

## **Empleo del visualizador gráfico Jmol en las clases de simetría molecular**

Macarena Poyatos y Beatriz Julián

Departamento de Química Inorgánica y Orgánica, Universitat Jaume I, Castellón, España. Emails: [poyatosd@uji.es](mailto:poyatosd@uji.es), [julian@uji.es](mailto:julian@uji.es).

**Resumen:** El presente trabajo divulga la innovación educativa que se ha desarrollado en la asignatura Química Inorgánica III (QU0924) del tercer curso del Grado en Química en el curso académico 2013/2014, de la Universitat Jaume I (Castellón, España). El objetivo fundamental de nuestro proyecto era dotar a los estudiantes de material didáctico interactivo y diferente, para un mejor aprendizaje de conceptos fundamentales de simetría molecular. En particular, los estudiantes fueron introducidos en el manejo de la interfaz gráfica Jmol, con la que se pueden construir y visualizar modelos tridimensionales.

**Palabras clave:** Simetría molecular, elementos de simetría, operaciones de simetría, tabla de caracteres, Jmol, interfaz gráfica.

**Title:** Using Jmol as graphic interface for Molecular Symmetry practical classes.

**Abstract:** This article reports the educational innovation that has been implemented in the subject Inorganic Chemistry III (QU0924) of the third year of the Chemistry Degree, during the academic year 2013/2014 at the Universitat Jaume I (Castellón, Spain). The main goal of our project was to provide the students with interactive and new didactic material, for a better understanding of the fundamental concepts of molecular symmetry. In particular, the students were introduced to the use of the Jmol graphic interface, very useful for constructing and visualize three-dimensional models.

**Keywords:** Molecular Symmetry, symmetry elements, symmetry operations, character table, Jmol, graphic interface.

### **1. Introducción**

La innovación educativa que presentamos se enmarca en la asignatura Química Inorgánica III (QU0924), correspondiente al tercer curso del Grado en Química, e impartida en el primer semestre del curso académico 2013/2014 en la Universitat Jaume I de Castellón (España).

Para el correcto desarrollo de esta asignatura, es fundamental la introducción de algunos conceptos de Teoría de Grupos. Así pues, en el primer tema de la asignatura se introducen los conceptos de elemento y operación de simetría así como la clasificación de las moléculas en los diferentes grupos puntuales y las relaciones entre las propiedades moleculares y simetría.

Nuestra experiencia en la didáctica de este primer tema nos indica que, para los estudiantes que se enfrentan por primera vez a la asignatura, resulta muy

frustrante la no detección de los elementos de simetría que posee una molécula o figura. La habilidad para encontrar estos elementos de simetría se adquiere únicamente practicando, como indican los Prof. Harris y Bertolucci en su libro "Symmetry and Spectroscopy", texto de cabecera para aquéllos interesados en la espectroscopia vibracional y electrónica: "The success of this procedure depends on your ability to find symmetry elements present in a molecule, a skill which can only be developed by continued practice" (Harris y Bertolucci, 1978).

Conceptos como eje de simetría, plano de reflexión o centro de inversión son difíciles de explicar sin el empleo de modelos tridimensionales. Existen modelos tridimensionales tremendamente útiles como, por ejemplo, los modelos moleculares Cochranes que pueden ser adquiridos a través de distribuidores como Aldrich. Aunque estos modelos "físicos" existen, la frecuencia con que los encontramos en las aulas es escasa; además, son caros y limitados (a veces es difícil disponer de piezas para completar todas las moléculas que uno necesita construir). Estos tres problemas se solventan si el modelo se construye empleando un ordenador. De esta manera, podemos utilizarlo tanto personalmente como en una clase frente a un público amplio y, además, el material se puede ofrecer a los alumnos para que lo revisen y examinen a su gusto.

En este contexto, nos propusimos el empleo del visor gráfico Jmol en la impartición de aquellos temas de la asignatura relacionados con la Simetría Molecular. Jmol permite construir modelos tridimensionales con los que se puede interaccionar. Además, es un programa gratuito, de código abierto, que puede leer una gran variedad de formatos de archivo y es compatible con materiales preparados para otros programas de amplia implantación (Herráez, 2007).

## **2. Objetivos y metodología**

### *2.1. Descripción de los objetivos*

El objetivo principal de este proyecto de innovación educativa es la mejora en la comprensión de los conceptos de Simetría Molecular que se incluyen en asignaturas de Química Inorgánica del Grado en Química. En particular, este proyecto está diseñado para ser implementado en la asignatura QU0924 (Química Inorgánica III) del grado en Química de la Universitat Jaume I.

La asignatura Química Inorgánica III aborda un total de seis bloques temáticos:

1. Simetría Molecular
2. Isomería en los compuestos de coordinación
3. Enlace en los compuestos de coordinación
4. Estabilidad de los compuestos de coordinación
5. Espectroscopia electrónica y vibracional
6. Catálisis Homogénea

Los bloques temáticos 3 a 6 serán tratados en las clases teóricas empleando una metodología de clase expositiva. Por otro lado, los conceptos de Simetría Molecular e Isomería (temas 1 y 2) serán impartidos en las sesiones denominadas *tutorías obligatorias*, a las que asiste la cuarta parte de los alumnos matriculados en la asignatura en cuestión. El número reducido de

alumnos en cada uno de estos grupos de tutorías obligatorias, permitirá implementar cambios en la metodología y en la evaluación. De manera más específica, con este proyecto de innovación educativa nos propusimos alcanzar los siguientes objetivos:

1. Emplear *nuevas herramientas* para la introducción de los conceptos de simetría (elementos y operaciones de simetría). Con este objetivo, propusimos el empleo del programa informático Jmol, un visor interactivo de modelos moleculares tridimensionales.

2. Fomentar el *autoaprendizaje* entre el alumnado. El programa Jmol es gratuito y puede ser fácilmente instalado en un ordenador personal, tableta o *smartphone*, el único requisito es que el dispositivo tenga instalado Java. De esta manera, el alumno tendrá fácil acceso a la herramienta y podrá, si se lo propone, desarrollar su habilidad para “ver” los elementos de simetría de moléculas o figuras.

3. Fomentar el *aprendizaje en inglés*. Se proporcionará a los alumnos páginas web escritas en inglés, en las que se explican aspectos teóricos vistos en clase y apoyados en ejemplos contruidos con Jmol.

De particular interés es la página web desarrollada por la Universidad de Otterbein (Ohio, USA, <http://symmetry.otterbein.edu/index.html>) que proporciona una larga lista de moléculas y que permite visualizar sus elementos y operaciones de simetría. Asimismo, este espectacular recurso contiene un apartado denominado “Challenge” en el que los alumnos pueden desarrollar su habilidad para determinar el grupo puntual de diferentes moléculas para lo que tendrán que seguir una serie de instrucciones en inglés. De esta manera, también se fomentará la *autoevaluación* del alumnado.

4. Promover la *evaluación continua del profesor*. Al final de cada clase, se hará llegar al alumnado un cuestionario breve que tendrá que ser contestado por parejas. Con este cuestionario, se pretende evaluar el nivel de comprensión de los alumnos.

## *2.2. Desarrollo del proyecto y metodología*

De acuerdo con la guía docente de la asignatura, cada uno de los cuatro subgrupos tiene asignadas 5 horas de tutorías obligatorias en total durante el primer trimestre. Cada grupo tendrá cuatro clases de tutorías obligatorias de 1.5 horas cada una, lo que hace un total de 6 horas por grupo (1 hora más de lo establecido). Esta diferencia de horas fue previamente consensuada con el profesor responsable de la asignatura.

*1ª sesión tutorías: Tema 1, simetría y teoría de grupos.* En la primera sesión de tutorías, se introducirán los conceptos de operaciones, elementos y grupos puntuales de simetría. En esta primera sesión, se proporcionará a los estudiantes las instrucciones para la instalación de Jmol en sus ordenadores, tabletas o *smartphones* y se les introducirá en su manejo, haciendo especial hincapié en aquellas órdenes que permiten la visualización de los elementos de simetría. Este visor es sencillo de instalar y de manejar, así que los estudiantes pueden instalarlo *in situ* en sus dispositivos y emplearlo durante la clase.

Es en esta primera sesión de tutorías cuando se introducen los distintos elementos de simetría. Como se ha comentado, estos conceptos requieren de una cierta percepción tridimensional y son difíciles de detectar a partir de una

representación plana. Jmol constituye una herramienta muy valiosa para apoyar las explicaciones de estos términos. Asimismo, nos apoyaremos también en el material didáctico desarrollado por la Universidad de Otterbein a través de su página web (<http://symmetry.otterbein.edu/index.html>). Toda esta información se compartirá con los alumnos a través del Aula Virtual de la Universitat Jaume I. La figura 1 incluye el manual que se hizo llegar a los estudiantes para la descarga y empleo de Jmol.

Al final de esta primera sesión de tutorías, se repartirá un cuestionario a los estudiantes. Este cuestionario incluirá una lista de moléculas cuyos elementos de simetría tendrán que ser detectados por los estudiantes, y tendrá que ser entregado al profesor encargado de las tutorías obligatorias para su evaluación.

*2ª sesión tutorías: Tema 1, simetría y teoría de grupos.* En esta segunda sesión se dedicará la mitad del tiempo a la resolución del cuestionario de la primera sesión. La resolución del cuestionario será llevado a cabo por los estudiantes, siempre bajo la supervisión del profesor responsable. El profesor responsable contará con modelos tridimensionales "físicos" además de con la inestimable ayuda del visor Jmol. Asimismo, se dedicará tanto tiempo como sea necesario para la correcta comprensión del tema 1, de especial relevancia para esta asignatura.

En la segunda parte de esta sesión se explicará el concepto de grupo puntual, su nomenclatura y cómo determinar a qué grupo puntual pertenecen diferentes moléculas y figuras. Estos aspectos, fundamentales para la correcta comprensión de los temas siguientes de la asignatura, no se pueden abordar si los estudiantes no son capaces de detectar los elementos y operaciones de simetría. Por este motivo, es de especial importancia contar con modelos interactivos en el aula.

*3ª sesión tutorías: Tema 2, tipos de isomería.* Se introducirán, de manera muy breve y poniendo a disposición de los alumnos apuntes al respecto, los tipos de isomería que pueden darse en los compuestos de coordinación. Al igual que en las sesiones anteriores, la interpretación de algunas de las isomerías requiere del empleo de modelos moleculares así pues el profesor hará uso de recursos interactivos como el visor gráfico Jmol o el material didáctico desarrollado por la Universidad de Otterbein.

*4ª sesión de tutorías: Miscelánea.* Esta cuarta sesión será dedicada a la revisión de los conceptos de simetría introducidos a lo largo del curso. Asimismo y a modo de resumen, se abordarán problemas en los que se intentarán explicar propiedades moleculares como, por ejemplo, la construcción de orbitales híbridos empleando la Teoría de Grupos.

### **3. Resultados y discusión**

El presente trabajo ha permitido introducir una mejora docente en las tutorías obligatorias de la asignatura Química Inorgánica III y, por consiguiente, en el conjunto de la asignatura. En primer lugar, los conceptos fundamentales de Simetría Molecular pasaron de impartirse en las clases teóricas a impartirse en las tutorías obligatorias, en las que el número de alumnos es bastante inferior. Como hemos comentado, estos conceptos requieren de cierta habilidad por parte del alumnado pero su correcta introducción con el apoyo de modelos, resulta fundamental. Así pues, se dedicaron dos sesiones de tutorías (6 horas) al tema de simetría. En segundo lugar, los modelos tridimensionales físicos han dado paso a los modelos

interactivos en el ordenador, empleando el visor Jmol. Este programa nos ha permitido interactuar con los modelos en el aula, a la vista de todos los estudiantes. Asimismo, los estudiantes han mostrado mucho interés por los recursos empleados en clase y los han empleado en sus casas, fomentando así su autoaprendizaje.

#### Instrucciones para la descarga y el empleo de Jmol

• **Introducción:** Jmol es un programa libre y de código abierto, por lo que cualquiera puede conseguirlo y usarlo, acceder a su código fuente, modificarlo o desarrollar otros programas que lo utilicen.

• **Instalación de Jmol:** Jmol está escrito empleando el lenguaje Java, por lo que requiere que el ordenador tenga instalado Java. Esto aporta la gran ventaja de que puede funcionar en cualquier sistema operativo que admita Java (Windows, MacOS, Linux, entre otros). La forma más sencilla de instalar o actualizar Java es visitar la página <http://www.java.com/> y seguir las instrucciones.

Para obtener más información y descargar Jmol, visita su página web, <http://www.jmol.org/>. Hay también información más específica en la página Wiki de la comunidad de usuarios, <http://www.wiki.jmol.org/>.

El programa completo se obtiene en forma de un paquete comprimido (a elegir entre formato tar.gz y formato zip), habitualmente desde la web [www.jmol.org](http://www.jmol.org). Debes descomprimirlo en tu disco duro, con lo que aparecerán una serie de archivos. El más importante de estos archivos (y el único que te hace falta) es **Jmol.jar** que incluye el programa autónomo o aplicación Jmol. Normalmente, para ejecutarlo bastará con hacer doble clic sobre él, pues el sistema operativo ya tendrá asociados los archivos **jar** a la versión instalada del entorno de ejecución de Java. Si empleas el sistema operativo Windows, te será más cómodo crear un acceso directo al programa Jmol. Localiza la carpeta donde descomprimiste el paquete Jmol; en ella encuentra el archivo Jmol.jar, crea un acceso directo a éste y colócalo donde te guste (escritorio, menú de programas, etc.).

• **Obtención de modelos moleculares:** Los modelos moleculares virtuales en el ordenador son representaciones tridimensionales construidas por Jmol a partir de archivos de coordenadas moleculares, que contienen la identificación de todos los átomos de la molécula y sus coordenadas en el espacio.

Para moléculas pequeñas, el formato **mol** es el empleado con más frecuencia. Para obtener los archivos de coordenadas y obtener un modelo molecular, ve a File>Get MOL e introduce el nombre o la fórmula de la molécula en la que estás interesado. Has de tener en cuenta que, a pesar de que las librerías empleadas por Jmol son muy amplias, no encontrarás todas y cada una de las moléculas en las que estás interesado. En este caso, busca una molécula parecida cuya simetría sospeches que es igual a la que buscas.

• **Determinación de la simetría de la molécula:** Una vez visualizado el archivo **mol** (por ejemplo, File>GetMOL>PCl<sub>3</sub>), abre la consola File>Console, te aparecerá una ventana llamada Consola de guiones de Jmol. En esta ventana puedes escribir una serie de órdenes para determinar la simetría de la molécula en cuestión. Las más interesantes se detallan a continuación:

**\$ calculate pointGroup:** el programa indicará el grupo puntual al que pertenece la molécula en cuestión.

**\$ draw pointGroup:** podrás visualizar todos los elementos de simetría que contiene la molécula.

También puedes visualizar únicamente los ejes de rotación propia e impropia (C<sub>n</sub>, C<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>, C<sub>4</sub>, C<sub>5</sub>, C<sub>6</sub>, C<sub>8</sub>, S<sub>n</sub>, S<sub>3</sub>, S<sub>4</sub>, S<sub>5</sub>, S<sub>6</sub>, S<sub>8</sub>, S<sub>10</sub>, S<sub>12</sub>, C<sub>s</sub>, C<sub>i</sub>) empleando la misma orden seguida de un índice (por ejemplo, draw pointGroup C3 2, te mostrará únicamente el segundo eje de rotación propia C3).

Si estás interesado en profundizar en el empleo de este visualizador, puedes consultar **la lista completa de comandos** de Jmol en la página <http://chemapps.stolaf.edu/jmol/docs/>.

• **Referencias en la web:** Puedes encontrar numerosas páginas web que hablan de simetría y grupos puntuales, y que acompañan sus explicaciones con modelos moleculares construidos con Jmol. Una de las más completas y fáciles de manejar es la desarrollada por la Universidad de Otterbein en Ohio (USA), <http://symmetry.otterbein.edu/gallery/index.html>. Este recurso está dividido en tres partes e incluye unas breves instrucciones para su manejo (en el apartado **Info**):

**Symmetry Tutorial:** este apartado explica los distintos elementos y operaciones de simetría, apoyándose en ejemplos interactivos y animados.

**The Symmetry Gallery:** Este apartado incluye cerca de 70 moléculas con demostración interactiva de todos sus elementos de simetría así como la animación de todas las operaciones de simetría. Las moléculas están ordenadas por grupo puntual, así que puedes elegir los ejemplos que te interesen para visualizar elementos de simetría concretos.

**The Symmetry Challenge:** Empleando las mismas moléculas incluidas en "The Symmetry Gallery", este apartado te permitirá desafiarte a ti mismo en la determinación del grupo puntual al que pertenece cada molécula. Además, este recurso incluye una lista de páginas web de interés en el apartado Info>References and Links.

Figura 1. Instrucciones para la descarga y empleo de Jmol

Es importante destacar que el profesor responsable de la asignatura ha valorado muy positivamente este proyecto de innovación educativa. De hecho, esta parte de la asignatura será impartida el próximo curso académico empleando los mismos recursos y la misma metodología. Por tanto, podemos concluir que este proyecto de mejora e innovación educativa ha cumplido con los objetivos establecidos y, en general, se han obtenido resultados muy satisfactorios.

#### **4. Referencias bibliográficas**

Harris, D. C. y Bertolucci, M. D. (1978). *Symmetry and Spectroscopy. An introduction to vibrational and electronic spectroscopy*. New York: Dover publications, INC.

Herráez, A. (2007). *Cómo utilizar Jmol para estudiar y presentar estructuras moleculares. Volumen 1: aprendiendo a usar Jmol (niveles básico e intermedio)*. Morrisville, NC, USA: Lulu Enterprises.

Jmol: un visor Java de código abierto para estructuras químicas en tres dimensiones. <http://www.jmol.org/>.