

Visualización interactiva de la geometría molecular: Integración de UCSF ChimeraX y el simulador PhET en la enseñanza universitaria

Interactive visualization of molecular geometry: Integration of UCSF ChimeraX and the PhET simulator in university teaching

María Vanessa Zambrano Loor^{1*} <https://orcid.org/0009-0009-3967-4129>

Yulexy Navarrete Pita² <https://orcid.org/0000-0001-7804-9830>

Fernando Daniel Suvire Pedroza³ <https://orcid.org/0000-0002-6080-7346>

¹Estudiante de Posgrado. Maestría Académica en Educación con Mención en Docencia e Investigación en la Educación Superior. Universidad Técnica de Manabí, Ecuador

²Departamento de Didáctica para la Educación Básica e Inicial. Facultad de Ciencias de la Educación. Universidad Técnica de Manabí, Ecuador yulexy.navarrete@utm.edu.ec

³Departamento de Química - Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia. Universidad Nacional de San Luis, Argentina fsuvire@unsl.edu.ar

*Autor para la correspondencia. mzambrano9713@utm.edu.ec

RESUMEN

El pensamiento tridimensional es crucial en química para entender la estructura y propiedades moleculares. Este estudio tiene como objetivo integrar las herramientas UCSF ChimeraX y PhET para mejorar la enseñanza de la geometría molecular en estudiantes de Educación Superior. Se aplicó una metodología científica que incluyó la recolección de información de 51 estudiantes de la carrera de Pedagogía de las Ciencias Experimentales en la Universidad Técnica de Manabí. Los resultados indican que el uso de estas herramientas mejora la comprensión de conceptos clave, incrementa el interés y la participación estudiantil, y potencia la memoria espacial. Se concluye que la implementación de estas herramientas en la enseñanza de química puede ser altamente beneficiosa, sugiriendo su uso en otras áreas de la asignatura para promover una educación más efectiva y significativa.

Palabras clave: Educación superior, Geometría molecular, PhET, Software UCSF ChimeraX.

ABSTRACT

Three-dimensional thinking is crucial in chemistry to understand molecular structure and properties. This study aims to integrate the UCSF tools ChimeraX and PhET to improve the teaching of molecular geometry in higher education students. A scientific methodology was applied that included the collection of information from 51 students of the Pedagogy of Experimental Sciences at the Technical University of Manabi. The results indicate that the use of these tools improves the understanding of key concepts, increases student interest and participation, and enhances spatial memory. It is concluded that the implementation of these tools in chemistry teaching can be highly beneficial, suggesting their use in other areas of the subject to promote a more effective and meaningful education.

Keywords: Higher Education, Molecular Geometry, PhET, UCSF ChimeraX Software

Recibido:

Aprobado:

INTRODUCCIÓN

La Química Orgánica es fundamental para comprender fenómenos químicos y biológicos, así como su relación con la tecnología y el medio ambiente. Sin embargo, la enseñanza de la química molecular presenta dificultades debido a la abstracción de sus conceptos, que requieren visualización de estructuras a nivel molecular. Esto puede resultar abrumador, especialmente para estudiantes sin una base sólida en química.

Es crucial fomentar una motivación tridimensional que conecte teoría con representaciones visuales concretas. Las metodologías tradicionales a menudo no se adaptan a los diferentes estilos de aprendizaje, generando frustración. Por ello, es necesario implementar enfoques interactivos que promuevan la participación activa de los estudiantes.

Barraqué et al., (2021) se enfoca en fomentar una actitud proactiva hacia el estudio y establecer bases teóricas sólidas en Química. El trabajo presenta una metodología innovadora, los resultados obtenidos y los desafíos futuros, destacando su

implementación en dos asignaturas de primer año en la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata, Argentina. Los resultados motivan a seguir explorando métodos alternativos de enseñanza.

La estructura molecular es clave para entender las reacciones químicas, ya que determina el comportamiento de las moléculas. Esta relación influye en la reactividad, polaridad y propiedades físicas, afectando las interacciones con otras sustancias. La enseñanza de la estructura molecular, mediante herramientas como modelos y software de simulación, fomenta habilidades de visualización y facilita el aprendizaje. Además, es esencial en biología y medicina, destacando la necesidad de métodos pedagógicos efectivos para abordar su complejidad.

Los autores Suárez y Betancourt (2023) plantean que:

“cuando se habla de esta disciplina desde las ciencias de la educación, se analiza desde un nivel conceptual superficial, debido a que es utilizada para momentos de intervención en el aula de clase, donde se pueda ayudar a dar claridad a conceptos abstractos, con los que se puede presentar dificultades en el aprendizaje. Por ello, desde las ciencias de la educación, se aprovecha la Química Computacional para la elaboración de recursos didácticos y como una forma de incorporar la química con la tecnología” (p. 82).

La química computacional utiliza software de visualización molecular, como UCSF ChimeraX y PhET, para aumentar la motivación e interés de los estudiantes en la química orgánica. Al manipular y explorar moléculas en 3D, los estudiantes desarrollan una comprensión más profunda y un mayor aprecio por la estructura y propiedades de las sustancias químicas.

Este enfoque puede resultar en un mayor compromiso con el aprendizaje y una mejor retención de los conocimientos adquiridos.

De acuerdo con Fung et al., (2024), “Con el auge de la tecnología y la ubicuidad de los dispositivos digitales, creemos que el empleo estratégico de herramientas digitales puede enriquecer significativamente la experiencia de aprendizaje en estas disciplinas críticas” (p. 1191). Un aspecto crucial en la educación contemporánea es el papel transformador de la tecnología en el aprendizaje, especialmente en disciplinas como la Química. A medida que la tecnología avanza y los dispositivos digitales se vuelven omnipresentes, se abre un vasto horizonte de oportunidades para enriquecer la experiencia educativa.

El uso de herramientas digitales facilita una instrucción interactiva y participativa, permitiendo a los estudiantes experimentar con reacciones químicas en un entorno seguro.

Los recursos multimedia, como videos y tutoriales, desglosan conceptos complejos y los hacen más comprensibles. Además, la tecnología fomenta la colaboración a través de foros, wikis y aplicaciones de trabajo en grupo, enriqueciendo la enseñanza y desarrollando habilidades interpersonales esenciales en el mundo profesional.

En su estudio, los autores Wekerle et al., (2024) consideran que: “la tecnología digital tiene un gran potencial para promover el aprendizaje en la enseñanza superior” (p. 1), poniendo a prueba el modelo Interactivo, Constructivo, Activo, Pasivo (ICAP) y cómo se relacionan las actividades de aprendizaje potenciadas por la tecnología con los resultados cognitivos y afectivos-motivacionales del aprendizaje en la enseñanza superior.

Sin embargo, es importante señalar que la mera incorporación de tecnología no garantiza una mejora en la adquisición de conocimientos. La clave radica en su implementación consciente y pedagógicamente fundamentada. Los educadores deben seleccionar herramientas que se alineen con los objetivos de aprendizaje y que realmente aporten valor a la experiencia educativa. También es vital ofrecer formación y apoyo tanto a docentes como a estudiantes para maximizar el potencial de estas herramientas.

Las herramientas digitales como PhET, junto con el UCSF ChimeraX, que, si se utilizan adecuadamente, pueden transformar el proceso de enseñanza. Estas tecnologías hacen que el aprendizaje sea más dinámico, accesible y relevante en un mundo cada vez más digitalizado. Es esencial abordar su implementación con una visión crítica y reflexiva.

Los autores Pimpasri y Limpanuparb (2024) afirman que “La comprensión de la estructura molecular es fundamental en la enseñanza de la química” (p. 439). Esta afirmación se basa en varios puntos clave que subrayan la importancia de las estructuras moleculares en el proceso de enseñanza y la aplicación de conceptos químicos.

El objetivo de esta investigación es integrar los softwares UCSF ChimeraX y PhET para mejorar la enseñanza de la geometría molecular en estudiantes de Educación Superior.

DESARROLLO

La investigación se llevó a cabo con 51 estudiantes en la carrera de Pedagogía de las Ciencias Experimentales Química y Biología pertenecientes a la Facultad de Ciencias de la Educación de la Universidad Técnica de Manabí. Se seleccionó una muestra por conveniencia perteneciente a la clasificación de no probabilístico, ya que los participantes correspondían a dos cursos completos disponibles para la investigación, de séptimo y octavo semestre que poseen una matrícula total de 140 estudiantes (universo); todos los

estudiantes matriculados en la asignatura participaron voluntariamente. No se aplicaron criterios de exclusión adicionales, lo que asegura la representatividad del grupo y facilita la implementación de las herramientas tecnológicas en un entorno realista, lo que permite evaluar de manera efectiva el impacto de las herramientas tecnológicas en el aprendizaje de la geometría molecular, adaptándose a las condiciones reales del aula lo que permite una evaluación clara de los resultados.

La mayoría de los participantes tenían conocimientos básicos en química inorgánica. En términos de habilidades tecnológicas, todos los participantes poseían competencias digitales a nivel de usuario, como el manejo de herramientas ofimáticas y el uso de internet. Aproximadamente un 30% de los estudiantes había interactuado previamente con simuladores educativos en asignaturas anteriores, mientras que el 70% enfrentó esta experiencia por primera vez. Estas características iniciales proporcionaron un punto de partida diverso para evaluar la efectividad de las herramientas tecnológicas empleadas.

Para recolectar datos sobre el aprendizaje y la motivación de los estudiantes, se utilizaron cuestionarios en línea con preguntas de opción múltiple y abiertas, diseñados para evaluar la comprensión conceptual de la geometría molecular antes y después del uso de las herramientas tecnológicas. Además, se empleó una escala Likert de cinco puntos para medir los niveles de motivación y percepción sobre el uso de UCSF ChimeraX y PhET. Ambos instrumentos fueron validados mediante una revisión de expertos en didáctica de la química y pruebas piloto con un grupo reducido de estudiantes, lo que permitió ajustar las preguntas para garantizar su claridad y relevancia. La entrevista semiestructurada también se incluyó como técnica cualitativa para profundizar en las percepciones de los participantes, obteniendo información adicional sobre los beneficios y desafíos de las herramientas tecnológicas utilizadas.

Los datos cualitativos obtenidos mediante entrevistas semiestructuradas y preguntas abiertas fueron analizados mediante un análisis de contenido. Las respuestas se agruparon en categorías temáticas, como: 'motivación', 'desarrollo de habilidades espaciales' y 'dificultades tecnológicas', lo que permitió identificar patrones y tendencias clave en las percepciones de los participantes.”

Lo novedoso de esta investigación es la propuesta de integrar herramientas digitales, como UCSF ChimeraX y PhET, en la enseñanza de la geometría molecular. Este enfoque es poco común en la educación química y busca ofrecer una alternativa que supere las limitaciones de los métodos tradicionales, haciendo el aprendizaje más dinámico y

accesible.

Este estudio se centró en integrar los dos softwares PhET Y ChimeraX como una estrategia de enseñanza-aprendizaje para mejorar la comprensión de conceptos clave en química orgánica. Ambas herramientas permiten a los estudiantes visualizar y manipular modelos moleculares en 3D, facilitando la comprensión de temas como la hibridación de orbitales y las interacciones intermoleculares. Se plantearon objetivos como utilizar PhET y ChimeraX para que los estudiantes manipulen y comprendan la geometría molecular, medir cómo estas herramientas influyen en la motivación e interés de los estudiantes por la química orgánica, y proveer evidencia sobre la efectividad de las herramientas de visualización molecular en la enseñanza de la geometría molecular.

La población del estudio incluyó a 51 estudiantes de la carrera de Pedagogía de las Ciencias Experimentales en la Universidad Técnica de Manabí. Se utilizó una metodología mixta, combinando enfoques cualitativos y cuantitativos para evaluar el impacto de las herramientas en el aprendizaje.

Estudios como el de los autores Listenberger et al., (2022), el proyecto brinda a los estudiantes la oportunidad de explorar la estructura utilizando el software USCF ChimeraX y la función de las proteínas mientras desarrollan habilidades de visualización y modelado; El proyecto se implementó con estudiantes de bioquímica y se sugiere que puede adaptarse a diferentes formatos de enseñanza, ya sea presencial o remoto. El software USCF ChimeraX se comparte como un recurso útil para instructores interesados en la enseñanza de la estructura y función de las proteínas mediante actividades prácticas basadas en la investigación.

Y los autores Meng, et al., (2023), destacan que los avances en la construcción de modelos atómicos están automatizando procesos y mejorando la precisión. Herramientas como (pliegue alfa) AlphaFold, Phenix y Rosetta reducen el tiempo de modelado. ChimeraX ofrece interfaces de usuario y visualización 3D, facilitando la integración de métodos y minimizando errores. Es extensible con Python y simplifica la transferencia de resultados. Disponible para macOS, Windows y Linux, ChimeraX proporciona descargas, documentación y tutoriales en su sitio web.

Goddard et al., (2018), "UCSF ChimeraX es un software de última generación para la visualización y el análisis de estructuras moleculares, mapas de densidad, microscopía 3D y datos asociados. Aborda los desafíos en cuanto al tamaño, el alcance y los distintos tipos de datos asociados con métodos experimentales de vanguardia, al tiempo que

proporciona opciones avanzadas para la representación de alta calidad (oclusión ambiental interactiva, cálculos confiables de superficies moleculares, etc.) y enfoques profesionales para el diseño y la distribución”. ChimeraX se presenta como una herramienta robusta y versátil para la comunidad científica, mejorando la visualización y el análisis de datos moleculares.

Los autores Carrión et al., (2020) concluyen en su investigación que el uso de herramientas tecnológicas como PhET no solo enriquece el aprendizaje, sino que también motiva a los estudiantes, promoviendo un entorno educativo más dinámico y efectivo. Simulador virtual PhET como estrategia metodológica para el aprendizaje de Química se centra en la efectividad del simulador virtual PhET como herramienta educativa para mejorar el proceso de enseñanza-aprendizaje en la materia de química. Los autores argumentan que la integración de simulaciones virtuales en el aula permite a los estudiantes experimentar conceptos químicos de manera interactiva y visual, lo que facilita una comprensión más profunda y significativa.

Karimi et al., (2024) argumentan que las simulaciones son herramientas poderosas para mejorar las habilidades de pensamiento crítico en la educación científica. A través de experiencias de aprendizaje dinámicas e inmersivas, las simulaciones permiten a los estudiantes experimentar con conceptos científicos, resolver problemas complejos y tomar decisiones informadas en un entorno controlado. Esto contrasta con los métodos de enseñanza tradicionales, que a menudo no fomentan el pensamiento crítico y la aplicación práctica del conocimiento. El artículo aboga por la integración de simulaciones en la enseñanza para preparar a los estudiantes a enfrentar los desafíos del mundo real y desarrollar una comprensión más profunda de los principios científicos.

Trisviati y Lutfi (2022) llegaron a la conclusión que el desarrollo de herramientas de aprendizaje guiadas por indagación, asistidas por simulación PhET, puede mejorar significativamente tanto la motivación como los resultados de aprendizaje de los estudiantes en la submateria de formas moleculares.

Previos estudios han destacado la efectividad de USCF ChimeraX y PhET para mejorar la comprensión abstracta en los estudiantes. Estas herramientas han sido validadas como efectivas y prácticas, lo que respalda su implementación en el aula.

Las conclusiones indican que estas herramientas digitales mejoran la comprensión de conceptos abstractos en química, fomentan el pensamiento crítico al permitir a los estudiantes resolver problemas y tomar decisiones informadas, y destacan la necesidad de

capacitación docente. A pesar de sus beneficios, la falta de capacitación en el uso de estas herramientas limita su implementación. Se recomienda promover el uso de PhET y ChimeraX en diversas instituciones para maximizar su impacto, desarrollar programas de formación para docentes en el uso efectivo de estas tecnologías, y realizar estudios adicionales para evaluar el impacto a largo plazo de estas herramientas en la educación química. Este resumen proporciona una visión clara de cómo las herramientas digitales pueden transformar la enseñanza de la química, mejorando tanto la comprensión conceptual como el interés de los estudiantes en la materia.

Los objetos de estudio fueron sometidos a una encuesta la cual estaba conformada por 18 preguntas tipo que permitieron establecer la relación establecida entre el usuario PhET y el USCF ChimeraX, para las preguntas de la encuesta se utilizó las siguientes dimensiones:

- Distribución geométrica y forma molecular
- Propiedades que predisponen a interacciones
- Orbitales, niveles energéticos y reactividad
- Aspectos metodológicos: uso de chimerax. Phet y acceso al pdb
- Aspectos pedagógicos y de aprendizaje

Para la aplicación de la encuesta se ocupa una herramienta libre y gratuita para ser realizada en línea, este medio permite cuantificar las respuestas para mostrar los resultados en tablas y gráficos de manera eficaz y eficiente.

Dentro de las actividades que se puede realizar en el USCF ChimeraX incluyen: visualización y análisis de geometría molecular de diferentes compuestos orgánicos, manipulación y modificación de modelos moleculares, ejercicios de resolución de problemas relacionados con la geometría molecular.

El proceso de validación realizado implicó asegurar la efectividad de las actividades de enseñanza-aprendizaje implementadas con PhET y UCSF ChimeraX, se llevó a cabo un proceso de validación que incluyó la selección y caracterización del experto en el campo de la química y la educación científica.

El experto seleccionado fue caracterizado en función de su formación académica, experiencia profesional y familiaridad con PhET y UCSF ChimeraX. Se consideraron aspectos como:

- Títulos académicos (doctorado, maestría, etc.)
- Años de experiencia en la enseñanza de la química orgánica

- Experiencia previa en el uso de herramientas de visualización molecular
- Participación en proyectos de investigación relacionados con la enseñanza de las ciencias.

En esta investigación, se colaboró de manera efectiva con el experto en química a través de plataformas de software en línea. Esta modalidad permitió un intercambio fluido de ideas y conocimientos, facilitando el análisis de datos y la discusión de resultados en tiempo real. La utilización de herramientas digitales no solo optimizó el proceso de trabajo, sino que también garantizó que se pudiera acceder a información actualizada y relevante, enriqueciendo así la calidad de la investigación. La sinergia entre el experto y el equipo de trabajo fue clave para alcanzar los objetivos propuestos.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Resultados de la encuesta aplicada a los estudiantes

El análisis de la recopilación de datos ha permitido determinar que, al observar los resultados, es fundamental evaluar si el uso de software virtual influye en el aprendizaje de los estudiantes, así como su aplicación en una o varias asignaturas. Por lo tanto, se llevó a cabo un análisis de frecuencias de las variables, cuyos resultados exhaustivos se presentan en la siguiente tabla:

Tabla 1. Experiencia y opinión en geometría molecular y herramientas digitales

Pregunta 1					
	Nunca	Rara vez	A veces	Frecuentemente	Siempre
¿Puedes predecir propiedades físicas y químicas de las moléculas basándote en su geometría molecular?	Frecuencia				
	0	8	21	13	9
	Porcentaje				
	0%	16%	41%	25%	18%
Pregunta 2					
	No, para nada	En su mayoría no	Neutral	En su mayoría si	Si, totalmente
¿Las herramientas UCSF ChimeraX y PhET te ayudaron a visualizar mejor las estructuras tridimensionales de las moléculas?	Frecuencia				
	5	3	16	16	11
	Porcentaje				
	10%	6%	31%	31%	22%

Pregunta 3					
	Menos que antes	Igual que antes	Si, algo mas	Si, en gran medida	
¿Te sientes más competente en la navegación y búsqueda de información en bases de datos científicas después de esta experiencia?	Frecuencia				
	3	6	30	12	
	Porcentaje				
	6%	12%	59%	24%	
Pregunta 4					
	Nada	Neutral	Poco	Si, en cierta medida	Si, significativamente
¿Consideras que el uso de modelos físicos y software como ChimeraX ha mejorado tu habilidad para visualizar moléculas en tres dimensiones?	Frecuencia				
	2	13	7	17	12
	Porcentaje				
	4%	25%	14%	33%	24%
Pregunta 5					
	Nada	Poco	Neutral	Si, en cierta medida	Si, significativamente
¿Ha mejorado tu comprensión de la estereoquímica e isomería en química orgánica al estudiar la geometría molecular?	Frecuencia				
	1	7	14	22	7
	Porcentaje				
	2%	14%	27%	43%	14%
Pregunta 6					
	Nada	Poco	Neutral	Si, en cierta medida	Si, significativamente
¿Consideras que el uso de herramientas como ChimeraX y el acceso al PDB han mejorado tu aprendizaje en el tema de geometría molecular?	Frecuencia				
	2	3	17	21	8
	Porcentaje				
	4%	6%	33%	41%	16%

Los resultados de la encuesta muestran que la mayoría de los estudiantes tiene una buena comprensión de los conceptos de química molecular. Sin embargo, hay áreas donde se

puede mejorar, especialmente en la identificación de orbitales y la comprensión de dipolos. Las herramientas tecnológicas como ChimeraX y Phet son valoradas positivamente, indicando su efectividad en el aprendizaje. Además, se observa que la integración de prácticas científicas en el aprendizaje tiene un impacto significativo en la comprensión de los conceptos.

Los resultados de este estudio coinciden con hallazgos anteriores que indican que la revolución de las tecnologías de la información ha transformado radicalmente nuestra forma de observar, entender, disfrutar y experimentar el mundo en nuestra vida cotidiana. En la pregunta 1 el 66% de los encuestados cree que puede predecir propiedades físicas y químicas de las moléculas basándose en su geometría molecular, esto sugiere una confianza en su comprensión del tema, alineándose con el estudio de Rakhmetova et al., (2024), donde se destaca que el uso de simuladores como PhET mejora la comprensión conceptual y la confianza de los estudiantes en sus habilidades.

En la pregunta 3 el 62% de los encuestados reporta que las herramientas UCSF ChimeraX y PhET les ayudaron a visualizar mejor las estructuras tridimensionales, este hallazgo coincide con las afirmaciones de Pettersen et al., (2020) sobre el impacto positivo de UCSF ChimeraX en la enseñanza, proporcionando una visualización interactiva que mejora la comprensión.

En la pregunta 4 el 83% de los encuestados se siente más competente en la búsqueda de información en bases de datos científicas, este resultado refleja el impacto positivo de la experiencia educativa, similar a las conclusiones de Menor (2023) sobre cómo el uso de herramientas digitales puede aumentar la competencia de los estudiantes en entornos de aprendizaje.

La pregunta 5 el 57% de los encuestados considera que su habilidad para visualizar moléculas ha mejorado, este resultado refuerza la efectividad de las herramientas tecnológicas en el aprendizaje, como se menciona en el trabajo de Burley et al., (2017), que destaca la utilidad de UCSF ChimeraX en la creación de modelos tridimensionales.

En la pregunta 6 el 57% de los encuestados reconoce una mejora en su comprensión de la estereoquímica e isomería, esto subraya la relevancia de la geometría molecular en el aprendizaje, apoyando la idea de que las herramientas tecnológicas facilitan esta comprensión.

La pregunta 7 el 57% de los encuestados considera que el uso de modelos físicos y software ha mejorado su aprendizaje en geometría molecular, este hallazgo es consistente

con los resultados de Rakhmetova et al., (2024) y Haryanto et al., (2024), que destacan cómo los simuladores virtuales incrementan el interés y la efectividad del aprendizaje en química.

A pesar de los resultados positivos, se identificaron limitaciones en el diseño y la implementación del estudio, como la restricción de la muestra a uno o dos cursos y problemas de infraestructura tecnológica. Para futuras investigaciones, se planea:

- Replicar el estudio en una muestra más diversa que incluya estudiantes de diferentes niveles educativos.
- Garantizar un soporte tecnológico adecuado y realizar una evaluación previa de las competencias digitales de los participantes.

Los resultados de la encuesta reflejan una buena comprensión de los conceptos de química molecular por parte de los estudiantes y una percepción positiva sobre el uso de herramientas tecnológicas como UCSF ChimeraX y PhET. Estos hallazgos son coherentes con la literatura existente, que resalta la efectividad de las tecnologías digitales en la enseñanza de la química. La integración de prácticas científicas en el aprendizaje ha demostrado tener un impacto significativo en la comprensión de los conceptos, sugiriendo que el uso de herramientas interactivas debería ser promovido en la educación química.

Tabla 2. Análisis de las preguntas de la encuesta

Pregunta	Análisis de los resultados
¿Puedes predecir propiedades físicas y químicas de las moléculas basándote en su geometría molecular?	El 66% de los encuestados confía en poder predecir propiedades físicas y químicas de las moléculas a partir de su geometría, mientras que solo el 34% tiene opiniones variadas, con un 18% afirmando que siempre pueden hacerlo. La falta de respuestas negativas sugiere una percepción positiva sobre la relación entre geometría molecular y propiedades
¿Las herramientas UCSF ChimeraX y PhET te ayudaron a visualizar mejor las estructuras tridimensionales de las moléculas?	Un 31% de los encuestados considera que las herramientas les ayudaron, mientras que otro 31% se muestra neutral. Un 22% afirma que les ayudaron totalmente, y un 16% opina que no les ayudaron en su mayoría. Limitaciones como una muestra reducida y problemas de infraestructura tecnológica afectaron el estudio. Para futuras investigaciones, se planea ampliar la muestra e implementar un soporte tecnológico adecuado y evaluar las competencias digitales de los participantes.
¿Te sientes más competente en la navegación y búsqueda de información en bases de datos científicas	Un 59% de los encuestados se siente algo más competente tras la experiencia, y un 24% afirma sentirse en gran medida más competente, indicando una mejora general en sus habilidades. Solo un 12% se siente igual y un 6% menos, reflejando un impacto positivo en su capacidad para buscar información en bases de datos científicas.

después de esta experiencia?	
¿Consideras que el uso de modelos físicos y software como ChimeraX ha mejorado tu habilidad para visualizar moléculas en tres dimensiones?	Un 33% de los encuestados siente que su habilidad para visualizar moléculas ha mejorado en cierta medida, y un 24% afirma una mejora significativa, lo que resalta el valor de estas herramientas en su aprendizaje. Un 25% se muestra neutral, mientras que un 14% siente que ha mejorado poco y un 4% no ha notado mejora. En total, el 57% percibe algún grado de mejora, destacando la efectividad de modelos físicos y software en el aprendizaje de la química.
¿Ha mejorado tu comprensión de la estereoquímica e isomería en química orgánica al estudiar la geometría molecular?	Un 43% de los encuestados asegura que su comprensión ha mejorado en cierta medida, y un 14% afirma una mejora significativa, indicando el valor del estudio de la geometría molecular para entender la estereoquímica. Un 27% se muestra neutral y un 14% siente que ha mejorado poco, mientras que solo un 2% no percibe mejora. En total, el 57% reconoce algún grado de mejora, destacando la importancia de la geometría molecular en el aprendizaje de la química orgánica.
¿Consideras que el uso de herramientas como ChimeraX y el acceso al PDB han mejorado tu aprendizaje en el tema de geometría molecular?	Un 41% de los encuestados considera que su aprendizaje ha mejorado en cierta medida gracias a estas herramientas, y un 16% afirma una mejora significativa, destacando su efectividad en el proceso educativo. Un 33% se muestra neutral, mientras que un 6% siente que ha mejorado poco y un 4% no ha notado mejora. En total, el 57% reconoce algún grado de mejora, subrayando la importancia de las herramientas digitales en la enseñanza de la geometría molecular.

Vía de solución para la visualización interactiva de la geometría molecular:

1. Capacitación docente, como organizar talleres y crear guías sobre el uso de UCSF ChimeraX y PhET para mejorar la enseñanza de la geometría molecular.
2. Estrategias didácticas, es decir, diseñar actividades interactivas que integren estas herramientas en el currículo de química y de otras carreras que la requieran.
3. Desarrollar la intervención durante un período de seis semanas, con dos sesiones semanales de 90 minutos cada una. Con sesiones estructuradas en dos fases principales: en la primera fase, los estudiantes manipulan el simulador PhET para explorar conceptos básicos de geometría molecular, como las disposiciones de átomos y los tipos de enlaces. Durante estas sesiones, se les proporcione guías de trabajo que incluyan actividades prácticas y ejercicios de evaluación formativa. En la segunda fase, se introduce UCSF ChimeraX para el análisis de moléculas más complejas, como biomoléculas y estructuras tridimensionales con implicaciones químicas avanzadas.
4. Realizar actividades guiadas para manipular y visualizar las moléculas, con relación a

los contenidos teóricos con aplicaciones prácticas, como la predicción de interacciones moleculares. Cada sesión concluir con un breve espacio de reflexión grupal para consolidar los aprendizajes y vincular los conceptos explorados con las herramientas tecnológicas utilizadas.

5. Aprendizaje colaborativo, fomentar proyectos en grupo y foros de discusión sobre la experiencia adquirida después del uso de las herramientas, para promover la interacción entre estudiantes.

6. Evaluación de impacto, realizar encuestas y análisis de rendimiento académico para medir la efectividad de las herramientas.

7. Difusión de herramientas, organizar charlas informativas y publicar casos de éxito para aumentar la visibilidad y uso de ChimeraX y PhET.

En cuanto a la estructura e importancia de la solución brindada, la investigación ha mostrado que la implementación de herramientas como PhET y UCSF ChimeraX es crucial para abordar los desafíos que presenta la enseñanza de la química. La visualización tridimensional permite a los estudiantes interactuar con las estructuras moleculares de manera tangible, facilitando una comprensión más profunda que los métodos tradicionales. Esto no solo fortalece su aprendizaje en química, sino que también los prepara para enfrentar problemas complejos en disciplinas interdisciplinarias, como la biología y la medicina.

CONCLUSIONES

Los referentes teóricos consultados destacan la importancia del pensamiento tridimensional en la enseñanza de la química, señalando que herramientas digitales como UCSF ChimeraX y PhET son fundamentales para facilitar la comprensión de conceptos abstractos. Estas herramientas permiten a los estudiantes visualizar y manipular estructuras moleculares, promoviendo un aprendizaje más significativo y dinámico. La literatura existente respalda la idea de que la integración de tecnología en el aula puede mejorar no solo la comprensión conceptual, sino también la motivación y el interés de los estudiantes en la química.

El diagnóstico realizado con 51 estudiantes de la carrera de Pedagogía de las Ciencias Experimentales reveló que un 57% de los encuestados percibe una mejora en su comprensión de la geometría molecular gracias al uso de las herramientas digitales. Los resultados indican que estas tecnologías no solo mejoran la visualización de estructuras tridimensionales, sino que también incrementan la competencia de los estudiantes en la

búsqueda de información científica y en la comprensión de conceptos clave como la estereoquímica e isomería.

La consulta a especialistas y el análisis de los datos a través de pruebas no paramétricas confirmaron la efectividad de las herramientas digitales en el aprendizaje de la geometría molecular. Los especialistas coincidieron en que la implementación de UCSF ChimeraX y PhET puede transformar la enseñanza de la química, haciendo el aprendizaje más accesible y relevante. Además, los resultados de la encuesta mostraron que la mayoría de los estudiantes se siente más competente y motivado al utilizar estas tecnologías, lo que refuerza la necesidad de su integración en el currículo educativo.

La solución propuesta, que incluye la capacitación docente y la implementación de estrategias didácticas interactivas, es esencial para superar las limitaciones de la enseñanza tradicional en química. La estructura de la intervención, dividida en fases que combinan el uso de PhET y ChimeraX, permite a los estudiantes desarrollar habilidades prácticas y teóricas en un entorno colaborativo. Esta metodología no solo fortalece el aprendizaje en química, sino que también prepara a los estudiantes para enfrentar desafíos en áreas interdisciplinarias como la biología y la medicina.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Barraqué, F., Sampaolesi, S., Briand, L. E., & Vetere, V. (2021). La enseñanza de la química durante el primer año de la universidad: el estudiante como protagonista de un aprendizaje significativo. *Educación química*, 32(1), 58-73. <https://doi.org/10.22201/fq.18708404e.2021.1.75760>
- Burley, S. K., Berman, H. M., Kleywegt, G. J., Markley, J. L., Nakamura, H., & Velankar, S. (2017). Protein Data Bank (PDB): The Single Global Macromolecular Structure Archive. *Methods in molecular biology (Clifton, N.J.)*, 1607, 627–641. https://doi.org/10.1007/978-1-4939-7000-1_26
- Carrión Paredes, F.A, García Herrera, D.G, Erazo Álvarez, C.A, & Erazo Álvarez, J.C (2020). *Simulador virtual PhET como estrategia metodológica para el aprendizaje de Química. Cienciamatria*, 6 (3), 193-216. <https://www.cienciamatriarevista.org.ve/index.php/cm/article/view/396>
- Fung, F. M., Blanc, E., & Coumoul, X. (2024). Digital futures of learning pharmacology and medicinal and organic chemistry. *ACS Pharmacology & Translational Science*, 7(4), 1191–1194. <https://doi.org/10.1021/acspsci.4c00043>

- Goddard, T. D., Huang, C. C., Meng, E. C., Pettersen, E. F., Couch, G. S., Morris, J. H., & Ferrin, T. E. (2018). UCSF ChimeraX: Meeting modern challenges in visualization and analysis. *Protein science: a publication of the Protein Society*, 27(1), 14–25. <https://doi.org/10.1002/pro.3235>
- Haryanto, Asrial, Sanova, A., Widowati, A., Saputra, A. (2024). Generic science skills: phet applications based on discovery learning. *Revista Jurnal Ilmiah Ilmu Terapan Universitas Jambi*, 8(1), 158-169. <https://doi.org/10.22437/jiituj.v8i1.32441>
- Karimi, A., Sari, W. P., & Yassin, A. (2024). Fostering Critical Thinking Skills: The Role of Simulations in Science Education. *Buletin Edukasi Indonesia*, 3(03), 87-92. <https://journal.iistr.org/index.php/BEI/article/view/601>
- Listenberger, L. L., Joiner, C. M., Terrell, C. R. (2022). Uso de herramientas de visualizacion para explorar la estructura y function de la proteina Spike del SARS-CoV-2. *Course Source*. <https://doi.org/10.24918/cs.2022.5>
- Meng, E. C., Goddard, T. D., Pettersen, E. F., Sofá, G. S., Pearson, Z. J., Morris, J. H., & Ferrin, T. E. (2023). UCSF ChimeraX: Tools for structure building and analysis. *Protein Science: A Publication of the Protein Society*, 32(11), 1-13. <https://doi.org/10.1002/pro.4792>
- Menor Salván, C. A. (2023). Llevando la visualización y edición de estructuras moleculares de la investigación al aula con ChimeraX. *Sociedad española de Bioquímica y Biología Molecular*, 215 <https://sebbm.es/revista/educacion-universitaria/llevando-la-visualizacion-y-edicion-de-estructuras-moleculares-de-la-investigacion-al-aula-con-chimerax/>
- Pettersen, E. F., Goddard, T. D., Huang, C. C., Meng, E. C., Couch, G. S., Croll, T. I., Morris, J. H., & Ferrin, T. E. (2020). UCSF ChimeraX: Structure visualization for researchers, educators, and developers. *Protein Science: A Publication of the Protein Society*, 30(1), 70–82. <https://doi.org/10.1002/pro.3943>
- Pimpasri, C., & Limpanuparb, T. (2024). From plastic models to virtual reality headsets: Enhancing molecular structure education for undergraduate students. *Chimia*, 78(6), 439–442. <https://doi.org/10.2533/chimia.2024.439>
- Rakhmetova, A., Meirova, G., Balpanova, D., Baidullayeva, A., & Nurmakhanova, D. (2024). El uso de elementos de la neuropedagogía en la creación de simuladores virtuales para el estudio en profundidad de la química en la educación superior. *Revista de Educación Tecnológica y Científica*, 14(2), 473-483.

<https://doi.org/10.3926/jotse.2532>

Suárez Millán, M. D. C., & Betancourt Arango, J. P. (2023). La química computacional como mediación pedagógica para el aprendizaje de conceptos fundamentales de química general. *Educación química*, 34(1), 70–85.

<https://doi.org/10.22201/fq.18708404e.2023.1.77684>

Trisviati, ED y Lutfi, A. (2022). Desarrollo de herramientas de aprendizaje mediante investigación guiada asistidas por simulación PhET para mejorar la motivación de aprendizaje de los estudiantes en el submaterial de formas moleculares. *Prisma Sains: Jurnal Pengkajian Ilmu y Pembelajaran Matematika y IPA IKIP Mataram*, 10 (3), 522-534. <https://e-journal.undikma.ac.id/index.php/prismasains/article/view/5298>

Wekerle, C., Daumiller, M., Janke, S., Dickhäuser, O., Dresel, M., & Kollar, I. (2024). Putting ICAP to the test: how technology-enhanced learning activities are related to cognitive and affective-motivational learning outcomes in higher education. *Scientific Reports*, (14), 16295-16303. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-66069-y>

Conflictos de intereses:

Los autores declaran que no existen conflictos de intereses.

Declaración de autoría:

María Vanessa Zambrano Loo: investigación e idea inicial, recolección, interpretación y análisis de los datos, traducción, redacción del manuscrito y aprobación en su versión final, elaboración de las conclusiones, adecuación a las normas de la revista y envío.

Yulexy Navarrete Pita: interpretación y análisis de los datos, redacción del manuscrito y aprobación en su versión final, cálculos y análisis de la validación, revisión de las referencias bibliográficas.

Fernando Daniel Suvire Pedroza: interpretación y análisis de los datos, redacción del manuscrito y aprobación en su versión final, cálculos y análisis de la validación, revisión de las referencias bibliográficas.