

Sistema Interactivo de Átomos Moléculas y Materiales

Alí Matías Gabriel, Alonso Rodolfo Ariel, Enciso Duré Hernán, Francini Lucas Martín, Gallo Miguel
Eduardo, Gobbi Leonel Darío
Universidad Nacional de La Matanza, Argentina
Departamento de Ingeniería e Investigaciones Tecnológicas
siamm.unlam@gmail.com

Resumen

SIAMM es una plataforma educativa orientada a estudiantes de colegios secundarios, de nivel terciario y primeros años de universidad. Permite que el usuario amplíe sus conocimientos en la química, y le brinda la posibilidad de experimentar didácticamente con modelos de átomos, obtener información básica sobre éstos, propiedades físicas, conocer su formación, composición y distribución en las moléculas y en los materiales. La interacción con los mismos es posible mediante un entorno 3D de una forma sencilla, rápida y divertida.

De esta manera, lo que se pretende es fomentar el aprendizaje de los usuarios sobre los conceptos anteriormente enunciados, permitiéndoles jugar con la herramienta.

Palabras claves

Química, Tabla Periódica, Átomos, Moléculas, Materia, Materiales, Partículas subatómicas, Protón, Neutrón, Electrón, Unión Iónica, Unión Covalente, Entorno 3D, Anión, Cation, Isótopos, Valencia.

Introducción

Mediante el análisis de los resultados obtenidos sobre las estadísticas realizadas por UNICEF Argentina [1] (Encuesta Nacional sobre Integración de TIC en la Educación Básica) en base a una población de 7388 alumnos de escuelas primarias y secundarias de gestión estatal y privada, en las 24 jurisdicciones del país, se observó que las materias asociadas al campo de estudio de las ciencias naturales son las que ocupan los últimos puestos en lo referido a la utilización de herramientas informáticas para su enseñanza.

Dada esta situación, se identificó la oportunidad de desarrollar una plataforma educativa que se encuentra orientada al ámbito académico, específicamente en el área de la química.

El público objetivo del proyecto estará conformado por alumnos de escuelas secundarias, nivel terciario y universitarios como así también profesores de estas instituciones.

Marco teórico

La química, como ciencia, involucra una gran cantidad de temas y contenidos, donde en cada uno de ellos desarrolla y describe amplios y diversos conceptos basándose especialmente en formulaciones empíricas.

Para una mejor comprensión, los contenidos empleados en SIAMM, son enumerados a continuación:

- **Materia:** Es todo lo que ocupa espacio, tiene una propiedad llamada masa y posee inercia. Todos los objetos que vemos a nuestro alrededor son materia. Los gases de la atmósfera, aunque invisibles, son ejemplos de la materia, ocupan espacio y tienen masa. [14]
- **Material:** Es todo compuesto de materia con una composición atómica o molecular específica. [14]
- **Moléculas:** Es la creación de dos o más átomos, que se mantienen unidos a través de enlaces químicos. Puede contener átomos del mismo elemento o diferentes elementos. [14]
- **Átomos:** Es la unidad constituyente más pequeña de la materia que tiene las propiedades de un elemento químico. Cada sólido, líquido, gas y plasma se compone de átomos neutros o ionizados. [13]
- **Protones:** Partículas existentes en el núcleo de los átomos con carga positiva. [13]
- **Neutrones:** Partículas existentes en el núcleo de los átomos sin carga. [13]
- **Electrones:** Partículas presentes que orbitan alrededor de los átomos con carga negativa. [13]
- **Elemento Químico:** Es la sustancia formada por un sólo tipo de átomo. [13]
- **Tabla periódica:** La tabla periódica es una disposición de los elementos químicos en forma de tabla, ordenados por su número atómico y sus propiedades químicas. Este ordenamiento muestra tendencias periódicas, como elementos

con comportamiento similar en la misma columna. [13]

Funcionalidades

Se definió un espacio de trabajo, en el que se podrán realizar experimentos ya sea con átomos, moléculas o materiales y en el cual cada uno de ellos será representado a través un modelo 3D (Figura 1). El usuario se podrá mover a través del espacio de trabajo con el teclado y/o el mouse, para poder visualizar los modelos.

A partir de la selección o creación de los elementos tendrán su representación en el modelo 3D en el espacio de trabajo (Figura 4). La información y las funcionalidades que dispondrá cada una de ellas serán explicadas de formas más detallada posteriormente.

De esta manera el usuario tendrá una aproximación más cercana y tangible a la realidad de los conceptos que estudia y adquiere por medios tradicionales.



Figura 1 - Entorno 3D con átomo de Hidrógeno.

A. Átomos

El usuario podrá crear modelos de átomos interactuando con una interfaz de botones agregando o quitando las diferentes partículas subatómicas.

Dispondrá en pantalla, por cada tipo de partícula subatómica, un botón para agregarla y otro para eliminarla sin necesidad de acceder a menús complejos como se muestra en la Figura 2.



Figura 2 - Botones agregar o quitar partículas subatómicas.

Al agregar o quitar éstas, el sistema validará las configuraciones coincidentes para detectar qué elemento es

el que se está representando en pantalla y si se trata de un isótopo o de un catión o anión.

Sobre el elemento que esté trabajando, podrá visualizar un modelo 3D compuesto de protones y neutrones en el núcleo y de electrones que orbitan alrededor de éstos sobre sus órbitas, correspondientes de acuerdo al diagrama de diagonales de Linus Pauling (Figura 3).

K	1s ²			
L	2s ²	2p ⁶		
M	3s ²	3p ⁶	3d ¹⁰	
N	4s ²	4p ⁶	4d ¹⁰	4f ¹⁴
O	5s ²	5p ⁶	5d ¹⁰	5f ¹⁴
P	6s ²	6p ⁶	6d ¹⁰	
Q	7s ²	7p ⁶		

Figura 3- Diagrama de Linus Pauling.

Sobre un átomo seleccionado, el sistema le informará al usuario:

- Al agregar o quitar protones, se indicará el elemento generado en tiempo real.
- Al agregar o quitar neutrones se indicará si se ha llegado a un isótopo del elemento correspondiente generado hasta el momento, de no ser así se indicará "Elemento no encontrado".
- Al agregar o quitar electrones, se modifican según la Distribución de Electrones por Niveles que tiene cada elemento en particular.

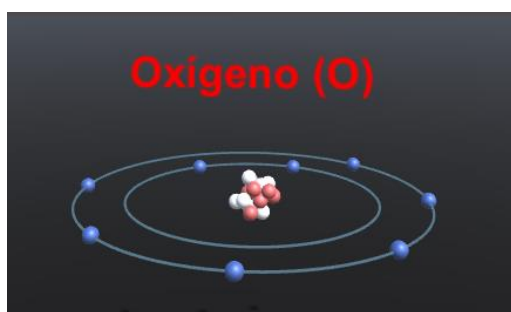


Figura 4 - Modelo 3D de un átomo de Oxígeno.

La adición/sustracción de partículas subatómicas estará limitada bajo las siguientes reglas:

1. La cantidad máxima de protones será de 118 según tabla periódica.

2. La cantidad máxima de electrones con la que podrá trabajar el usuario será de 280 por átomo ,debido a las limitaciones que tienen las órbitas.¹
3. La cantidad máxima de neutrones será de 176.²

Las limitaciones indicadas anteriormente tal como se mencionó se basan en los estudios realizados en la materia, sobre la máxima cantidad de partículas subatómicas que pueden poseer los elementos de acuerdo a las variaciones que puedan darse dando lugar como consecuencia a la generación de isótopos y aniones o cationes.

B. Tabla periódica

El usuario visualizará una tabla periódica interactiva de 118 elementos con su información (Figura 5) con la siguiente información de cada elemento:

- Número Atómico
- Símbolo
- Peso Atómico
- Configuración Electrónica

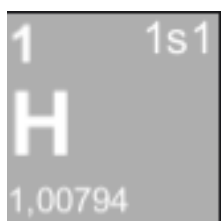


Figura 5 - Representación del Hidrógeno en la Tabla Periódica.

Los elementos estarán basados en el modelo de la Tabla Periódica Moderna que está conformada con 18 columnas (Figura 6). La tabla mostrará con colores los diferentes tipos de elemento según su clasificación:

- Inerte
- Metales Alcalinos
- Metales Alcalinos Térreos
- Elementos de Transición
- Metaloides
- Metales Pobres
- Gases Inertes
- Serie de Lantánidos
- Serie de Actínidos

Figura 6 - Tabla periódica.

Cuando el usuario seleccione un elemento de la tabla periódica, éste será creado en el espacio de trabajo mediante un modelo 3D, que le permitirá combinarlo con otros elementos para formar determinadas moléculas o bien jugar con el mismo modificando su estructura.

También tendrá la opción de elegir los elementos y visualizar su información (Figura 7 y Figura 8) indicada en categorías:

Información básica:

- Nombre
- Símbolo atómico
- Masa atómica
- Distribución de los electrones en sus órbitas
- Configuración electrónica
- Clasificación
- Electronegatividad



Figura 7 - Información Básica del elemento Zinc.

Propiedades físicas:

- Punto de Fusión
- Punto de Ebullición
- Estado de oxidación
- Vida media
- Energías de Ionización
- Calor de Fusión

¹ De acuerdo al modelo de diagonales de Linus Pauling, en el que se especifica la cantidad de electrones por orbital, el máximo de electrones es 280.

² Se ha definido este valor en honor al anteúltimo elemento sintético descubierto, el Teneso, cuyo primer isótopo sintetizado fue de 176 neutrones.

- Conductividad Térmica
- Resistividad eléctrica
- Densidad
- Valencia
- Modo de Decaimiento
- Punto de Curie
- Afinidad Electrónica
- Conductividad eléctrica
- Densidad eléctrica
- Estructura Cristalina
- Color
- Estado a temperatura ambiente.
- Isótopos Estables
- Abundancia en la corteza terrestre (%)
- Ángulos de Red
- Densidad Líquida
- Regla de Hund
- Números Cuánticos
- Volumen Molar
- Radio atómico en Angstroms
- Constante de Red
- Velocidad del sonido
- Expansión Térmica
- Radio de Van Der Waals
- Número y nombre de Grupos Espaciales

Aluminio	Aluminio
Isótopos Estables: 27Al	Presión Crítica: n/a
Isótopos Aplicaciones: n/a	Temperatura Crítica: n/a
Tipo Eléctrico: Conductor	Conductividad Eléctrica: 3.8×10^7 S/m
Radioactivo: No	Radio Covalente: 118 pm
Abundancia en Corteza Terrestre %: 8,07	Afinidad Electrónica: 42.5 KJ/mol
Descubrimiento: 1825 en Dinamarca	Punto Curie: n/a
Descubierto Por: Oersted, Hans Christian	Modo Decaimiento: n/a
Ángulos de Red: $Pi/2$, $Pi/2$, $Pi/2$	Electronegatividad: 1,61
Vida Media: Estable	Densidad Líquida: 2.375 g/cc
Módulo Compresibilidad(Bulk): 76 GPa	Constante de Red: 404.95, 404.95, 404.95 pm
Dureza Brinell: 245 MPa	Multiplicidad Atómica del Gas: n/a
Densidad (kg/m³): 2700	Calor de Fusión: 10.7 KJ/mol
	Calor de Vaporización: 293 KJ/mol

Figura 8 - Información detallada del átomo de aluminio.

C. Moléculas:

a. Creación - Manipulación

Realizando una combinación válida con los átomos necesarios el usuario obtendrá el modelo 3D de la molécula correspondiente. A partir de los modelos de geometría molecular se determinará la disposición de los átomos que las componen. Los átomos empleados en dicha combinación serán eliminados del espacio de trabajo y serán reemplazados por dicha molécula.

El modelo 3D de las moléculas está basado en el “Modelo de barras y esferas”, donde el tamaño de las esferas está determinado por el radio atómico del elemento que representa y el diámetro de las barras será mayor o menor según representen a un enlace Covalente (Figura 9) o Iónico (Figura 10). La cantidad de barras que tenga cada molécula, dependerá del valor de la valencia de cada elemento.

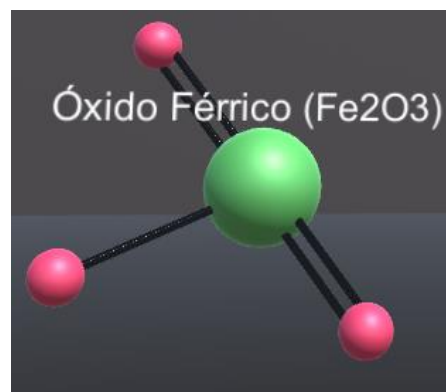


Figura 9 - Uniones Covalentes del Óxido Férrico.

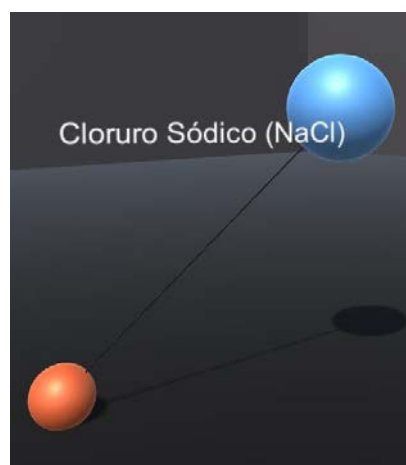


Figura 10 - Unión Iónica del Cloruro Sódico.

Se dispondrá de una lista predefinida (Figura 11) para crear las moléculas que el usuario elija a través del buscador, ya sea ingresando el nombre o la fórmula de la molécula.

Otra forma de crear una o varias moléculas es seleccionando las mismas desde una lista desplegable (Figura 11), evitándose el crearlas a través de una combinación de átomos.



Figura 11 - Lista predefinida de Moléculas.

A su vez, podrá consultar la información asociada a cada molécula pudiendo conocer los siguientes datos

- Nomenclatura sistemática
- Nomenclatura stock
- Nomenclatura tradicional
- Cantidad de átomos que la componen
- Nombre de cada átomo

D. Materiales

a. Creación y Manipulación

Realizando la combinación sobre las moléculas necesarias para la generación del material correspondiente, a través de su modelo 3D. Las moléculas utilizadas en dicha combinación serán quitadas del área de trabajo y serán reemplazados por el material generado.

Debido a la complejidad y al gran tamaño de ciertos materiales, el usuario dispondrá de una lista predefinida de materiales. Una vez seleccionado el material, el mismo se dispondrá en el espacio de trabajo.

E. Modo combinación

En el entorno de trabajo el usuario podrá intercalar entre 2 modos, “Modo creación” (Figura 12), y “Modo combinación” (Figura 13).

- Modo creación: Donde podrá crear tanto elementos, moléculas y/o los materiales deseados.

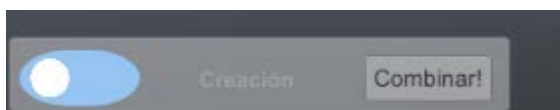


Figura 12 - Modo Creación.

- Modo combinación: Donde tendrá la posibilidad de combinar átomos para formar moléculas o combinar moléculas para formar materiales.

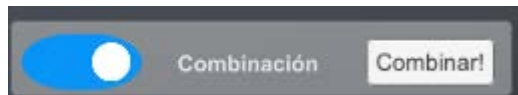


Figura 13 - Modo Combinación.

F. Cámara

Para una mejor visualización de los elementos en el espacio de trabajo, átomos, moléculas y materiales serán visualizados de tal forma que se permitirá al usuario el desplazamiento sobre el entorno desplazándose a través de una cámara rotación en 360°.

Los distintos desplazamientos podrán ser realizados de la siguiente forma:

1. A través de las teclas de movimiento
 - a. W hacia adelante
 - b. S hacia atrás
 - c. A hacia la izquierda
 - d. D hacia la derecha
2. A través de la rueda del mouse
 - a. hacia adelante *ZOOM IN*
 - b. hacia atrás *ZOOM OUT*
3. Manteniendo el botón izquierdo del mouse se girará sobre su posición.
4. Con la tecla “R” se reiniciará la posición de la cámara hacia adelante.

G. Sugerencias

Al seleccionar un átomo, se podrá visualizar en el panel desplegable inferior las sugerencias de combinación para dicha molécula (Figura 14).

Además, le permitirá saber al usuario si alguno de los elementos necesarios para dicha combinación no están creados en el entorno, permitiéndole crearlos de forma automática para poder llevar a cabo la combinación correspondiente.



Figura 14 - Sugerencia de combinación.

H. Información

a. Información-General

Al seleccionar un átomo, y desplegar el menú inferior se podrá visualizar su información general (visualizar propiedades básicas). Dicha información, será visualizada en el panel desplegable inferior, que estará activo al seleccionar un elemento.

b. Información-Detallada

Al seleccionar un átomo, se podrá ingresar a la sección de información detallada. Dicha información será visible en forma de libro para que su visualización sea más amigable (visualizar propiedades físicas).

I. Autoevaluación

El usuario podrá realizar una autoevaluación, al resolver 10 preguntas que serán dadas de forma aleatoria de un total de 100, donde tendrá que contestar preguntas relacionadas con los siguientes temas, según se lo indique el programa:

- Estructura química y tabla periódica
- Enlaces químicos
- Estequiometría

Luego de resolver las 10 preguntas, se le informará cuáles son correctas y cuáles incorrectas.

Arquitectura de la solución

El producto software está desarrollado por medio del motor gráfico *Unity Version 2018.3.12f1*, en lenguaje C#. Es compatible con las versiones de *.Net Framework 4.0* en adelante. El motor de base de datos que se utilizó *SQLite: 3.11.2*. Está diseñado para utilizar en sistemas operativos de *Windows 8, 8.1 y 10* de arquitectura de 32 y 64 bits.

El software está dividido en diferentes módulos para poder utilizar la base de datos y estas están relacionadas a su vez entre las mismas (Figura 15) para un mejor control de la información

Los componentes del software están divididos de la siguiente forma:

1. **DB Manager:** Es el encargado principal de brindarle la información de los registros de la base de datos a los demás componentes.
2. **Atom Manager:** Se encarga de la información de los átomos, qué información muestra, si es en la

pantalla de trabajo o desde la tabla periódica, la verificación entre átomos existentes en la vida real y los creados por el usuario, el cambio del estado del átomo al agregar o quitar partículas subatómicas, agregar o eliminar átomos, e indicar si un átomo es un isótopo o no, un anión o catión.

3. **Molecule Manager:** Se encarga de la información de las moléculas, como la verificación de los diferentes tipos de moléculas existentes en la base de datos y como es el modelo 3D del mismo.
4. **Material Manager:** Se encarga de la información de los materiales como la verificación de los diferentes tipos de materiales, indicando si es un material compuesto por átomos simples o por moléculas existentes en la base de datos y como es el modelo 3D del mismo.
5. **Combination Manager:** Se encarga de verificar la combinación de los átomos para crear moléculas, la combinación de átomos para crear materiales y la combinación de moléculas para crear materiales.
6. **Position Manager:** Se encarga de la posición en donde se crean los modelos 3D de los átomos, moléculas y materiales en el espacio de trabajo, asignándoles coordenadas en los ejes X, Y y Z en el espacio de trabajo.

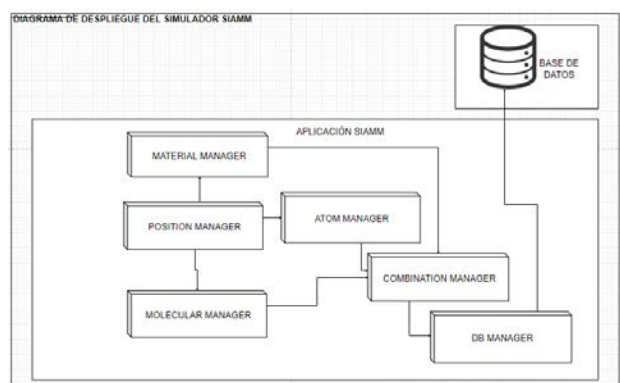


Figura 15 - Componentes del Software.

Resultado

Se dispuso a un grupo de profesores de química la herramienta para ser probada, dando lugar a los siguientes comentarios positivos en cuanto a las funcionalidades incorporadas:

- Navegabilidad sobre el espacio de trabajo.
- Ver la información de los átomos.

- Ver la información de los átomos en la tabla periódica.
- Ver las sugerencias de combinaciones en los átomos presentes en el espacio de trabajo
- Visualizar la opción de Modo Combinación para combinar los átomos para crear moléculas.

Como puede verse, la devolución fue positiva en casi todo sentido.

Respecto al alcance de la misma nos han sugerido limitar la cantidad de moléculas para ajustarla a las que se enseñan únicamente en el contenido de la materia dado que una cantidad más amplia puede llegar a confundir a los alumnos o no llegar a interesarles.

Conclusión

La tecnología es una herramienta que en el presente contribuye enormemente a la enseñanza y creemos que aplicada de forma adecuada podrá ser un apoyo invaluable a estudiantes secundarios o universitarios que comienzan sus estudios en el campo de la química.

De esta forma, ofrecer una solución rápida y sencilla mediante el uso de esta herramienta será el motor que impulse el aprendizaje interactivo. Permitiendo ser de apoyo para dar una aproximación y experiencias más cercanas a la realidad, que un estudiante no encuentra en los libros, dando lugar a la posibilidad de que éste saque sus propias conclusiones.

Siendo SIAMM una herramienta *OpenSource*, o de Código Abierto, se brindará la posibilidad a la comunidad de seguir innovando. Esto permitirá encontrar nuevas funcionalidades:

- Integración con otros sistemas.
- Integración con otras plataformas.
- Incorporación de nuevos modelos atómicos.
- Incorporación de nueva información sobre átomos.
- Incorporación de nueva información sobre moléculas.
- Modelado en 3D de nuevas moléculas.
- Modelado en 3D de nuevos materiales.
- Incorporación de un espacio de comunicación online.

Agradecimientos

El equipo de desarrollo desea agradecer a las siguientes personas y entidades:

- Alejandra De Los Ríos (Jefa de cátedra de Química), Graciela Garrido, Alfredo Amato, Daniel Leiva, (Profesores de Química), quienes nos abrieron las puertas a su laboratorio.
- Walter Corvalan Profesor de química de secundaria
- Ailén Piñeiro, quien nos ayudó a confeccionar el logo del producto.
- Universidad Nacional de La Matanza

Referencias

[1] Estadísticas realizadas por UNICEF Argentina. Disponible: <https://www.unicef.org/argentina/media/691/file/Las%20TIC%20y%20la%20educaci%C3%B3n%20secundaria%20en%20la%20Argentina.pdf>

[2] Base de datos de moléculas. Disponible: <http://www.educaplanet.org/molculas3d/inorganicas.html>

[3] Flowers, Paul, Theopold Klaus, Langley Richard, y Robinson William. Chemistry, 2015 Openstax College, Houston, Texas 77005, pp 315-322.

[4] Datos de los elementos Disponible: <https://opentextbc.ca/anatomyandphysiology/chapter/2-1-elements-and-atoms-the-building-blocks-of-matter/>

[5] Forma de las moléculas. Disponible: http://www3.uah.es/edejesus/resumenes/EQEM/tema_393.pdf

[6] Geometría de los ángulos de las moléculas. Disponible: <http://corinto.pucp.edu.pe/quimicageneral/contenido/344-geometria-molecular-teoria-rpccv.html>

[7] Tabla periódica interactiva. Disponible: <http://tablaperiodica.quimica.uc.cl/#>

[8] Tabla periódica. Disponible: <https://www.ptable.com/?lang=es>

[9] Modelos 3D de moléculas. Disponible: <http://biomodel.uah.es/en/DIY/JSME/draw.es.htm>

[10] Nomenclatura de los elementos. Disponible: https://www.ecured.cu/Nomenclatura_qu%C3%ADmica

[11] Moléculas de ejemplos. Disponible: <https://www.ejemplos.co/50-ejemplos-de-moleculas/>

[12] Modelo 3D de las moléculas. Disponible: https://phet.colorado.edu/sims/html/molecule-shapes/latest/molecule-shapes_es.html

[13] Petrucci, Ralph H., Geoffrey Herring., y Carey Bissonnette. Química General, 2011, PEARSON EDUCACIÓN, S.A., Madrid (España), pp 37- 54.

[14] Chang, Raymond., y College, Williams. Química, Séptima Edición, 2002, McGRAW-HILL, Colombia, pp 8-11 y 35 - 67.

[15] El elemento 117 con más neutrones. Disponible:
<https://www.lne.es/sociedad-cultura/2010/04/08/cientificos-sintetizan-primera-vez-elemento-117-tabla-periodica/897522.html>

[16] Capas de un átomo - Cantidad máxima de electrones.
Disponible: <https://es.scribd.com/doc/51165705/Capas-de-un-Atomo>

[17] Estadísticas UNICEF. Disponible:
<https://www.lanacion.com.ar/tecnologia/presentes-entre-docentes-y-alumnos-las-computadoras-buscan-su-lugar-en-las-aulas-nid-1850411>

[18] El uso de las tecnologías en las escuelas. Disponible:
<http://www.clickeados.gob.ar/index.php/manuales/item/233-tecnologia-en-el-aula-las-computadoras-dan-mejores-resultados-que-los-celulares>