Participar en experiencias de capacitación y consecución de fondos que permitan implementar proyectos educativos basados en el uso de recursos tecnológicos para la enseñanza de ciencias experimentales en los niveles de la educación básica y media.
- Implementar herramientas computacionales en experiencias piloto dentro de su práctica docente que le permitan acumular lecciones aprendidas y su divulgación a

través de la comunicación de resultados a autoridades y colegas interesados en el aprovechamiento de dichas herramientas en sus clases.

## Referencias bibliográficas

- Agencia de Calidad de la Educación. (2014). Buenas prácticas: sistemas de trabajo destacables según los informes de visitas de aprendizaje. [http://archivos.agenciaeducacion.cl/estudios/Estudio\\_Buenas\\_practicas\\_visitas\\_aprendizaje\\_2014.pdf](http://archivos.agenciaeducacion.cl/estudios/Estudio_Buenas_practicas_visitas_aprendizaje_2014.pdf)
- Álvarez, C. Maroto, J. (2012). La elección del estudio de caso en investigación educativa. *Gazeta de Antropología*, 28(1). [https://www.ugr.es/~pwlac/G28\\_14Carmen\\_Alvarez-JoseLuis\\_SanFabian](https://www.ugr.es/~pwlac/G28_14Carmen_Alvarez-JoseLuis_SanFabian)
- Álvarez-Montero, F. Mojardín-Heraldez, A. Rocha-Ruiz, E. (2017). Computadoras y educación: una introducción breve. DOI: 10.13140/RG.2.2.29690.49601
- Amador, C. Olvera, C. (2009). La química computacional en el salón de clase. *Educación química*, 20(2), 182-186. [http://www.scielo.org.mx/scielo.php?pid=S0187-893X2009000200012&script=sci\\_abstract&tlng=es](http://www.scielo.org.mx/scielo.php?pid=S0187-893X2009000200012&script=sci_abstract&tlng=es)
- Arroyo, J. Víquez, M. (2011). Implementación del software GeoGebra para modelar funciones reales de variable real. *CIEMAC (TEC)*. <https://docplayer.es/182590738-Memorias-vii-congreso-internacional-sobre-la-ensenanza-de-la-matematica-asistida-por-computadora-cartago-costa-rica-2011.html>
- Azofeifa, R. (2011). Acceso y uso del software Graphing Calculator. *CIEMAC (TEC)*. <https://docplayer.es/182590738-Memorias-vii-congreso-internacional-sobre-la-ensenanza-de-la-matematica-asistida-por-computadora-cartago-costa-rica-2011.html>
- Barrandas, F. (2016). Los orbitales en la educación química: un análisis mediante su representación gráfica. (Tesis Doctoral). Universidad Complutense de Madrid. <https://eprints.ucm.es/40501/1/T38136.pdf>
- Bautista, N. (2011). *Proceso de la investigación cualitativa*. Bogotá: El Manual Moderno Ltda.S.A.
- Blázquez, A. (2017). *Realidad aumentada en Educación*. Manual. Rectorado (UPM). <http://oa.upm.es/45985/>
- Borchardt, M. Roggi, I. (2017). *Ciencias de la computación en los sistemas educativos de América Latina*. <https://unesdoc.unesco.org/ark:/48223/pf0000372138.locale=en>

- Caballero, C. Vidal, T. (2014). La actividad práctica experimental de la Química y el empleo de los softwares educativos como modo de actuación en la formación docente. *VIII Congreso Internacional de Didácticas de las Ciencias*. <http://www.unesco.org/new/fileadmin/MULTIMEDIA/FIELD/Havana/images/dc2014.pdf>
- Calderón, S. Iglesias, E. (2018). La computación científica en la enseñanza de la Ingeniería Química. Universidad de los Andes. [https://www.researchgate.net/publication/324991452\\_La\\_computacion\\_cientifica\\_en\\_la\\_ensenanza\\_de\\_la\\_Ingenieria\\_Quimica\\_Scientific\\_Computing\\_in\\_Chemical\\_Engineering\\_Education](https://www.researchgate.net/publication/324991452_La_computacion_cientifica_en_la_ensenanza_de_la_Ingenieria_Quimica_Scientific_Computing_in_Chemical_Engineering_Education)
- Castejón, J. García-Fernández, J. Gilar, R. Gomis, N. Gonzáles, C. Ivorra, S. Jover, I. López, M. Lozano, M. Millá, M. Miñano, P. Navas, L. Pérez, A. Poveda, P. Sampascual, G. Soriano, J. (2018). Dificultades y trastornos del aprendizaje y del desarrollo en infantil y primaria. <https://serproductivo.org/wp-content/uploads/2018/03/dificultades-y-trastornos-de-aprendizaje.pdf#page=36>
- Castillo, W. Martínez, F. Álamo, L. Sojo, V. Ramírez, B. Peraza, A. Rojas, L. Sánchez, M. Echeverría, M. Alfonzo, F. Rondón, P. Martínez, M. Ruetter, F. (2017). EduQuim, una herramienta computacional para el aprendizaje y la enseñanza de Química en la escuela secundaria. *Educare*, 21(68), 127-141. <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=35652744013>
- Castro, G. Rodríguez, L. (2017). “Uso de las Tecnologías de Información y Comunicación en el proceso de enseñanza -aprendizaje, en los estudiantes del Liceo Sonafluca, CINDEA San Isidro de Peñas Blancas y Colegio Técnico Profesional La Fortuna”, San Carlos, Costa Rica. (Tesis de Maestría). [https://repositoriotec.tec.ac.cr/bitstream/handle/2238/10628/uso\\_tecnologias\\_informacion\\_comunicacion\\_proceso\\_ensenanza\\_aprendizaje\\_estudiantes\\_liceo\\_sonafluca\\_cindea\\_san\\_isidro\\_penas\\_blancas\\_colegio\\_tecnico\\_profesional\\_fortuna.pdf?sequence=1&isAllowed=y](https://repositoriotec.tec.ac.cr/bitstream/handle/2238/10628/uso_tecnologias_informacion_comunicacion_proceso_ensenanza_aprendizaje_estudiantes_liceo_sonafluca_cindea_san_isidro_penas_blancas_colegio_tecnico_profesional_fortuna.pdf?sequence=1&isAllowed=y)

- CeNAT. (2019). CeNAT capacita a estudiantes e investigadores en el uso de computación de alto rendimiento. Costa Rica High Performance Computer School. <http://www.cenat.ac.cr/es/cenat-capacita-a-estudiantes-e-investigadores-en-el-uso-de-computacion-de-alto-rendimiento/>
- Chacón, N. Saborío, F. Nova, N. (2016). El uso de recursos didácticos de la química para estudiantes en los colegios académicos diurnos de los circuitos 09 y 11 San José, Costa Rica. *EDUCARE*, 20(3), 1-24. <https://www.revistas.una.ac.cr/index.php/EDUCARE/article/view/7111>
- Chivatá, V. Cifuentes, M. (2017). Problematización didáctica de la geometría molécula: Estrategias para la caracterización didáctica en la formación inicial de los profesores de química. Tesis de licenciatura en Química, Universidad Distrital Francisco José de Caldas. <http://repository.udistrital.edu.co/bitstream/11349/6761/1/Chivat%C3%A1Curre%20VivianVanesa2017.pdf>
- Corchuelo-Rodriguez, C. (2018). Gamificación en educación superior: Experiencia innovadora para motivar estudiantes y dinamizar contenidos en el aula. *EDUTEC, Revista Electrónica de Tecnología Educativa*, 63.\_\_\_\_DOI: dx.doi.org/10.21556/edutec.2018.63.927
- Coto, G. Villalobos, J. (2018). Análisis del uso de aplicaciones móviles en los procesos y aprendizaje de la química, y sus posibilidades de implementación, como sustento para el diseño de una guía práctica que permita utilizar estas tecnologías en el proceso educativo. (Tesis de Licenciatura). <http://repositorio.sibdi.ucr.ac.cr:8080/jspui/handle/123456789/5918>
- Díaz-Campos, B. (2016). Realidad aumentada en la educación. *Entorno*, 61, 47-53. DOI: <https://doi.org/10.5377/entorno.v0i61.6129>
- Durán, R. (2015). La educación virtual universitaria como medio para mejorar las competencias genéricas y los aprendizajes a través de buenas prácticas docentes. (Tesis doctoral). [Estudio comparativo sobre educación presencial y virtual y su incidencia en el desarrollo de competencias en estudiantes de pregrado de la Universidad Tecnológica de Panamá \(upc.edu\)](http://repositorio.upc.edu/bitstream/handle/10252/10252/1/Estudio%20comparativo%20sobre%20educaci%C3%B3n%20presencial%20y%20virtual%20y%20su%20incidencia%20en%20el%20desarrollo%20de%20competencias%20en%20estudiantes%20de%20pregrado%20de%20la%20Universidad%20Tecnol%C3%B3gica%20de%20Panam%C3%A1.pdf)

- Durán, R. Estay-Niculcar, Christian, A. (2016). Formación en buenas prácticas docentes para la educación virtual. *Revista Iberoamericana de Edicación Superior a Distancia (RIED)*, 19, (1), 209-232. <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=331443195011>
- Echeverría, B. Martínez, P. (2018). Revolución 4.0, Competencias, Educación y Orientación. *Revista Digital de investigación en Docencia Universitaria*, 12(2), 4-34. DOI: <https://doi.org/10.19083/ridu.2018.831>
- Erika, P. Pérez, D. Gras-Martí, A. Gras-Velázquez, A. Guerrero, N. Gurrola, T. Joyce, A. Mora-Torres, E. Pedraza, Y. Ripoll, E. Santos, J. (2009). Experiencias de enseñanza de la química con el apoyo de las TIC. *ELSEVIER*, (3), 20, 320-329. [10.1016/S0187-893X\(18\)30032-6](https://doi.org/10.1016/S0187-893X(18)30032-6)
- Flamini, L. Wainmaier, C. (2012). Representaciones moleculares: Reflexiones sobre su enseñanza [en línea]. III Jornadas de Enseñanza e Investigación Educativa en el campo de las Ciencias Exactas y Naturales, 26, 27 y 28 de septiembre de 2012, La Plata, Argentina. [http://www.memoria.fahce.unlp.edu.ar/trab\\_eventos/ev.3671/ev.3671.pdf](http://www.memoria.fahce.unlp.edu.ar/trab_eventos/ev.3671/ev.3671.pdf)
- Galagovsky, L. Bekerman, D. (2009). La Química y sus lenguajes: un aporte para interpretar errores de los estudiantes. *Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias*, 8(3), 4. [http://reec.uvigo.es/volumenes/volumen8/ART11\\_Vol8\\_N3.pdf](http://reec.uvigo.es/volumenes/volumen8/ART11_Vol8_N3.pdf)
- Gamboa-Carballo, J. Ferino-Pérez, A. Lau-González, M. Hernández-Garcés, A. Corona-Hernández, J. Jáuregui-Haza, U. (2017). Las TICs como herramienta para visualizar estructuras moleculares en la enseñanza de la química general. *Revista Cubana de Química*, 29, 3. 466-479. <http://scielo.sld.cu/pdf/ind/v29n3/ind11317.pdf>
- García, C. Burgos, D. Estepa, P. Jaspez, J. (2019). Aprender con tecnologías para enseñar con tecnologías en República Dominicana. El programa República Digital Educación. *Revista Iberoamericana de Educación*, 79 (1), 115-134. <https://rieoei.org/RIE/issue/view/283>
- García, J. (2015). La Química Computacional como herramienta de la Química Experimental. *Encuentro con la Química*, 1(1) 46-47. [http://karin.fq.uh.cu/scq/Encuentro con la Quimica/Encuentro con la Quimica V ol1\\_No1.pdf](http://karin.fq.uh.cu/scq/Encuentro con la Quimica/Encuentro con la Quimica V ol1_No1.pdf)

- García, J. (2018). Los modelos y el modelaje científico para la enseñanza y el aprendizaje del concepto geometría molecular. Tesis de Maestría en Enseñanza de las Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Colombia. <http://bdigital.unal.edu.co/65712/1/1053822691.2018.pdf>
- Gómez, A. (2008). Construcción de explicaciones Multimodales: ¿Qué aportan los diversos registros Semióticos? *Revista Latinoamericana de Estudios Educativos*, 4(2) 83-99. <https://www.redalyc.org/pdf/1341/134112597006.pdf>
- Gutiérrez, M. Villareal, M. Espinosa, M. (2017). Análisis de las mejores prácticas docentes (DIDACTOEUGENIA): en el caso de una Universidad privada de la ciudad de México. XIV Congreso Nacional de Investigación Educativa (COMIE). <https://www.comie.org.mx/congreso/memoriaelectronica/v14/doc/0833.pdf>
- Hederich-Martínez, C. Camargo-Uribe, A. López-Vargas, O. (2018). Aportes a la investigación sobre educación superior virtual desde América Latina. [https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=6sibDwAAQBAJ&oi=fnd&pg=PA117&dq=el+desarrollo+computacional+de+la+mano+con+la+educaci%C3%B3n&ots=jeMaJqmYjd&sig=tUvnRAmbQC7\\_n6saGh2l3tRJwpU#v=onepage&q=el%20desarrollo%20computacional%20de%20la%20mano%20con%20la%20educaci%C3%B3n&f=false](https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=6sibDwAAQBAJ&oi=fnd&pg=PA117&dq=el+desarrollo+computacional+de+la+mano+con+la+educaci%C3%B3n&ots=jeMaJqmYjd&sig=tUvnRAmbQC7_n6saGh2l3tRJwpU#v=onepage&q=el%20desarrollo%20computacional%20de%20la%20mano%20con%20la%20educaci%C3%B3n&f=false)
- Hernández, R. Fernández, C. Baptista, M. (2014). Metodología de la investigación. Editorial McGraw-Hill.
- Jara, I. Hepp, P. Rodríguez, J. Claro, M. (2019). Políticas y prácticas para la enseñanza de las Ciencias de la Computación en América Latina. *Microsoft*. [https://www.researchgate.net/publication/335611854\\_Políticas\\_y\\_prácticas\\_para\\_la\\_enseñanza\\_de\\_las\\_Ciencias\\_de\\_la\\_Computación\\_en\\_América\\_Latina#pf3](https://www.researchgate.net/publication/335611854_Políticas_y_prácticas_para_la_enseñanza_de_las_Ciencias_de_la_Computación_en_América_Latina#pf3)
- Ladino, Y. Tovar, C. (2014). Evaluación de las estrategias Metacognitivas, para la comprensión de textos científicos. *Enseñanza de las Ciencias*, 1.1. [https://www.researchgate.net/publication/237223005\\_EVALUACION\\_DE\\_LAS ESTRATEGIAS\\_METACOGNITIVAS\\_PARA\\_LA\\_COMPRENSION\\_DE\\_TEXTOS\\_CIENTIFICOS](https://www.researchgate.net/publication/237223005_EVALUACION_DE_LAS ESTRATEGIAS_METACOGNITIVAS_PARA_LA_COMPRENSION_DE_TEXTOS_CIENTIFICOS)

- Latorre, M. (2018). Historia del web, 1.0, 2.0, 3.0 y 4.0. Universidad Marcelino Champagnat. [http://umch.edu.pe/arch/hnomarino/74\\_Historia%20de%20la%20Web.pdf](http://umch.edu.pe/arch/hnomarino/74_Historia%20de%20la%20Web.pdf)
- León, G. Viña, S. (2017). La inteligencia artificial en la educación superior. Oportunidades y amenazas. *INNOVA Research Journal*, 2(8.1), 412-422. DOI: <https://doi.org/10.33890/innova.v2.n8.1.2017.399>
- López, W. Márquez, A. Vera, F. (2008). Estrategias metacognitivas usadas en la lectura de un texto de química. *Revista Científica Electrónica de Ciencias Humanas*, 10(4), 49-80. [https://www.researchgate.net/publication/28243941\\_Estrategias\\_metacognitivas\\_usadas\\_en\\_la\\_lectura\\_de\\_un\\_texto\\_de\\_quimica](https://www.researchgate.net/publication/28243941_Estrategias_metacognitivas_usadas_en_la_lectura_de_un_texto_de_quimica)
- Lozada, C. Betancur, S. (2016). La gamificación en la educación superior: una revisión sistemática. *Revista Ingenierías Universidad de Medellín*, 16 (31), 97-124. DOI: 10.22395/rium. v1 6 n31 a5
- Lugo, C. Briceño, J. González, M. (2018). Estrategia de innovación educativa y uso de las TIC para el aprendizaje (ETIC@). *SITEAL*. [https://www.siteal.iiep.unesco.org/sites/default/files/sit\\_accion\\_files/co\\_5012.pdf](https://www.siteal.iiep.unesco.org/sites/default/files/sit_accion_files/co_5012.pdf)
- Martínez, M. (2000). La investigación cualitativa etnográfica en educación. *Trillas*, (35), 757-758. <http://erevistas.saber.ula.ve/index.php/educere/article/viewFile/11645/21921922760>
- Martínez-Hung, H. García-López, A. Escalona-Arranz, J. (2017). Modelos de Realidad Aumentada aplicados a la enseñanza de la Química en el nivel universitario. *Revista Cubana de Química*, 29(1), 13-25. [http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S2224-54212017000100002](http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S2224-54212017000100002)
- Marzocchi, V.A. Cagnola, E. A. D'Amato, M. A. Vanzetti, N. A. Leonarduzzi, R. (2010). *FABICIB*, 14(1). <https://bibliotecavirtual.unl.edu.ar/publicaciones/index.php/FABICIB/article/view/869>

- Marzocchi, V. Vilchez, A. D'Amato, M. Marino, L. Vanzetti, N. (2012). Incorporación de TICs de modelado molecular en la enseñanza universitaria de la Química. *Revista Iberoamericana de Educación en Tecnología y Tecnología en Educación*. (8), 9-15. <https://teyet-revista.info.unlp.edu.ar/TEyET/article/view/251>
- McMillan, J. Schumacher, S. (2005). *Investigación Educativa*. Pearson Educación, S. A.
- Meneses, J. (2016). El cuestionario. *GNU FDL*. [file:///C:/Users/Ottors/Downloads/PID\\_00234754.pdf](file:///C:/Users/Ottors/Downloads/PID_00234754.pdf)
- Ministerio de Ciencia y Tecnología (MICIT). (2011). *Plan nacional de ciencia, tecnología e innovación 2011-2014*. San José, Costa Rica: [http://www.conicit.go.cr/servicios/listadocs/programas-nac-cyt/Plan\\_Nacional\\_CTI2011-2014.pdf](http://www.conicit.go.cr/servicios/listadocs/programas-nac-cyt/Plan_Nacional_CTI2011-2014.pdf)
- Nakamatsu, J. (2012). Reflexiones sobre la enseñanza de la Química. *En blanco y negro*, 3(2). <http://revistas.pucp.edu.pe/index.php/enblancoynegro/article/view/3862>
- Naranjo, M. Peña, A. (2019). Fortalecer la competencia argumentativa desde el tema Geometría Molecular a través del diseño, validación y aplicación de una secuencia didáctica (Tesis de Licenciatura). Facultad de ciencia y Tecnología, Universidad Pedagógica Nacional de Colombia. <http://repositorio.pedagogica.edu.co/bitstream/handle/20.500.12209/10828/TE-23541.pdf?sequence=1&isAllowed=y>
- Neese, F. (2017). ORCA. Max-Planck- Institute for Chemical Energy Conversion. [https://www.afs.enea.it/software/orca/orca\\_manual\\_4\\_2\\_1.pdf](https://www.afs.enea.it/software/orca/orca_manual_4_2_1.pdf)
- Ñurinda, G. (2017). Mediación educativa en los entornos virtuales de aprendizaje. Memoria del V Foro de Academia Innovadora. “Fomentando una cultura de innovación, diálogo y accesibilidad con el apoyo de las TIC”. 69-77. <http://www.documentos.una.ac.cr/bitstream/handle/unadocs/8966/Memoria%20del%20V%20Foro%20de%20Academia%20Innovadora%202017.pdf?sequence=1&isAllowed=y>

- Ocaña-Fernández, Y. Valenzuela-Fernández, L. Garro-Aburto, L. (2018). Inteligencia artificial y sus implicaciones en la educación superior. *Propósitos y Representaciones*, 7(2). Doi: <http://dx.doi.org/10.20511/pyr2019.v7n2.274>
- Organización de Estados Iberoamericanos (OEI). (2012). Ciencia, Tecnología e innovación para el desarrollo y la cohesión social. <file:///C:/Users/Ottors/Downloads/documentociencia.pdf>
- Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico OCDE. (2019). Tendencias que dan forma a la educación 2019. <http://www.oecd.org/education/cei/trends-shaping-education.htm>
- Ortiz, P. (2015). El Papel de la Química Cuántica en la Química. *Encuentro con la Química*, 1(1) 51-52. [http://karin.fq.uh.cu/scq/Encuentro\\_con\\_la\\_Quimica/Encuentro\\_con\\_la\\_Quimica\\_Vol1\\_No1.pdf](http://karin.fq.uh.cu/scq/Encuentro_con_la_Quimica/Encuentro_con_la_Quimica_Vol1_No1.pdf)
- Padilla, C. Brooks, P. Jiménez, L. Torres, M. (201). Dimensiones de las competencias científicas esbozadas en los programas de estudio de Biología, Física y Química de la Educación Diversificada y su relación con las necesidades de desarrollo científico-tecnológico de Costa Rica. *EDUCARE*, 20(1), 1-26. <https://www.revistas.una.ac.cr/index.php/EDUCARE/article/view/7500>
- Paredes, J. Molina, M. (2018). Enseñanza de la cinética química por medio de simulaciones y aprendizaje activo. *TECNÉ*, 45, 71-88. [Enseñanza de la cinética química por medio de simulaciones y aprendizaje activo \(redalyc.org\)](http://redalyc.org/articulo/view/doi/10.11171/tecn.45.71-88)
- Oyarzún, A. Moya, I. Navarro, D. (2022). Formación en química computacional y sus aplicaciones a través de un proyecto de investigación desarrollado en la Patagonia chilena. *Formación universitaria*, 15(2), 103- 116. <https://dx.doi.org/10.4067/S0718-50062022000200103>
- Paredes, J. (2018). Exclusión, pobreza y TIC en las escuelas de Iberoamérica. *Revista Iberoamericana de Educación*, 79 (1), 7-8. DOI: <https://doi.org/10.35362/rie7913442>

- Parolo, M. Barbieri, L. Chroback, R. (2004). La metacognición y el mejoramiento de la enseñanza de química universitaria. *Enseñanza de las ciencias*, 22(1), 79-92. <https://core.ac.uk/download/pdf/38990768.pdf>
- Patiño, D. (2017). Uso de la química computacional como herramienta para la enseñanza de la química en instituciones educativas. (Tesis de licenciatura, Universidad de Ciencias Aplicadas y Ambientales). <https://repository.udca.edu.co/bitstream/11158/657/1/Uso%20de%20la%20quimica%20computacional%20como%20herramienta.pdf>
- Peñaloza, T. Reinoso, J. Pérez, E. (2016). La química en entornos virtuales. Universidad Técnica de Cotopaxi. [Monografía Química La-quimica-en-los-entornos-virtuales-libre.pdf \(d1wqtxts1xzle7.cloudfront.net\)](https://www.cloudfront.net/d1wqtxts1xzle7.cloudfront.net/monografia-quimica-la-quimica-en-los-entornos-virtuales-libre.pdf)
- Quesada, C. Varela, P. Frías, M. Morales, P. (2016). Implementación de Avogadro como visualizador y constructor de moléculas con alumnos de primer año de Odontología en la asignatura Química General y Orgánica. *ScienceDirect*, 28(2) 91-98. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0187893X1630060X>
- Ramírez, L. (2019). Los lenguajes de la química como mediadores en el aprendizaje del concepto enlace químico. (Maestría). Universidad Nacional de Colombia. <http://bdigital.unal.edu.co/72082/1/24695454.2019.pdf>
- Ramón, F. (2012). Criterios de calidad de una buena práctica para la aplicación de las TIC a nivel de institución. *Revista Complutense de Educación*, 23(1), 51-60. [Criterios de calidad de una buena práctica para la aplicación de las TIC a nivel de institución \(educacion.gob.es\)](https://www.educacion.gob.es/criterios-de-calidad-de-una-buena-practica-para-la-aplicacion-de-las-tic-a-nivel-de-institucion)
- Rodríguez, J. (2003). Paradigmas, enfoques y métodos en la investigación educativa. *Revistas de investigación UNMSM*, 7(12),23-40. <https://revistasinvestigacion.unmsm.edu.pe/index.php/educa/article/view/8177>

- Rodríguez, J. (2009). Cambios metodológicos relacionados con el aprendizaje de las ciencias. *Educación*, 33(1), 61-73. <https://www.redalyc.org/pdf/440/44015082005.pdf>
- Rodríguez, R. (2014). Internet, salud pública 2.0 y complejidad. *Revista de la Universidad de Santander. Salud*, 46(3), 297-303. [http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0121-08072014000300010](http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0121-08072014000300010)
- Rojas, R. (2018). “Uso de recursos de las Tecnologías Información y Comunicación (TIC) y Metodología para la mediación del proceso de enseñanza aprendizaje por parte del personal docente del Colegio Superior de Señoritas. (Tesis de Maestría). ReUNED.
- Sampieri, R. Collado, F. Lucio, P. (2018). Metodología de la investigación [Versión digital]. McGraw Hill Education. [Metodología de la Investigación -sampieri- 6ta EDICION.pdf - Google Drive](#)
- Sánchez, M. (2017). Propuesta de intervención: Estrategias Metacognitivas en el aprendizaje de Física y Química en 2º curso de E.S.O. Máster Universitario en Nuevas Perspectivas de Educación Personalizada en la Sociedad Digital. <https://reunir.unir.net/bitstream/handle/123456789/6648/SANCHEZ%20GARRIDO%2C%20M%C2%AA%20DOLORES.pdf?sequence=1&isAllowed=y>
- Sandí, J. Cruz, M. (2016). Propuesta metodológica de enseñanza y aprendizaje para innovar la educación superior. *InterSedes: Revista de las Sedes Regionales*, XVII (36), 2-38. [Redalyc.PROPOSTA METODOLÓGICA DE ENSEÑANZA Y APRENDIZAJE PARA INNOVAR LA EDUCACIÓN SUPERIOR](#)
- Santos, G. Domínguez, A. Miranda, A. Cenich, G. (2017). Perspectivas disciplinar y cognitiva de la integración de simulaciones en la educación en física. IV Congreso Internacional Científico y Tecnológico-CONCYT 2017. <https://digital.cic.gba.gob.ar/handle/11746/6849>
- Segura, J. Llopis, M. Mon, M. (2019). El debate sobre el pensamiento computacional en educación. *Revista Iberoamericana de Educación a Distancia*, 22 (1), 171-186. DOI <http://dx.doi.org/10.5944/ried.22.1.22303>

- Sobrino, A. (2014). Aportaciones del conectivismo como modelo pedagógico post-constructivista. 42 (2), 39-48. [https://www.researchgate.net/publication/317535755\\_Aportaciones\\_del\\_conectivismo\\_como\\_modelo\\_pedagogico\\_post-constructivista](https://www.researchgate.net/publication/317535755_Aportaciones_del_conectivismo_como_modelo_pedagogico_post-constructivista)
- Stake, R.E. (2007). *Investigación con estudio de casos*. Madrid, España: Ediciones Morata.
- Suárez, D. (2012). Objetivos y características de la química computacional y su aplicación al estudio de los materiales de carbono. *Boletín del Grupo Español del Carbón*, (25), 23-28. <https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=4015311>
- The Global Information Technology Report. (2015). Índice de disponibilidad de red de Costa Rica. <https://reports.weforum.org/global-information-technology-report-2015/economies/#indexId=NRI&economy=CRI>
- Torres, C. Varela, P. Frías, M. Flores, P. (2016) Implementación de Avogadro como visualizador y constructor de moléculas con alumnos de primer año de Odontología en la asignatura Química General y Orgánica (p.2-3). [https://www.researchgate.net/publication/309691937\\_Implementacion\\_de\\_Avogadro\\_como\\_visualizador\\_y\\_constructor\\_de\\_moleculas\\_para\\_alumnos\\_de\\_primer\\_año\\_de\\_Odontologia\\_en\\_la\\_asignatura\\_Quimica\\_General\\_y\\_Organica](https://www.researchgate.net/publication/309691937_Implementacion_de_Avogadro_como_visualizador_y_constructor_de_moleculas_para_alumnos_de_primer_año_de_Odontologia_en_la_asignatura_Quimica_General_y_Organica)
- Ugliarolo, E. Muscia, G. (2012). Utilización de tecnología multimedia para la enseñanza de estereoquímica en el ámbito universitario. *ScienceDirect*, 23, (1) 6-10. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0187893X17300915>
- Valdez, C. Cherly, P. (2013). Implementación de un programa entre universidad y educación secundaria para mejorar el aprendizaje de Química. SIRIUS. [https://www.quimicaysociedad.org/wp-content/uploads/2013/11/aprendizaje\\_activo\\_de\\_la\\_fisica\\_y\\_la\\_quimica\\_3.pdf#page=331](https://www.quimicaysociedad.org/wp-content/uploads/2013/11/aprendizaje_activo_de_la_fisica_y_la_quimica_3.pdf#page=331)
- Valenzuela, A. (2019). ¿Qué hay de nuevo en la metacognición? Revisión del concepto, sus componentes y términos afines. *Educação e Pesquisa*, 45. <https://doi.org/10.1590/s1678-4634201945187571>

- Valles, M. (1999). Técnicas cualitativas de investigación social. Madrid: Síntesis. S.A.
- Valles-Sánchez, A. Rosales-Marines, L. Serrato-Villegas, L. Farías-Cepeda, L. (2014). Métodos y usos de la Química Computacional. *Revista científica de la Universidad Autónoma de Coahuila*, 6(11). <https://www.studocu.com/es/document/universidad-de-carabobo/ensayos/apuntes/computacional-resume/4996540/view>
- Vaquero, A. (2010). Los comienzos de la Enseñanza Asistida por Computadora. Papel de España. *Revista Iberoamericana de Informática Educativa*, (11), 3-10. <http://161.67.140.29/iecom/index.php/IECom/article/view/186/167>
- Villagra, S. Guidugli, S. Masman, M. (2005). Propuesta de enseñanza para la Fisicoquímica Computacional y Modelización Molecular en tercer año de Polimodal. *RedUNCI*, 377-382. <http://sedici.unlp.edu.ar/handle/10915/22833>
- Wing, M. (2016). Pensamiento Computacional. *Communications of the ACM*, 49 (3), 33-35 <https://cacm.acm.org/magazines/2006/3/5977-computational-thinking/abstra>
- World Economic Forum. (2012). The Global Information Technology Report. *INSEAD*, 230. <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.357.1969&rep=rep1&type=pdf>
- Yáñez-Galleguillos, L. Soria- Barreto, K. (2017). Reflexión de Buenas Prácticas Docentes como eje de calidad en la educación Universitaria: Caso escuela de ciencias empresariales de la Universidad Católica del Norte. *Formación Universitaria* (5)10, 59-68. doi: 10.4067/S0718-50062017000500007
- Suárez, M. Betancourt, J. (2023). La Química Computacional como mediación pedagógica para el aprendizaje de conceptos inorgánicos. *Educación Química*, 34 (1). <http://dx.doi.org/10.22201/fq.18708404e.2023.1.77684>
- Cuesta, S. Meneses, L. (2020). La Química Computacional como herramienta para entender procesos químicos y bioquímicos a nivel molecular. *InfoAnalítica*, (69)100. DOI: 10.26807/ia.vi.175

Valles, A. Rosales, L. Serrato, L. Farías, L. Métodos y usos de la química computacional. *Revista científica de la universidad autónoma de Coahuila*, (6) 11. [11-3QuimicaComputacional.pdf \(uadec.mx\)](#)

Estado de la Educación. (2021). Competencias digitales docentes se ubican en niveles iniciales. *Estado de la Educación*, 29-31. ([https://estadonacion.or.cr/wp-content/uploads/2021/09/Carpeta\\_Prensa\\_EE.pdf](https://estadonacion.or.cr/wp-content/uploads/2021/09/Carpeta_Prensa_EE.pdf))

## 4. Anexos

### 4.1. Entrevista semiestructurada al Investigador

Universidad Nacional  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales  
Centro de Investigación y Docencia en Educación  
Escuela de Ciencias Biológicas  
Escuela de Química  
Departamento de Física  
División de Educología  
Trabajo Final de Graduación 2020



Buenas prácticas en la implementación de dos herramientas computacionales en el abordaje del tema Geometría Molecular en la enseñanza universitaria

Estimado(a) investigador: Contemplando sus conocimientos en Química y como parte de la recolección de datos del trabajo de investigación: *Análisis de buenas prácticas en la implementación de dos herramientas computacionales para el abordaje del tema Geometría Molecular en un curso de Química Orgánica a nivel universitario*

, se le presenta una entrevista que se estima podremos completar en 90 minutos, la aplicación del instrumento se realizará a través de una herramienta de comunicación sincrónica, y se le solicita el consentimiento para utilizar registros de grabación, con el fin de facilitar la sistematización de los datos. La información brindada será manejada de forma confidencial y aprovechada únicamente para los fines del TFG.

Instrucciones: A continuación, se plantean una serie de preguntas generadoras con la intención de recabar su opinión sobre la percepción de utilizar herramientas computacionales para la mediación pedagógica del tema Geometría Molecular, así como estimar su valor como un recurso experimental.

#### Preguntas Guía

1. Para usted como investigador, ¿cuáles factores considera que dificultan la comprensión del tema Geometría Molecular?
2. ¿Qué tipo de dificultades gráficas, experimentales y tecnológicas considera que surgen al realizar investigaciones que involucran aspectos relacionados con la Geometría Molecular?
3. ¿Cuáles recursos tecnológicos ha utilizado para la investigación en temas vinculados con Geometría molecular?
4. ¿Qué dificultades se le han presentado al utilizar herramientas computacionales para estudiar el tema Geometría Molecular?
5. ¿Cuáles son las ventajas que usted como investigador percibe al utilizar herramientas computacionales para la experimentación en Química? **Mencione ejemplos.**

6. ¿Cuáles son los factores más importantes a considerar cuando se ejecuta un análisis de Optimización de Geometrías?
7. En las investigaciones que usted actualmente realiza, ¿qué aportes le puede brindar la experimentación basada en simulaciones computacionales y qué valor tiene esto para usted?
8. Describa tres posibles aplicaciones que podría tener el uso de herramientas computacionales en el área de la investigación.
9. ¿Cuáles son las ventajas que usted como investigador percibe del uso de este tipo de herramientas computacionales para la formación de profesionales en cursos prácticos de fundamentos de Química I y II o Química Orgánica? ¿Qué recomendaciones daría para incorporarlas en la docencia?

## 4.2. Entrevista semiestructurada para docentes

Universidad Nacional  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales  
Centro de Investigación y Docencia en Educación  
Escuela de Ciencias Biológicas  
Escuela de Química  
Departamento de Física  
División de Educología  
Trabajo Final de Graduación 2020



Buenas prácticas en la implementación de dos herramientas computacionales en el abordaje del tema Geometría Molecular en la enseñanza universitaria

Estimado(a) docente: Partiendo de su experiencia como docente en la enseñanza de la Química y como parte de la recolección de datos del trabajo de investigación: *Análisis de buenas prácticas en la implementación de dos herramientas computacionales para el abordaje del tema Geometría Molecular en un curso de Química Orgánica a nivel universitario*, se presenta esta entrevista que se estima podremos completar en 90 minutos, las preguntas tienen una modalidad presencial sincrónica y se le solicita el consentimiento para utilizar registros de grabación, esto con el fin de facilitar la sistematización de los datos. La información brindada será manejada de forma confidencial y aprovechada únicamente para los fines del TFG.

Preguntas Guía:

1. ¿Cuáles factores considera que dificultan la mediación pedagógica del tema Geometría Molecular?
2. ¿Qué tipo de recursos tecnológicos utiliza para el abordaje del tema Geometría Molecular?
3. ¿De qué forma podrían utilizarse las herramientas computacionales como un recurso didáctico para realizar experimentación y demostraciones visuales en el abordaje del tema Geometría Molecular?
4. ¿Cuáles considera que son las principales dificultades de utilizar herramientas computacionales para la enseñanza de la Química?
5. ¿Cuáles son las ventajas potenciales que usted como docente percibe, en cuanto al uso de este tipo de herramientas computacionales para la Enseñanza de la Química Experimental? Justifique su respuesta.
6. ¿A usted le interesaría hacer experimentación computacional? Justifique su respuesta
7. ¿Cómo se podría complementar la experimentación en un laboratorio, utilizando herramientas computacionales?
8. Describa tres posibles aplicaciones que podría tener el uso de herramientas computacionales en la enseñanza de la Química.

### 4.3. Grupo Focal para Estudiantes

Universidad Nacional  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales  
Centro de Investigación y Docencia en Educación  
Escuela de Ciencias Biológicas  
Escuela de Química  
Departamento de Física  
División de Educología  
Trabajo Final de Graduación 2020



Buenas prácticas en la implementación de dos herramientas computacionales en el abordaje del tema Geometría Molecular en la enseñanza universitaria

#### **Introducción:**

Con el fin de recopilar los datos del trabajo de investigación: *Análisis de buenas prácticas en la implementación de dos herramientas computacionales para el abordaje del tema Geometría Molecular en un curso de Química Orgánica a nivel universitario*, se ha planteado el siguiente Grupo Focal, este se utilizará con el fin de explorar a fondo las experiencias vividas por los participantes.

Se desarrollará un taller de carácter demostrativo el cual se centrará en el uso de dos herramientas computacionales, se utilizará un editor molecular llamado Avogadro, en el cual se diseñarán todas las moléculas a estudiar, y un paquete de Química Cuántica multipropósito llamado ORCA que permite realizar optimizaciones geométricas mediante un análisis computacional más amplio.

Entre los objetivos por alcanzar se encuentran:

1. Identificar las principales dificultades que enfrentan los estudiantes universitarios, en la comprensión del tema Geometría Molecular.
2. Determinar las potencialidades que los estudiantes universitarios encuentran en dos herramientas computacionales al trabajar con el tema Geometría Molecular.
3. Contrastar las percepciones de los estudiantes sobre las ventajas del material elaborado para el uso de herramientas computacionales en la comprensión del tema Geometría Molecular. Se ha estimado que el tiempo para desarrollar esta actividad es de aproximadamente 90 minutos, y con el fin de sistematizar mejor la información se le solicita el consentimiento para utilizar registros de grabaciones tanto de audio,

como video. Toda la información que se recopile es de carácter confidencial y es exclusivamente para los fines de la investigación.

El taller será dividido en cuatro etapas, a continuación, se describen cada una de ellas:

**1º Etapa:** Se dará la bienvenida a los estudiantes, agradeciendo su colaboración en el taller. Seguidamente se procede a brindar una base teórica y operacional sobre el tema a tratar, las moléculas a estudiar, así como el uso correcto de las herramientas a utilizar (25 minutos).

**2º Etapa:** Se desarrollará una demostración guiada sobre cómo realizar optimización de geometrías (10 minutos).

- a. Haciendo uso de las herramientas de optimización automática de Avogadro.
- b. Ejecutando un cálculo computacional haciendo uso de Avogadro y ORCA.

**3º Etapa:** En esta etapa se procede a dar respuesta a un conjunto de frases incompletas, que pretenden generar fuentes cognitivas y emocionales de las reacciones de los participantes, al utilizar las herramientas computacionales (25 minutos).

Complete cada oración con una frase, teniendo en cuenta lo que le hace sentir o pensar cada ítem.

1. Cuando estudio el tema Geometría molecular me siento \_\_\_\_\_.
2. Para estudiar el tema Geometría Molecular utilicé \_\_\_\_\_.
3. Utilizar herramientas computacionales para estudiar el tema Geometría Molecular, me ayuda a potenciar \_\_\_\_\_.
4. Lo que más se me dificulta aprender del tema Geometría Molecular es \_\_\_\_\_.
5. Cuando utilizo herramientas computacionales me resulta difícil \_\_\_\_\_.
6. La mayor ventaja de utilizar herramientas computacionales para estudiar el tema Geometría Molecular es \_\_\_\_\_.
7. Si tuviera mayor conocimiento en el uso de herramientas computacionales me gustaría \_\_\_\_\_.
8. Otra posible aplicación que considero podría tener las herramientas computacionales es \_\_\_\_\_.

**4º Etapa:** Como actividad de cierre, se proyecta la idea de generar un tipo conversatorio, en el cual los estudiantes describen algunas razones por las que decidieron utilizar esa frase. Esto con la intención de conjuntar una información más amplia sobre sus percepciones.

#### 4.4. Cuestionario para Estudiantes

Universidad Nacional  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales  
Centro de Investigación y Docencia en Educación  
Escuela de Ciencias Biológicas  
Escuela de Química  
Departamento de Física  
División de Educología  
Trabajo Final de Graduación 2020



Buenas prácticas en la implementación de dos herramientas computacionales en el abordaje del tema Geometría Molecular en la enseñanza universitaria

#### **Instrucción:**

Con el fin de recopilar los datos del trabajo de investigación: *Análisis de buenas prácticas en la implementación de dos herramientas computacionales para el abordaje del tema Geometría Molecular en un curso de Química Orgánica a nivel universitario*, se ha planteado el siguiente cuestionario, el cual se ha formulado con la intención de identificar las principales dificultades que los estudiantes encuentran cuando estudian el tema de Geometría Molecular.

Se le solicita una respuesta que vaya acorde con las problemáticas que ha tenido que afrontar cuando se dispone a estudiar un tema como Geometría Molecular.

1. ¿Cuáles dificultades percibe al estudiar el tema Geometría Molecular?
2. ¿Qué tipo de herramientas considera pertinentes para estudiar el tema Geometría Molecular?
3. ¿Cuál aspecto identifica como el mayor problema, cuando se dispone a estudiar el tema Geometría Molecular?
4. ¿Cuáles herramientas ha utilizado en el curso de Química para estudiar el tema Geometría Molecular?
5. ¿Cuál estrategia considera pertinente para ayudar en la comprensión del tema Geometría Molecular?

#### 4.5. Validación de Instrumentos

Se adjunta la validación por parte de tres expertos

**Universidad Nacional de Costa Rica**  
**Licenciatura en la Enseñanza de las Ciencias Naturales**

**Validación de instrumentos para proyecto final de graduación I ciclo 2020**

#### 1. IDENTIFICACIÓN DEL EXPERTO.

**Nombre y apellidos:** Isabel torres Salas

**Profesión:** Licenciada en la enseñanza de la química y Máster en Psicopedagogía

**Lugar de Trabajo:** Jubilada de la División de Educología. Centro de Investigación en Docencia y Educación. UNA

#### 2. DATOS SOBRE LA INVESTIGACIÓN.

**2.1 Tema:** Análisis de buenas prácticas en la implementación de dos herramientas computacionales para el abordaje del tema Geometría Molecular en un curso de Química Orgánica a nivel universitario

**2.2 Problema de investigación:** ¿De qué manera contribuyen las estrategias didácticas basadas en el uso de herramientas de Química Computacional a la comprensión de fenómenos vinculados con el tema Geometría Molecular en la docencia y la investigación en la UNA?

**2.3 Objetivo General:** Analizar las buenas prácticas que perciben docentes, investigadores y estudiantes universitarios, sobre dos herramientas computacionales para abordar el tema Geometría Molecular.

#### 2.4 Objetivos Específicos:

- Identificar las principales dificultades que enfrentan los investigadores, docentes y estudiantes universitarios de ciencias básicas, en la comprensión del tema Geometría Molecular.
- Determinar las potencialidades que docentes, investigadores y estudiantes universitarios encuentran en dos herramientas computacionales al trabajar con el tema Geometría Molecular.
- Contrastar las percepciones que los docentes, investigadores y estudiantes universitarios desarrollan a partir del uso de herramientas computacionales como fuentes experimentales y como herramienta didáctica para la mediación pedagógica del tema Geometría Molecular



### 3. INSTRUMENTOS A VALIDAR:

1. Entrevista semiestructurada al investigador
2. Entrevista semiestructurada al docente
3. Grupo focal para estudiantes
4. Frases incompletas para estudiantes

### 4. PROCESO DE VALIDACIÓN:

#### 4.1. Validación instrumento No. 1: *Entrevista Semiestructurada para investigadores*

<b>CATEGORÍAS DE ANÁLISIS</b>	<b>SUBCATEGORÍAS DE ANÁLISIS INCLUIDAS EN EL INSTRUMENTO</b>	<b>PREGUNTA O ÍTEM CORRESPONDIENTE</b>
Dificultades en la comprensión del tema Geometría Molecular.	Dificultades que perciben los investigadores para la comprensión del tema Geometría Molecular.	3, 2, 7
Potencialidad de las herramientas computacionales como recurso experimental.	Potencialidad que los investigadores le dan al uso de herramientas computacionales, como recurso experimental.	8, 5
Percepciones en el uso de dos herramientas computacionales para la comprensión del tema Geometría Molecular.	Percepción de investigadores sobre el uso de herramientas computacionales.	1, 4, 6

### JUICIO DEL EXPERTO:

De acuerdo con los criterios de valoración que a continuación se detallan, complete la escala que se presenta en la siguiente tabla, marcando con una equis (x) dentro del rubro que usted considere que se ajusta a cada uno de los criterios.

Criterios	Escala				Comentarios ¿Cómo se puede mejorar?
	Muy inapropiado	Inapropiado	Apropiado	Muy apropiado	
1. Pertinencia del contenido de los enunciados.				X	
2. Contextualización de las preguntas a la población meta.				X	
3. Claridad de las preguntas.			X		Las observaciones están en el instrumento
4. Relación con la teoría.					
5. Coherencia con los objetivos de investigación y sus categorías de análisis.				X	

#### 4.2. Validación instrumento No. 2: *Entrevista Semiestructurada para docente*

CATEGORÍAS DE ANÁLISIS	SUBCATEGORÍAS DE ANÁLISIS INCLUIDAS EN EL INSTRUMENTO	PREGUNTA O ÍTEM CORRESPONDIENTE
Dificultades en la comprensión del tema Geometría Molecular.	Dificultades que perciben docentes de ciencias para explicar el tema Geometría Molecular.	2, 1, 6
Potencialidad de las herramientas computacionales como recurso experimental.	Potencialidad que los docentes le dan al uso de herramientas computacionales, como herramienta experimental.	5, 4

Percepciones en el uso de dos herramientas computacionales para la comprensión del tema Geometría Molecular.	Percepción que los docentes le dan al uso de herramientas computacionales, en la mediación del tema Geometría Molecular.	7,3

## JUICIO DEL EXPERTO

De acuerdo con los criterios de valoración que a continuación se detallan, complete la escala que se presenta en la siguiente tabla, marcando con una equis (x) dentro del rubro que usted considere que se ajusta a cada uno de los criterios.

Criterios	Escala				Comentarios ¿Cómo se puede mejorar?
	Muy inapropiado	Inapropiado	Apropiado	Muy apropiado	
1. Pertinencia del contenido de los enunciados.				X	
2. Contextualización de las preguntas a la población meta.				X	
3. Claridad de las preguntas.				X	
4. Relación con la teoría.				X	
5. Coherencia con los objetivos de investigación y sus variables o categorías de análisis.				X	

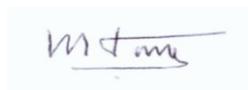
**4.3. Validación instrumento No. 3: Grupo Focal para estudiantes, frases incompletas**

<b>CATEGORÍAS DE ANÁLISIS</b>	<b>SUBCATEGORÍAS DE ANÁLISIS Y RASGOS INCLUIDAS EN EL INSTRUMENTO</b>	<b>PREGUNTA O ÍTEM CORRESPONDIENTE</b>
Dificultades en la comprensión del tema Geometría Molecular.	Dificultades que perciben estudiantes universitarios para la comprensión del tema Geometría Molecular.	1, 2, 4
Potencialidad de las herramientas computacionales como recurso experimental.	Potencialidad que los estudiantes le dan al uso de herramientas computacionales como recurso experimental.	5, 3
Percepciones en el uso de dos herramientas computacionales para la comprensión del tema Geometría Molecular.	Percepción que estudiantes universitarios le dan al uso de herramientas computacionales, para la comprensión del tema Geometría Molecular.	6, 7

**JUICIO DEL EXPERTO:**

De acuerdo con los criterios de valoración que a continuación se detallan, complete la escala que se presenta en la siguiente tabla, marcando con una equis (x) dentro del rubro que usted considere que se ajusta a cada uno de los criterios.

Criterios	Escala				Comentarios ¿Cómo se puede mejorar?
	Muy inapropiado	Inapropiado	Apropiado	Muy apropiado	
1. Pertinencia del contenido de los enunciados.				X	
2. Contextualización de las preguntas a la población meta.				X	
3. Claridad de las preguntas.				X	
4. Relación con la teoría.				X	
5. Coherencia con los objetivos de investigación y sus variables o categorías de análisis.				X	

**5. OBSERVACIONES GENERALES:****6. FECHA: 24 de mayo 2020****7. CORREO ELECTRÓNICO: Isabeltorrescr96@gmail.com****8. TELÉFONO: 88465699****9. FIRMA SI ES POSIBLE:**

**Universidad Nacional de Costa Rica**  
**Licenciatura en la Enseñanza de las Ciencias Naturales**

**Validación de instrumentos para proyecto final de graduación I ciclo 2020**

**2. IDENTIFICACIÓN DEL EXPERTO.**

**Nombre y apellidos:** Huberth Pérez.

**Profesión:** Estudiante de doctorado.

**Lugar de Trabajo:** Instituto tecnológico de Israel-Technion (estudiante de doctorado).

**2. DATOS SOBRE LA INVESTIGACIÓN.**

**2.1 Tema:** Buenas prácticas en la implementación de dos herramientas computacionales en el abordaje del tema Geometría Molecular en la enseñanza universitaria

**2.2 Problema de investigación:** ¿Cuáles son las buenas prácticas que perciben investigadores, docentes y estudiantes universitarios al implementar dos herramientas computacionales para abordar el tema Geometría Molecular?

**2.3 Objetivo General:** Analizar las buenas prácticas que perciben docentes, investigadores y estudiantes universitarios, sobre dos herramientas computacionales para abordar el tema Geometría Molecular.

**2.4 Objetivos Específicos:**

- Identificar las principales dificultades que enfrentan los investigadores, docentes y estudiantes universitarios de ciencias básicas, en la comprensión del tema Geometría Molecular.
- Determinar las potencialidades que docentes, investigadores y estudiantes universitarios encuentran en dos herramientas computacionales al trabajar con el tema Geometría Molecular.
- Contrastar las percepciones que los docentes, investigadores y estudiantes universitarios desarrollan a partir del uso de herramientas computacionales como fuentes experimentales y como herramienta didáctica para la mediación pedagógica del tema Geometría Molecular.

### 3. INSTRUMENTOS A VALIDAR:

10. Entrevista semiestructurada al investigador
11. Entrevista semiestructurada al docente
12. Grupo focal para estudiantes
13. Frases incompletas para estudiantes

#### 4.2. Validación instrumento No. 1: *Entrevista Semiestructurada para investigadores*

##### JUICIO DEL EXPERTO:

De acuerdo con los criterios de valoración que a continuación se detallan, complete la escala que se presenta en la siguiente tabla, marcando con una equis (x) dentro del rubro que usted considere que se ajusta a cada uno de los criterios.

Criterios	Escala				Comentarios ¿Cómo se puede mejorar?
	Muy inapropiado	Inapropiado	Apropiado	Muy apropiado	
1. Pertinencia del contenido de los enunciados.			X		<ul style="list-style-type: none"> <li>○ La pregunta número uno y cuatro parecen pertenecer más a la subcategoría de “Dificultades que perciben los investigadores para la comprensión del tema Geometría Molecular” que a la de “Percepción de investigadores sobre el uso de herramientas computacionales”.</li> <li>○ En la pregunta número tres no es claro para mí su pertenecía a la categoría en la que fue asignada, por favor revisar.</li> </ul>
2. Contextualización de las preguntas a la población meta.			x		

3. Claridad de las preguntas.			x		Se han hecho comentarios al texto.
4. Relación con la teoría.			x		
5. Coherencia con los objetivos de investigación y sus categorías de análisis.			x		Considero que deberían considerar reescribir las categorías, tal vez para especificarlas un poco más. El detalle estará en la parte de observaciones generales.  El objetivo específico dos habla de dos herramientas en concreto, mientras que la categoría pregunta en general. No me parece que guarde una coherencia lógica.

#### 4.2. Validación instrumento No. 2: *Entrevista Semiestructurada para docente*

De acuerdo con los criterios de valoración que a continuación se detallan, complete la escala que se presenta en la siguiente tabla, marcando con una equis (x) dentro del rubro que usted considere que se ajusta a cada uno de los criterios.

Criterios	Escala				Comentarios ¿Cómo se puede mejorar?
	Muy inapropiado	Inapropiado	Apropiado	Muy apropiado	
1. Pertinencia del contenido de los enunciados.			x		He hecho algunos comentarios al documento.
2. Contextualización de las preguntas a la población meta.				x	

3. Claridad de las preguntas.			x		He hecho algunos comentarios al documento.
4. Relación con la teoría.			x		
5. Coherencia con los objetivos de investigación y sus variables o categorías de análisis.			x		Aplica el mismo comentario hecho para el instrumento anterior.

#### 4.3. Validación instrumento No. 3: Grupo Focal para estudiantes, frases incompletas

##### JUICIO DEL EXPERTO:

De acuerdo con los criterios de valoración que a continuación se detallan, complete la escala que se presenta en la siguiente tabla, marcando con una equis (x) dentro del rubro que usted considere que se ajusta a cada uno de los criterios.

Criterios	Escala				Comentarios ¿Cómo se puede mejorar?
	Muy inapropiado	Inapropiado	Apropiado	Muy apropiado	
1. Pertinencia del contenido de los enunciados.			x		Se han hecho anotaciones al documento.
2. Contextualización de las preguntas a la población meta.			x		Se han hecho anotaciones al documento.
3. Claridad de las preguntas.				x	Se han hecho anotaciones al documento.
4. Relación con la teoría.			x		Se han hecho anotaciones al documento.

5. Coherencia con los objetivos de investigación y sus variables o categorías de análisis.			x		Se han hecho anotaciones al documento.
--	--	--	---	--	--

**FECHA:** 07 de julio del 2020

**CORREO ELECTRÓNICO:** huberth16@gmail.com

**TELÉFONO:** +972 058 566 1955

**Universidad Nacional de Costa Rica  
Licenciatura en la Enseñanza de las Ciencias Naturales**

**Validación de instrumentos para proyecto final de graduación I ciclo 2020**

**3. IDENTIFICACIÓN DEL EXPERTO.**

**Nombre y apellidos:** Carolina Carpio Chavarría

**Profesión:** Tecnóloga Educativa

**Lugar de Trabajo:** UTN y asesorías a universidades públicas como el TEC.

**1. DATOS SOBRE LA INVESTIGACIÓN.**

**1.1 Tema:** Buenas prácticas en la implementación de dos herramientas computacionales en el abordaje del tema Geometría Molecular en la enseñanza universitaria

**1.2 Problema de investigación:** ¿Cuáles son las buenas prácticas que perciben investigadores, docentes y estudiantes universitarios al implementar dos herramientas computacionales para abordar el tema Geometría Molecular?

**1.3**

**2. Objetivo General:** Analizar las buenas prácticas que perciben docentes, investigadores y estudiantes universitarios, sobre dos herramientas computacionales para abordar el tema Geometría Molecular.

**2.1 Objetivos Específicos:**

- Identificar las principales dificultades que enfrentan los investigadores, docentes y estudiantes universitarios de ciencias básicas, en la comprensión el tema Geometría Molecular.
- Determinar las potencialidades que docentes, investigadores y estudiantes universitarios encuentran en dos herramientas computacionales al trabajar con el tema Geometría Molecular.
- Contrastar las percepciones que los docentes, investigadores y estudiantes universitarios desarrollan a partir del uso de herramientas computacionales como fuentes experimentales y como herramienta didáctica para la mediación pedagógica del tema Geometría Molecular.

### 3. INSTRUMENTOS A VALIDAR:

1. Entrevista semiestructurada al investigador
2. Entrevista semiestructurada al docente
3. Grupo focal para estudiantes
4. Frases incompletas para estudiantes

### 4. PROCESO DE VALIDACIÓN:

#### 4.1 Validación instrumento No. 1: *Entrevista Semiestructurada para investigadores*

CATEGORÍAS DE ANÁLISIS	SUBCATEGORÍAS DE ANÁLISIS INCLUIDAS EN EL INSTRUMENTO	PREGUNTA O ÍTEM CORRESPONDIENTE
Dificultades en la comprensión del tema Geometría Molecular.	Dificultades que perciben los investigadores para la comprensión del tema Geometría Molecular.	3, 2, 7

Potencialidad de las herramientas computacionales como recurso experimental.	Potencialidad que investigadores le dan al uso de herramientas computacionales, como recurso experimental.	8, 5
Percepciones en el uso de dos herramientas computacionales para la comprensión del tema Geometría Molecular.	Percepción de investigadores sobre el uso de herramientas computacionales.	1, 4, 6

**JUICIO DEL EXPERTO:**

De acuerdo con los criterios de valoración que a continuación se detallan, complete la escala que se presenta en la siguiente tabla, marcando con una equis (x) dentro del rubro que usted considere que se ajusta a cada uno de los criterios.

<b>Criterios</b>	<b>Muy inapropiado</b>	<b>Inapropiado</b>	<b>Apropiado</b>	<b>Muy apropiado</b>	<b>¿Cómo se puede mejorar?</b>
1. Pertinencia del contenido de los enunciados.				x	
2. Contextualización de las preguntas a la población meta.		x			Hay preguntas en las que me parece necesario delimitar el contexto al que se hace referencia. De lo contrario se

					<p>pueden tener respuestas muy diferentes y que no sean pertinentes para el trabajo.</p> <p>Por ejemplo la 4: ¿En el ámbito académico? El problema de esta pregunta es que la respuesta dependerá mucho del contexto particular.</p>
3. Claridad de las preguntas.			x		<p>Es necesario esclarecer algunos aspectos en las preguntas:</p> <p>Pregunta 1: ¿Comprensión para quién?</p> <p>Pregunta 5 ¿Qué tipo de herramientas? ¿Será que la pregunta se debe colocar después de la 7?</p>

4. Relación con la teoría.				X	
5. Coherencia con los objetivos de investigación y sus categorías de análisis.				x	

**4.2 Validación instrumento No. 2: Entrevista Semiestructurada para docente**

<b>CATEGORÍAS DE ANÁLISIS</b>	<b>SUBCATEGORÍAS DE ANÁLISIS INCLUIDAS EN EL INSTRUMENTO</b>	<b>PREGUNTA O ÍTEM CORRESPONDIENTE</b>
Dificultades en la comprensión del tema Geometría Molecular.	Dificultades que perciben docentes de ciencias para explicar el tema Geometría Molecular.	2, 1, 6
Potencialidad de las herramientas computacionales como recurso experimental.	Potencialidad que los docentes le dan al uso de herramientas computacionales, como herramienta experimental.	5, 4
Percepciones en el uso de dos herramientas computacionales para la comprensión del tema Geometría Molecular.	Percepción que docentes le dan al uso de herramientas computacionales, en la mediación del tema Geometría Molecular.	7, 3

### JUICIO DEL EXPERTO:

De acuerdo con los criterios de valoración que a continuación se detallan, complete la escala que se presenta en la siguiente tabla, marcando con una equis (x) dentro del rubro que usted considere que se ajusta a cada uno de los criterios.

Criterios	Escala				Comentarios ¿Cómo se puede mejorar?
	Muy inapropiado	Inapropiado	Apropiado	Muy apropiado	
1. Pertinencia del contenido de los enunciados.				x	
2. Contextualización de las preguntas a la población meta.				x	
3. Claridad de las preguntas.				x	
4. Relación con la teoría.				x	
5. Coherencia con los objetivos de investigación y sus variables o categorías de análisis.				x	

**4.3 Validación instrumento No. 3: Grupo Focal para estudiantes, frases incompletas**

<b>CATEGORÍAS DE ANÁLISIS</b>	<b>SUBCATEGORÍAS DE ANÁLISIS Y RASGOS INCLUIDAS EN EL INSTRUMENTO</b>	<b>PREGUNTA O ÍTEM CORRESPONDIENTE</b>
Dificultades en la comprensión del tema Geometría Molecular.	Dificultades que perciben estudiantes universitarios para la comprensión del tema Geometría Molecular.	1, 2, 4
Potencialidad de las herramientas computacionales como recurso experimental.	Potencialidad que los estudiantes le dan al uso de herramientas computacionales como recurso experimental.	5, 3
Percepciones en el uso de dos herramientas computacionales para la comprensión del tema Geometría Molecular.	Percepción que estudiantes universitarios le dan al uso de herramientas computacionales, para la comprensión del tema Geometría Molecular.	6, 7

**JUICIO DEL EXPERTO:**

De acuerdo con los criterios de valoración que a continuación se detallan, complete la escala que se presenta en la siguiente tabla, marcando con una equis (x) dentro del rubro que usted considere que se ajusta a cada uno de los criterios.

Criterios	Escala				Comentarios ¿Cómo se puede mejorar?
	Muy inapropiado	Inapropiado	Apropiado	Muy apropiado	
1. Pertinencia del contenido de los enunciados.			x		
2. Contextualización de las preguntas a la población meta.		x			Me parece que las preguntas 1 y 2 tienen problemas en cuando a la contextualización y claridad. Tal vez haya que redactarlas de forma diferente. En la 2 se podía consultar que “regularmente” o “usualmente” qué tipo de recursos o materiales utiliza. La 1 puede ser muy variada la respuesta y el estudiante solo

					<p>diga que depende de las circunstancias.</p> <p>Pregunta 5: ¿se tiene certeza de que todos han utilizado alguna vez herramientas computacionales ?</p>
3. Claridad de las preguntas.		x			
4. Relación con la teoría.				x	
5. Coherencia con los objetivos de investigación y sus variables o categorías de análisis.				x	

**FECHA:** 8 de junio de 2020

**CORREO ELECTRÓNICO:** caricarpio@gmail.com

**TELEFONO:** 6050-0667

**FIRMA SI ES POSIBLE:**

#### 4.6. MATRIZ DE CONGRUENCIA

*TÍTULO DEL TFG:* Análisis de buenas prácticas en la implementación de dos herramientas computacionales para el abordaje del tema Geometría Molecular en un curso de Química Orgánica a nivel universitario.

**PROBLEMA:** ¿Cómo contribuyen las herramientas computacionales ORCA y Avogadro a mejorar la enseñanza de la Geometría Molecular al adoptar y potenciar Buenas Prácticas Educativas en docente, investigador y estudiantes universitarios de la UNA?

OBJETIVO ESPECÍFICO	CATEGORÍA	DEFINICIÓN CONCEPTUAL Y OPERACIONAL	SUBCATEGORÍAS	FUENTES DE INFORMACIÓN	POSIBLE INSTRUMENTO
<ul style="list-style-type: none"><li>Identificar las principales dificultades que enfrentan el docente, investigador y estudiantes universitarios de ciencias básicas, para comprender el</li></ul>	Dificultades en la comprensión del tema Geometría Molecular	<p>CONCEPTUAL: Según (Mesonero y Núñez, 1995, p.384), como se citó en Castejón et al. (2018), las dificultades de aprendizaje ocurren cuando el estudiante procesa la información de manera inusual, o cuando los métodos de enseñanza no reflejan un aporte considerable en el proceso de formación.</p> <p>El tema Geometría Molecular es la base estructural de la Química, y comprenderlo significa poder describir la disposición tridimensional de los átomos que conforman cada molécula, como afecta sus propiedades físicas y químicas, así como el tipo de reacciones en que puede participar (Chang y</p>	Dificultades que perciben los investigadores para la comprensión del tema Geometría Molecular:  a) Recursos tecnológicos para la investigación del tema.	Investigador	Entrevista Semiestructurada

<p>tema Geometría Molecular.</p>		<p>College, 2003), como se citó en (Naranjo y Peña, 2019).</p> <p>OPERACIONAL: Mediante entrevistas semiestructuradas y grupos focales, se pretende recopilar información acerca de las dificultades que se tienen al investigar, estudiar y explicar el tema Geometría Molecular. La intención es proveer a este tema de una herramienta que se adecué a las necesidades tridimensionales y visoespaciales que precisa.</p>	<p>b) Dificultades para investigar el tema.</p> <p>c) Interés por la experimentación computacional.</p> <p>Dificultades que perciben docentes de ciencias para explicar el tema Geometría Molecular.</p> <p>a) Recursos tecnológicos para la enseñanza del tema.</p> <p>b) Dificultades para enseñar el tema.</p>	<p>Docente</p>	<p>Entrevista Semiestructurada</p>
----------------------------------	--	--	---	----------------	------------------------------------

			<p>c) Interés por la experimentación computacional.</p> <p>Dificultades que perciben estudiantes universitarios para la comprensión del tema Geometría Molecular.</p> <p>a) Interés por utilizar algún software para estudiar el tema.</p> <p>b) Recursos tecnológicos para el aprendizaje del tema.</p> <p>c) Dificultades para aprender el tema.</p>	Estudiantes	Grupo Focal
--	--	--	--	-------------	-------------



			<p>computacionales, como herramienta experimental:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>a) Utilidad de las herramientas computacionales en Química.</li> <li>b) Dificultades en el uso de herramientas computacionales.</li> <li>c) Posibles aplicaciones de las herramientas computacionales analizadas.</li> </ul> <p>Potencialidad que estudiantes le dan al uso de dos herramientas</p>	Estudiantes	Entrevista Semiestructurada
--	--	--	---	-------------	-----------------------------

			<p>computacionales, como recurso experimental:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>a) Dificultades en el uso de herramientas computacionales.</li><li>b) Beneficios de utilizar software para estudiar el tema.</li><li>c) Posibles aplicaciones de las herramientas computacionales analizadas.</li></ul>		Grupo focal
--	--	--	--	--	-------------

<ul style="list-style-type: none"> <li>● Considerar el uso de ORCA y Avogadro como una Buena Práctica educativa para investigar, estudiar o enseñar el tema GEOM.</li> </ul>	<p>Consideración es en el uso de dos herramientas computacionales como buena práctica educativa para estudiar el tema Geometría Molecular.</p>	<p><b>CONCEPTUAL:</b> Una consideración es un factor o aspecto que se tiene en cuenta o se evalúa antes de tomar una decisión o realizar una acción.</p> <p><b>OPERACIONAL:</b> Mediante una guía se busca la percepción que investigadores, docentes y estudiantes desarrollan a partir del uso de herramientas computacionales como buenas prácticas educativas en la comprensión del tema Geometría Molecular.</p>	<p>Percepción de investigadores sobre el uso de dos herramientas computacionales, para la comprensión del tema Geometría Molecular:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>a) Facilidades en el uso de las herramientas computacionales.</li> <li>b) Dificultades en el uso de las herramientas computacionales.</li> <li>c) Factores por considerar para</li> </ul>	<p>Investigador</p>	<p>Entrevista Semiestructurada</p>

			<p>una optimización de geometrías.</p> <p>Percepción de docentes sobre el uso de dos herramientas computacionales, para la mediación del tema Geometría Molecular:</p> <p>a) Importancia de las herramientas computacionales como recurso didáctico en la mediación del tema.</p> <p>b) Interés por innovar su mediación pedagógica.</p>	<p>Docente</p> <p>Estudiantes</p>	<p>Entrevista Semiestructurada</p> <p>Grupo focal</p>
--	--	--	--	-----------------------------------	---

			<p>Percepción de estudiantes universitarios sobre el uso de dos herramientas computacionales, para el aprendizaje del tema Geometría Molecular:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>a) Ventajas de utilizar herramientas computacionales para estudiar el tema.</li><li>b) Facilidades en el uso de las herramientas computacionales.</li><li>c) Dificultades en el uso de herramientas</li></ul>		
--	--	--	---	--	--

			<p>computacionales.</p> <p>d) Interés en el uso de herramientas computacionales en su proceso de aprendizaje.</p>		
--	--	--	---	--	--

**OBJETIVO GENERAL:** Analizar las dificultades, potencialidades y buenas prácticas, que percibe un docente, investigador y estudiantes universitarios, sobre dos herramientas computacionales para abordar el tema Geometría Molecular.