

Cita APA 7ma edición: Mojica Sánchez, J. P., Hernández López, F. M., Cárdenas Magaña, J. A., & Ruíz Ibarra, G. (2025). Enseñanza de la química en la era digital: Simulación molecular, big data e inteligencia artificial. En J. A. Enríquez Hernández, J. B. Hernández Hernández, & L. E. Ponce Martínez (Coords.), *IA y educación superior: Alianza o amenaza* (pp. 22-45). Editorial Sinergy.

Capítulo 1

Enseñanza de la Química en la Era Digital: Simulación Molecular, Big Data e Inteligencia Artificial

Teaching Chemistry in the Digital Age: Molecular Simulation, Big Data, and Artificial Intelligence

Juan Pablo Mojica Sánchez

Tecnológico Nacional de México / Instituto Tecnológico José Mario Molina Pasquel
y Henríquez Unidad Académica Tamazula



0000-0003-2561-9689 | juan.mojica@tamazula.tecmm.edu.mx

Francisco Miguel Hernández López

Tecnológico Nacional de México / Instituto Tecnológico José Mario Molina Pasquel
y Henríquez Unidad Académica Tamazula



0000-0001-9546-0445 | francisco.hernandez@tamazula.tecmm.edu.mx

Jorge Alberto Cárdenas Magaña

Tecnológico Nacional de México / Instituto Tecnológico José Mario Molina Pasquel
y Henríquez Unidad Académica Tamazula



0000-0001-9114-8550 | jorge.cardenas@tamazula.tecmm.edu.mx

Guadalupe Ruíz Ibarra

Tecnológico Nacional de México / Instituto Tecnológico José Mario Molina Pasquel
y Henríquez Unidad Académica Tamazula



0000-0001-8662-1892 | guadalupe.ruiz@tamazula.tecmm.edu.mx

Resumen

La era digital ha transformado profundamente la enseñanza de la Química. Este capítulo analiza cómo la simulación molecular, el Big Data y la inteligencia artificial están siendo integrados en la educación superior, permitiendo nuevas formas de enseñar, aprender y aplicar conceptos químicos. Se presentan experiencias desarrolladas en instituciones mexicanas donde se utilizaron herramientas computacionales para visualizar moléculas, simular interacciones y modelar procesos químicos y biológicos.

Los resultados muestran que el uso de estas tecnologías fortalece la comprensión de estructuras moleculares, fomenta el aprendizaje activo y favorece la conexión con problemas del mundo real. En cursos de química, los estudiantes lograron interpretar conformaciones moleculares complejas y explorar su estabilidad mediante cálculos computacionales. En química analítica, las simulaciones permitieron experimentar valoraciones ácido-base de forma segura y didáctica. En sistemas biológicos, se modelaron interacciones entre enzimas y compuestos contaminantes, proponiendo soluciones con base científica a problemáticas ambientales y biotecnológicas.

Las percepciones estudiantiles reflejan una alta aceptación de estas herramientas digitales, destacando su utilidad, facilidad de acceso y capacidad para motivar el aprendizaje. A pesar de ciertos retos técnicos, los estudiantes mostraron disposición para continuar usándolas a lo largo de su formación profesional. Este capítulo concluye que, cuando se implementan con acompañamiento docente y una planeación adecuada, las herramientas digitales pueden transformar significativamente la educación química, haciéndola más accesible, interactiva y contextualizada.

Palabras clave: Simulación molecular, Inteligencia artificial, Big Data, Educación química, Modelado computacional

Abstract

The digital era has profoundly transformed chemistry education. This chapter analyzes how molecular simulation, Big Data, and artificial intelligence are being integrated into higher education, enabling new ways to teach, learn, and apply chemical concepts. It presents case studies from Mexican institutions where computational tools were used to visualize molecules, simulate interactions, and model chemical and biological processes.

Findings indicate that these technologies enhance understanding of molecular structures, promote active learning, and strengthen the connection to real-world challenges. In chemistry courses, students interpreted complex molecular conformations and explored their stability using computational methods. In analytical chemistry, simulations allowed safe and structured acid-base titration experiments. In biological systems, students modeled interactions between enzymes and environmental contaminants, proposing scientifically grounded solutions to pressing issues.

Student perceptions reflect a high level of acceptance of digital tools, emphasizing their usefulness, accessibility, and ability to increase motivation. Despite technical challenges, students expressed interest in continuing to use these tools throughout their academic journey. The chapter concludes that, when implemented with appropriate pedagogical guidance, digital technologies can significantly enrich chemistry education, making it more accessible, interactive, and relevant.

Keywords: Molecular simulation, Artificial intelligence, Big Data, Chemistry education, Computational modeling

Introducción

En las últimas décadas, la educación científica ha experimentado un cambio sin precedentes impulsada por los avances tecnológicos, especialmente en el contexto de la era digital. En el caso de la química, disciplina caracterizada por su alto nivel de abstracción, la incorporación de herramientas digitales ha abierto nuevas posibilidades para la enseñanza y el aprendizaje. Tecnologías como la simulación molecular, el análisis de Big Data y la inteligencia artificial están revolucionando la manera en que los conceptos químicos son comprendidos, enseñados y aplicados, tanto en el aula como en el laboratorio (Ali et al., 2023).

Tradicionalmente, la enseñanza de la química se ha apoyado en modelos teóricos, experimentos presenciales y la representación simbólica de estructuras y reacciones. Sin embargo, estas metodologías suelen presentar limitaciones cuando se carece de infraestructura adecuada o de recursos suficientes para realizar prácticas experimentales (Arenas et al., 2023; Chavez-Gómez y Cuaran-Ceballos, 2024) (Tabla 1).

Tabla 1. Limitaciones de los enfoques tradicionales en la enseñanza de la química.

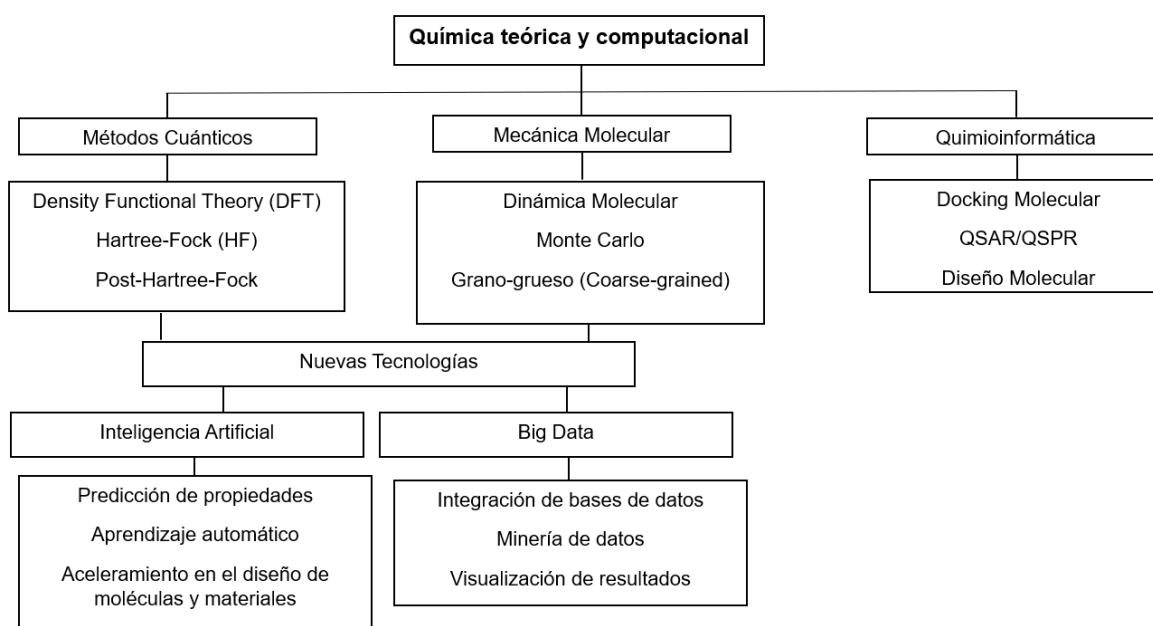
Principales dificultades		
Modelos teóricos	Explicaciones abstractas de conceptos químicos mediante teorías y leyes.	Dificultad para visualizar fenómenos microscópicos; comprensión limitada sin apoyo visual o práctico.
Experimentos presenciales	Prácticas de laboratorio realizadas de forma física por los estudiantes.	Requieren infraestructura, materiales y seguridad; inaccesibles en contextos con pocos recursos.
Representación simbólica	Uso de fórmulas, ecuaciones químicas y estructuras para describir compuestos y reacciones.	Puede ser abstracto y confuso para estudiantes sin experiencia práctica o visualización concreta.
Infraestructura y recursos	Equipos de laboratorio, reactivos, espacios adecuados y personal capacitado.	Su ausencia limita la aplicación práctica y el desarrollo de habilidades experimentales.

Fuente: Elaboración propia

[Capítulo 1] Enseñanza de la Química en la Era Digital: Simulación Molecular, Big Data e Inteligencia Artificial

En este contexto, las herramientas digitales emergen como soluciones efectivas, permitiendo visualizar interacciones a nivel atómico, modelar reacciones complejas y explorar propiedades moleculares sin necesidad de realizar experimentos físicos. En particular, la química teórica y computacional proporciona un marco fundamental para estas aplicaciones, permitiendo el uso de simulaciones moleculares (Figura 1) que acercan a los estudiantes a una comprensión más profunda de la naturaleza de la materia y de los procesos químicos. A través de métodos computacionales, es posible predecir comportamientos moleculares, evaluar la viabilidad de reacciones y analizar interacciones a nivel atómico, integrando conceptos teóricos con representaciones visuales y cuantitativas que fortalecen el aprendizaje. La simulación molecular, por ejemplo, ofrece a los estudiantes una comprensión más profunda de la naturaleza de la materia y de los procesos químicos fundamentales

Figura 1. Divisiones de la Química Computacional y su Integración con IA y Big Data.



Por otro lado, el análisis de grandes volúmenes de datos (Big Data) y el uso de algoritmos de inteligencia artificial están transformando la forma en que se procesan los resultados experimentales, se interpretan patrones y se realizan predicciones sobre el comportamiento químico de diferentes compuestos. Estas tecnologías, cada vez más accesibles, permiten una mayor eficiencia en la investigación y aportan nuevas herramientas pedagógicas que facilitan el aprendizaje adaptativo, el diseño de materiales didácticos personalizados y la evaluación automatizada de competencias. Existen diferentes programas que tienen diferentes implementaciones para la simulación molecular, se incluyen softwares que tienen costo y otros que son gratuitos, además de plataformas que incluyen simulaciones que pueden usarse para la enseñanza de la química (Tabla 2-4).

Tabla 2. *Programas de Química Computacional: Opciones Gratuitas.*

Programa	Enfoque principal	Notas
ORCA1	Métodos cuánticos (DFT, ab initio)	Gratuito para uso académico
Psi42	Métodos cuánticos (HF, MP2, CCSD, DFT)	Código abierto
NWChem3	Métodos cuánticos y mecánica molecular	Enfocado a alto rendimiento
CP2K4	DFT, dinámica molecular, materiales	Muy usado en materiales
GAMESS (US)5	Ab initio, DFT, semiempíricos	Gratuito, requiere registro
xTB6	Métodos semiempíricos (GFNn-xTB)	Ligero y rápido
Avogadro7	Visualización y edición de moléculas	Muy usado, multiplataforma
ASE (Atomic Simulation Environment)8	Automatización de cálculos	En Python, versátil
RDKit9	Quimioinformática, QSAR, manejo de estructuras	Para modelado y IA
PySCF10	Métodos cuánticos, programación en Python	Flexible y moderno
AutoDock11	Acoplamiento molecular (docking)	Muy usado en docking
GROMACS12	Mecánica molecular (biomoléculas)	Excelente rendimiento
LAMMPS13	Dinámica molecular y materiales	Enfocado en materiales

Enlaces disponibles en el presente drive:

https://drive.google.com/file/d/1UrwRqYDCTV_3SmWO4xZeAmyPUNPdWzPI/view?usp=sharing

Tabla 3. *Programas de Química Computacional: Opciones con Licencia Comercial.*

Programa	Enfoque principal	Notas
Gaussian¹⁴	Métodos cuánticos (DFT, MP2, etc.)	Muy utilizado, de pago
GaussView¹⁵	Visualización y generación de input para Gaussian	Interfaz gráfica
Chemcraft¹⁶	Visualización de cálculos cuánticos	Compatible con ORCA, Gaussian, GAMESS, NWChem y otros; versión gratuita limitada
Materials Studio¹⁷	Modelado molecular y de materiales	Muy completo, costoso
Schrödinger Suite¹⁸	Docking, dinámica, diseño de fármacos	Alto nivel, muy costoso

[Capítulo 1] Enseñanza de la Química en la Era Digital: Simulación Molecular, Big Data e Inteligencia Artificial

MOE ¹⁹	Docking, QSAR, diseño de fármacos	Muy usado en la industria
ADF (AMS) ²⁰	Métodos cuánticos, materiales	Interfaces modernas
Spartan ²¹	Cálculos cuánticos y visualización	Intuitivo, enfocado en docencia
COMSOL Multiphysics ²²	Modelado de procesos químicos y físicos	Usado en ingeniería química
VASP ²³	DFT para materiales (cristales, superficies)	Potente, pero costoso
BIOVIA Discovery Studio ²⁴	Docking, dinámica molecular	Orientado a la industria
Molegro Virtual Docker ²⁵	Acoplamiento molecular (docking)	Herramienta comercial para predicción de interacciones proteína-ligando; ya no se desarrollan nuevas licencias.

Enlaces disponibles en el presente drive:

https://drive.google.com/file/d/1nTEEwimTEmYzHILtT_P9iw7DxcFY0D4/view?usp=sharing

Tabla 4. Plataformas Educativas con Simulaciones para la Enseñanza de la Química.

PhET Interactive Simulations ²⁶	Simulaciones interactivas desarrolladas por la Universidad de Colorado Boulder para explorar conceptos científicos.	Química general, física, biología, matemáticas.
ChemCollective ²⁷	Colección de recursos virtuales y simulaciones centradas en la química.	Equilibrio químico, estequiometría, soluciones.
Molecular Workbench ²⁸	Plataforma para crear y explorar simulaciones de química, biología y física.	Interacciones moleculares, dinámica molecular.
Labster ²⁹	Laboratorios virtuales con enfoque en ciencias naturales.	Reacciones químicas, microbiología, genética.
Odyssey ChemLab ³⁰	Simulaciones moleculares interactivas para química general y orgánica.	Química orgánica, soluciones, gases.
Virtual Chemistry Laboratory ³¹	Simulaciones y ejercicios interactivos para química general.	Reacciones químicas, soluciones, gases.

Enlaces disponibles en el presente drive:

https://drive.google.com/file/d/1JrEKayhENr2_MMrsPv7upKTuVTW-CzEY/view?usp=drive_link

Existen estudios como el de García-Ruiz et al. (2011) en donde se evaluó la usabilidad de un visualizador molecular en teléfonos inteligentes como herramienta educativa para estudiantes de química. Utilizando el método Think Aloud y cuestionarios de satisfacción, los autores

demonstraron que el software permite una visualización eficaz y eficiente de modelos moleculares, con un alto nivel de aceptación, ya que el 95% de los estudiantes manifestó interés en su uso futuro. Los resultados sugieren que la integración de esta tecnología puede mejorar significativamente la comprensión de estructuras tridimensionales, complementando las metodologías tradicionales y facilitando el aprendizaje en cualquier lugar y momento, con bajo costo y fácil acceso.

Por otro lado, Martínez-Vázquez y Hernández-Pacheco, 2020 presentaron una propuesta innovadora que utiliza laboratorios virtuales mediante dispositivos móviles como estrategia para fortalecer los procesos de enseñanza-aprendizaje en el ámbito educativo. Los autores destacan que la rápida evolución de los dispositivos móviles ha posibilitado la integración de las TICs en la educación, permitiendo simular experimentos de química en entornos virtuales accesibles desde teléfonos y *tablets*, tanto con Android como con iOS. Estas herramientas educativas facilitan un aprendizaje más motivador, autónomo y flexible, ya que ofrecen recursos adicionales, como bloc de notas y calculadoras científicas, y permiten grabar y revisar los procedimientos realizados. Además, se propuso el desarrollo de tutoriales en video para facilitar el manejo de aplicaciones como BRU Virtual Lab y Chemist by Thix, potenciando así la práctica educativa en contextos donde el acceso a laboratorios presenciales es limitado. Los avances tecnológicos han permitido a los estudiantes explorar las moléculas en espacios tridimensionales, lo que conduce a un mejor entendimiento de la naturaleza.

En una publicación de 2019, Mario Plagiario describió que la era digital ha dado un impulso significativo a la visualización en la enseñanza de la química, permitiendo a los estudiantes entender conceptos complejos a través de imágenes, modelos 3D y animaciones interactivas. La visualización en química no se limita a crear imágenes estéticas, sino que actúa como una herramienta esencial para facilitar la comprensión de mecanismos, estructuras moleculares y procesos químicos.

Por otro lado, tecnologías como la realidad aumentada (AR), realidad virtual (VR) y la inteligencia artificial (IA) están jugando un papel cada vez más importante en la educación química. La AR y la VR se emplean principalmente para crear laboratorios virtuales y facilitar la visualización de moléculas y estructuras químicas complejas, permitiendo a los estudiantes realizar experimentos de forma segura, práctica y repetible. Estas innovaciones tecnológicas aumentan la motivación y el compromiso, además de reducir la ansiedad asociada con la manipulación de instrumentos y sustancias químicas. Por su parte, la IA se enfoca en analizar el comportamiento y las dificultades de los estudiantes, evaluando su comprensión de conceptos avanzados como la interpretación espectroscópica, y ofreciendo retroalimentación personalizada para mejorar el proceso de aprendizaje (Chiu, 2021; Mazzuco et al., 2022; Almasri, 2024; Wang et al., 2024).

Es importante también describir como las herramientas modernas como los modelos de inteligencia artificial, como por ejemplo ChatGTP en sus diferentes versiones, asistentes virtuales educativos (Figura 2) y plataformas interactivas de aprendizaje, han introducido nuevas formas de enseñar y aprender química, proporcionando asistencia para resolver problemas paso a paso, diseñar exámenes, generar retroalimentación inmediata, y fomentar

la investigación científica al facilitar el acceso y análisis de información académica actualizada (Gómez-Zermeño, 2023; Kılınç, 2023; Cheng et al., 2024).

Figura 2. *Uso de un asistente virtual educativo para la enseñanza de la química en una escuela de Hubei, China. Fuente: Tomado de la red social Reddit.*



Este capítulo se centra en explorar el impacto de estas herramientas digitales en la enseñanza de la química en el nivel superior. A través de una revisión de literatura científica reciente y el análisis de estudios de caso en instituciones educativas mexicanas, se examinan experiencias concretas en el uso de simuladores moleculares, plataformas de análisis de datos y aplicaciones de inteligencia artificial en cursos de química, química analítica, sistemas biológicos y bioinformática. Se discuten también los retos asociados a la implementación de estas tecnologías, así como su potencial para enriquecer los planes de estudio y fomentar una educación científica más innovadora, inclusiva y centrada en el estudiante.

Pregunta de investigación

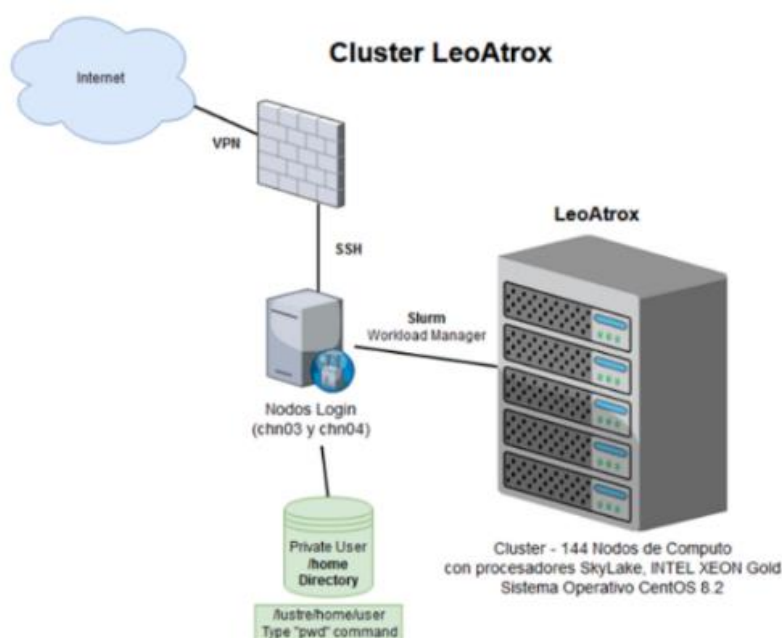
¿Cómo impacta la incorporación de herramientas digitales como la simulación molecular y la inteligencia artificial en la comprensión conceptual y el desarrollo de habilidades prácticas en estudiantes de química en educación superior?

Metodología

En el presente capítulo se abordaron diversas estrategias didácticas apoyadas en herramientas digitales para fortalecer el proceso de enseñanza-aprendizaje en el área de la química. La metodología se fundamentó en el enfoque de Aprendizaje Basado en Problemas (ABP) (Gómez, 2005; Tello et al., 2023; Pazos-Yerovi y Aguilar-Gordón, 2024), promoviendo un aprendizaje activo, contextualizado y centrado en el estudiante. En primer lugar, para la asignatura de Química, impartida en la carrera de Ingeniería en Innovación Agrícola

Sustentable del Instituto Tecnológico José Mario Molina Pasquel y Henríquez, Unidad Académica Tamazula, se capacitó a los estudiantes en el uso de software especializado para la construcción y visualización de moléculas: SPARTAN 08 (Wavefunction, 2008), y ChemCraft 16 (Chemcraft, 2016). Posteriormente, se instruyó en el uso del programa ORCA (Neese, 2022), aplicando el nivel de teoría PBE0/def2-SVP/DFT-D3 (Adamo y Barone, 1999; Weigend y Ahlrichs, 2005; Grimme et al., 2010) para realizar cálculos de estructura electrónica mediante teoría del funcional de la densidad (DFT), aprovechando el servicio de supercómputo LeoAtrox de la Universidad de Guadalajara (Figura 3). Esta formación permitió a los estudiantes modelar un segmento de ADN, un aminoácido y analizar las conformaciones del ciclohexano.

Figura 3. *Funcionamiento del Cluster LeoAtrox de la Universidad de Guadalajara*



En la asignatura de Química Analítica, también en la misma institución, se abordaron los temas de equilibrio químico y volumetría utilizando herramientas interactivas. A través de la plataforma PhET (Perkins et al., 2006), se simuló el comportamiento de soluciones ácido-base, permitiendo observar cómo cambian las propiedades de una disolución según su concentración y naturaleza química. Además, se realizaron prácticas virtuales de valoración ácido-base, utilizando soluciones problema (ácidos clorhídrico, nítrico, fosfórico, sulfúrico, oxálico y acético) y aplicando indicadores digitales como fenolftaleína, tornasol y verde de bromocresol.

En el caso de la materia Sistemas Biológicos, perteneciente a la carrera de Ingeniería en Sistemas Biológicos del Centro Universitario del Sur (CUSur) de la Universidad de Guadalajara, se utilizó el software Molegro Virtual Docker (Bitencourt-Ferreira y De

Azevedo, 2019) para realizar simulaciones de *docking* molecular. Esta herramienta permitió analizar la interacción entre proteínas blanco (enzimas o receptores) y ligandos relevantes, en contextos como la biocatálisis, la producción de bioetanol, el control biológico de plagas y la biorremediación de suelos y aguas. Cada equipo seleccionó una proteína blanca (descargada del *Protein Data Bank*) y un ligando (obtenido de PubChem o incluido en la estructura de la proteína), tomando como base una problemática biotecnológica o ambiental actual.

Durante el proceso, los estudiantes aprendieron a preparar las estructuras moleculares, parametrizar los modelos, definir las cavidades de unión y ejecutar simulaciones. Los resultados se analizaron con base en el MolDock Score, las diferentes poses generadas y las interacciones no covalentes (puentes de hidrógeno, interacciones hidrofóbicas, etc.) responsables de la afinidad molecular. Entre las aplicaciones modeladas destacan: la interacción entre la enzima lacasa y el contaminante bisfenol A; la afinidad de azúcares por el alcohol deshidrogenasa; el uso de metabolitos de *Bacillus thuringiensis* en control de plagas; y la degradación del diclofenaco mediante la peroxidasa de rábano.

Para conocer la percepción de los estudiantes sobre el uso de estas herramientas digitales en la enseñanza de la química, se aplicó un formulario estructurado en formato digital (*Google Forms*), compuesto por preguntas en escala de Likert (Likert, 1932) de cinco puntos, que midieron el nivel de acuerdo con afirmaciones sobre facilidad de uso, utilidad y motivación, así como preguntas abiertas destinadas a explorar con mayor profundidad sus experiencias, opiniones y sugerencias (Figura 4).

Los participantes fueron estudiantes inscritos en las asignaturas de química, química analítica y sistemas biológicos, pertenecientes al Instituto Tecnológico José Mario Molina Pasquel y Henríquez, Unidad Académica Tamazula, y al Centro Universitario del Sur de la Universidad de Guadalajara. Se estableció un tamaño de muestra estimado de al menos 40 estudiantes, seleccionados mediante un muestreo no probabilístico por conveniencia.

Figura 4. *Diseño del formulario de percepción de los alumnos de la enseñanza de la química en la época moderna.*

Formulario: Percepciones sobre la Era Digital en la Enseñanza de la Química

A continuación, encontrarás una serie de afirmaciones relacionadas con el uso de herramientas digitales en la enseñanza de la química. Por favor, indica tu grado de acuerdo con cada afirmación utilizando la siguiente escala:

1. Totalmente en desacuerdo
2. En desacuerdo
3. Neutral
4. De acuerdo
5. Totalmente de acuerdo

Sección I: Escala de Likert

1. Las simulaciones moleculares facilitan la comprensión de conceptos químicos complejos.
2. Las herramientas de Big Data permiten analizar grandes volúmenes de datos químicos de forma más efectiva.
3. La inteligencia artificial puede ser utilizada como una herramienta educativa en química.
4. Considero que las simulaciones moleculares pueden reemplazar parcialmente los experimentos en laboratorio.
5. El uso de aplicaciones de modelado molecular me parece interesante para aprender sobre reacciones químicas.
6. La integración de tecnologías digitales en la enseñanza de química mejora mi comprensión del contenido.
7. Me siento motivado(a) utilizar herramientas digitales para estudiar temas avanzados de química.
8. Las bases de datos digitales me permiten acceder rápidamente a información relevante sobre compuestos químicos.
9. La digitalización de los contenidos académicos facilita el acceso al conocimiento en química.
10. Considero que los docentes deben incorporar más tecnologías digitales en las clases de química.

Sección II: Preguntas Abiertas

11. ¿Qué tipo de herramientas digitales has utilizado en clases de química? (Ejemplo: simuladores moleculares, bases de datos, aplicaciones interactivas)
12. ¿Cómo crees que el uso de simulaciones moleculares ha influido (o podría influir) en tu comprensión de los conceptos químicos?
13. ¿Qué barreras o dificultades has encontrado al utilizar tecnologías digitales en la enseñanza de química?
14. ¿Qué sugerencias darías para mejorar la integración de tecnologías digitales en las clases de química?
15. ¿Consideras que el uso de Big Data e inteligencia artificial podría cambiar la forma en que se enseña química? ¿Cómo?



Resultados

a) Visualización y cálculos computacionales en la materia de química

Los resultados obtenidos en la asignatura de Química, en el marco de la incorporación de tecnologías digitales al proceso educativo, evidencian que el uso de software de modelado molecular y cálculos computacionales favorece significativamente la comprensión de conceptos estructurales. La implementación de herramientas como SPARTAN 08, ChemCraft, Avogadro y ORCA permitió representar visualmente estructuras complejas y realizar simulaciones de energía conformacional mediante teoría del funcional de la densidad (DFT).

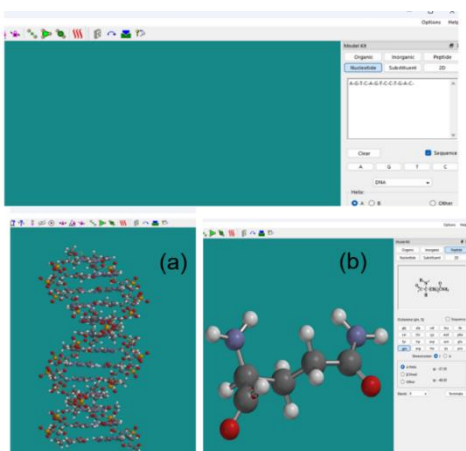
La Figura 5 representa el uso tradicional de modelos físicos en el aula, donde los estudiantes construyen moléculas de forma manual. Si bien estos modelos proporcionan un primer acercamiento al concepto de geometría molecular y permiten una experiencia táctil, su aplicabilidad es limitada: no permiten analizar interacciones electrónicas, ni explorar dinámicamente conformaciones, ni representan adecuadamente sistemas con mayor complejidad estructural.

Figura 5. *Estudiantes utilizando modelos tradicionales y físicos para construcción de moléculas.*



En contraste, en la Figura 6 se presenta la transición hacia herramientas digitales, mediante la visualización computacional de un segmento de ADN y un aminoácido con el programa SPARTAN 08. Estas representaciones tridimensionales permiten ajustar la escala, identificar regiones funcionales y preparar sistemas para análisis computacionales posteriores, lo que refuerza la comprensión teórica y promueve habilidades digitales en química estructural.

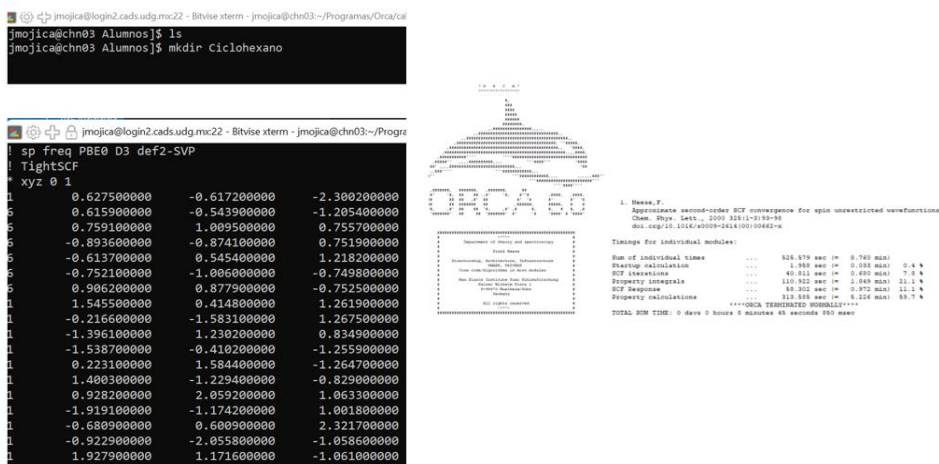
Figura 6. *Visualización de modelos moleculares utilizando el programa SPARTAN 08: (a) segmento de ADN, (b) aminoácido.*



En la Figura 7 documenta el uso de ORCA a través de una terminal de Linux, lo cual introdujo a los estudiantes al entorno de la química computacional. El análisis de las diferentes conformaciones del ciclohexano, utilizando el nivel de teoría PBE0/def2-SVP/DFT-D3,

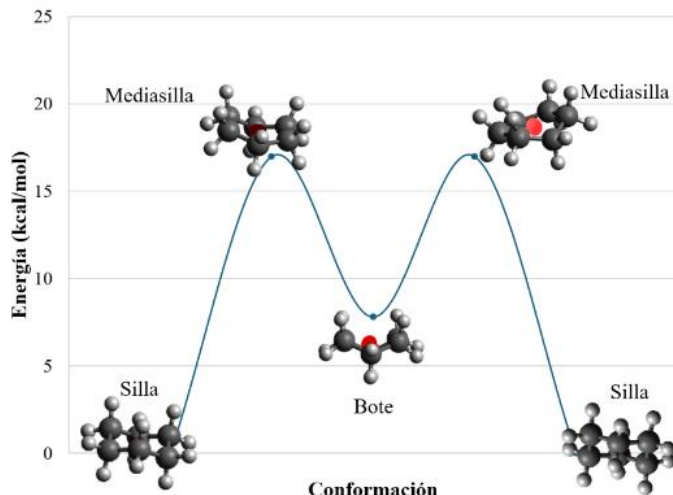
permitió obtener información precisa sobre la energía electrónica de cada estructura, un aspecto inaccesible desde enfoques experimentales tradicionales.

Figura 7. *Uso de ORCA en la terminal de Linux para simular las conformaciones del ciclohexano.*



Finalmente, la Figura 8 presenta el perfil energético resultante, mostrando las diferencias entre las conformaciones silla, bote y media silla del ciclohexano. Este resultado no solo permitió validar la estabilidad relativa esperada desde la teoría, sino que también brindó evidencia cuantitativa sobre la preferencia conformacional, fortaleciendo la interpretación crítica de datos moleculares.

Figura 8. Gráfica del perfil energético del ciclohexano según su conformación: silla, bote, media silla realizado por un equipo de estudiantes, en su clase de química.

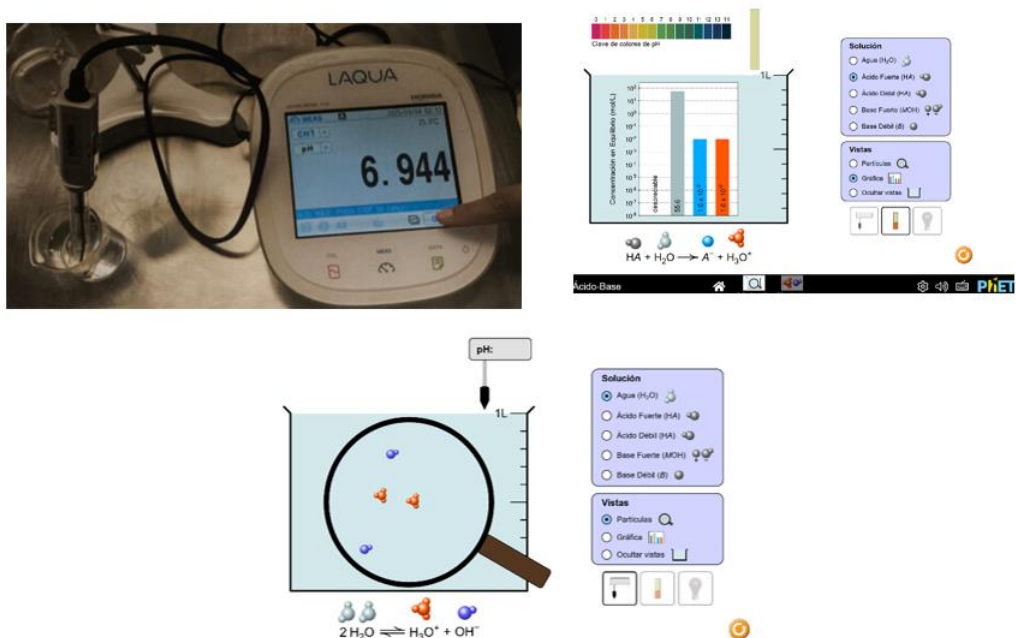


b) Herramientas para el estudio de ácidos y bases y de la titulación ácido-base en química analítica.

En el contexto de la Ingeniería en Innovación Agrícola Sustentable, la comprensión de fenómenos ácido-base y de los procesos de valoración es esencial para el análisis y manejo de soluciones en prácticas agroindustriales, control de calidad de aguas, formulación de fertilizantes y manejo de suelos. El uso de herramientas digitales como simuladores interactivos representa una estrategia pedagógica efectiva para fortalecer estos aprendizajes, especialmente cuando las condiciones limitan el acceso a laboratorios equipados.

Durante las actividades realizadas, los estudiantes combinaron la medición experimental del pH con potenciómetro y el uso de simulaciones moleculares a través de plataformas digitales. Esta experiencia integradora permitió observar la relación entre la concentración iónica de una disolución y su carácter ácido o básico, reforzando conceptos como la disociación, el equilibrio iónico y el papel de los indicadores. Al representar gráficamente la interacción entre moléculas, las simulaciones facilitaron una comprensión más profunda de la acidez y la basicidad desde una perspectiva molecular (Figura 9).

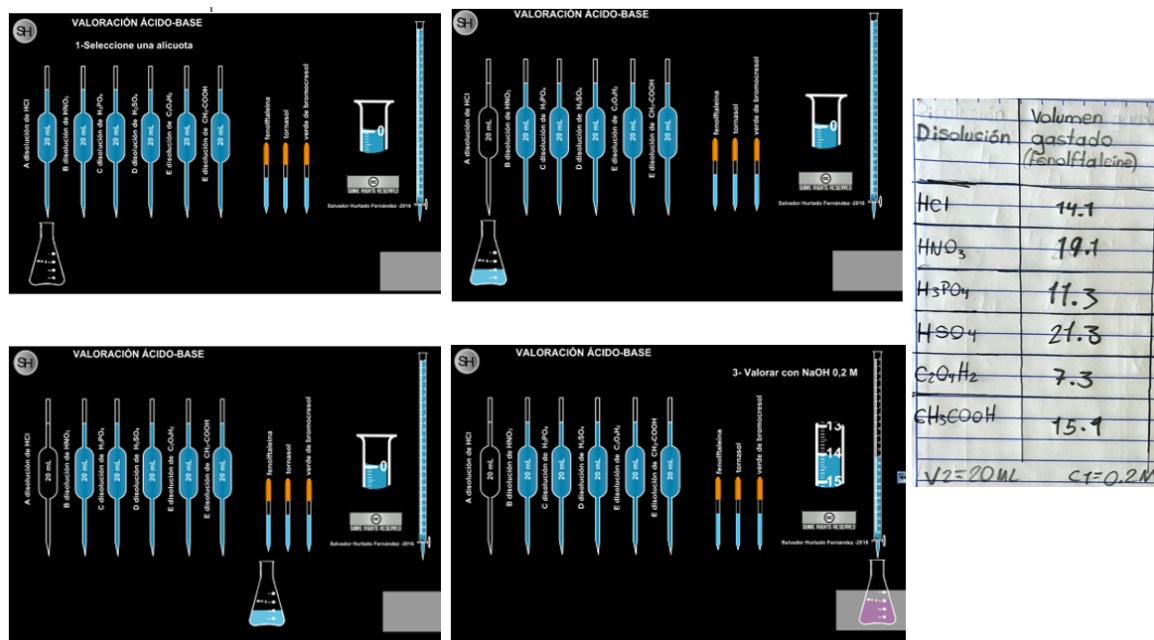
Figura 9. Medición del pH del agua utilizando potenciómetro y uso del simulador PhET para comprensión de la acidez y basicidad a nivel molecular.



Asimismo, la simulación de una valoración ácido-base, utilizando una disolución de ácido clorhídrico de concentración desconocida y una base fuerte (NaOH 0.2 M), permitió a los

estudiantes practicar los fundamentos de la titulación de forma segura y estructurada. El entorno virtual guió el procedimiento paso a paso, incluyendo la elección del indicador, la identificación del punto de equivalencia y el cálculo de la concentración (Figura 10).

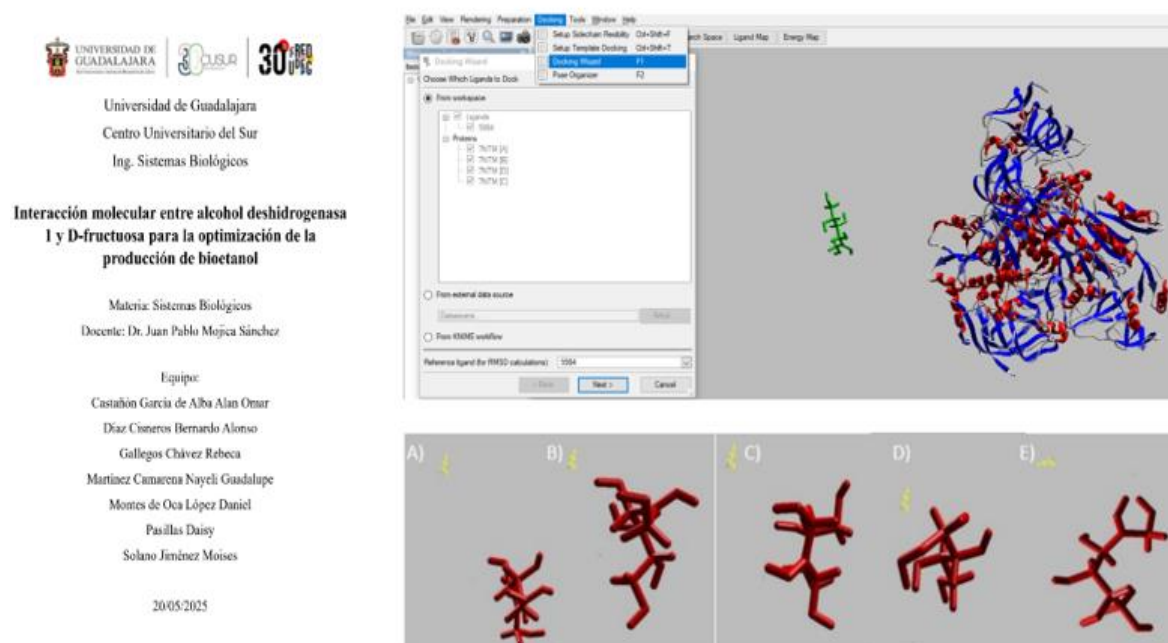
Figura 10. Simulación de una valoración ácido-base de una disolución de ácido clorhídrico (HCl) de concentración desconocida con NaOH 0.2 M y anotaciones de resultados en cuaderno de alumno.



c) Estudio de un sistema utilizando *Docking* molecular con *Molegro* para clase de Sistemas Biológicos

Los estudios de *Docking* molecular realizados por los estudiantes en el contexto del curso de Sistemas Biológicos ejemplifican de manera contundente el potencial pedagógico y científico de las herramientas digitales aplicadas a la enseñanza de la química. Cada equipo abordó un problema ambiental o biotecnológico con relevancia actual, seleccionando proteínas blanco y ligandos con implicaciones prácticas en la biorremediación, la biocatálisis o la producción sostenible de energía (Figura 11).

Figura 11. Proyecto estudiantil de simulación de la afinidad de azúcares por la enzima alcohol deshidrogenasa mediante docking molecular.



En el caso de la enzima glifosato oxidasa (GOX) y su interacción con el herbicida glifosato, se observaron valores energéticos altamente negativos (MolDock Score: -70.629), así como una red robusta de interacciones no covalentes en el sitio activo, lo que sugiere un acoplamiento favorable. Estos hallazgos apoyan su uso potencial en estrategias de remediación agrícola, mostrando cómo el análisis computacional puede guiar el diseño de soluciones ecológicas basadas en enzimas.

Por su parte, el estudio sobre la lacasa fúngica y el contaminante bisfenol A (BPA) evidenció afinidades energéticas incluso más marcadas (E-interacciones hasta -235 kcal/mol), con baja energía estérica y valores estables en las poses seleccionadas. Esto refuerza el rol emergente de las lacasas como biocatalizadores versátiles en ambientes acuáticos contaminados por disruptores endocrinos, y muestra cómo los estudiantes pueden evaluar la viabilidad de enzimas ambientales mediante simulación.

El análisis entre la peroxidasa de rábano (HRP) y el fármaco diclofenaco reveló también interacciones específicas, con formación de enlaces de hidrógeno clave (p. ej., con Arg38 y His170), y energía de interacción de hasta -121.806. A pesar de algunas interacciones estéricas desfavorables, el modelo predice una unión estable, destacando el potencial de esta enzima vegetal en el tratamiento de efluentes farmacéuticos.

En el ámbito energético, el trabajo sobre alcohol deshidrogenasa (ADH1) y D-fructuosa mostró valores de MolDock Score de hasta -116.814, con alta formación de puentes

de hidrógeno y eficiencia del ligando (LE1: -8.49). A pesar de los altos valores de RMSD, indicativos de variabilidad estructural, los datos respaldan la afinidad funcional del sustrato, siendo una base útil para futuras estrategias de ingeniería enzimática orientadas a mejorar la conversión de biomasa en bioetanol.

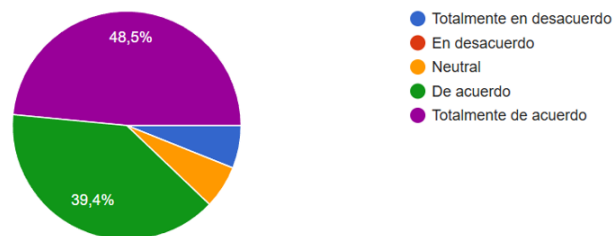
d) Percepción Estudiantil sobre el uso de herramientas digitales en la enseñanza de la Química

En cuanto a las barreras enfrentadas, mencionan dificultades relacionadas con la falta de familiarización tecnológica, problemas de acceso a los recursos digitales y una implementación limitada o poco efectiva dentro del aula. No obstante, también destacan que estas barreras pueden superarse mediante una integración más frecuente, explicaciones claras sobre el uso de las herramientas y una actitud más abierta tanto por parte de docentes como de estudiantes (Figuras 12 y 13)

Figura 12. Nivel de acuerdo de los estudiantes con respecto a la facilidad de uso de las herramientas digitales.

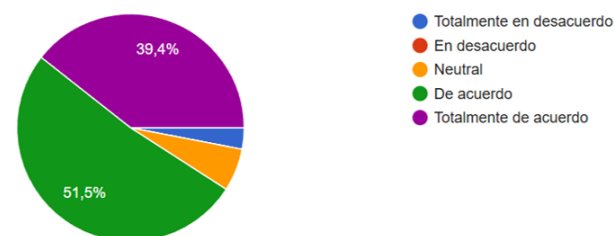
Las simulaciones moleculares facilitan la comprensión de conceptos químicos complejos.

33 respuestas



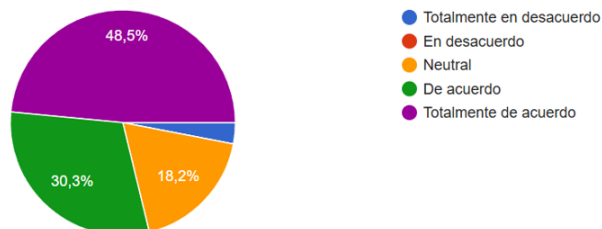
Las herramientas de Big Data permiten analizar grandes volúmenes de datos químicos de forma más efectiva.

33 respuestas



La inteligencia artificial puede ser utilizada como una herramienta educativa en química.

33 respuestas



Considero que las simulaciones moleculares pueden reemplazar parcialmente los experimentos en laboratorio.

33 respuestas

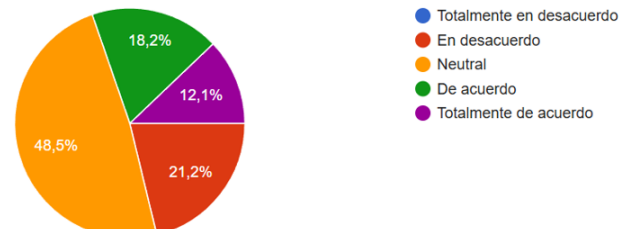
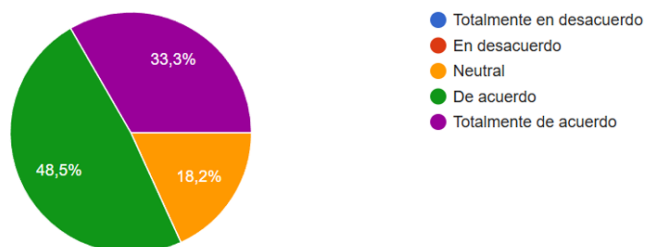


Figura 13. *Percepción estudiantil sobre la utilidad de las herramientas digitales en la enseñanza de la química.*

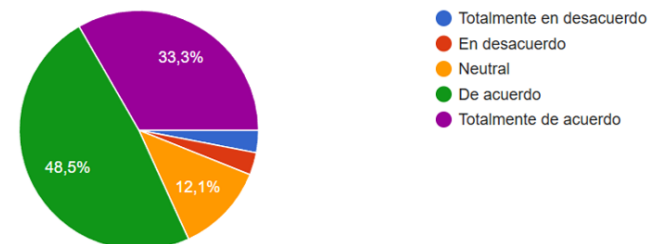
El uso de aplicaciones de modelado molecular me parece interesante para aprender sobre reacciones químicas.

33 respuestas



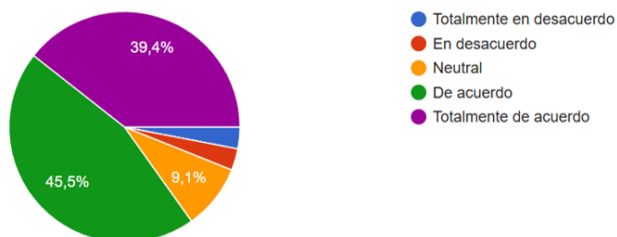
La integración de tecnologías digitales en la enseñanza de química mejora mi comprensión del contenido.

33 respuestas



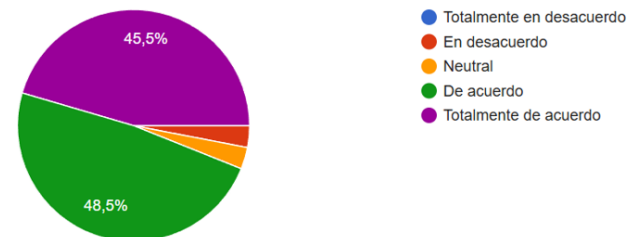
Me siento motivado/a a utilizar herramientas digitales para estudiar temas avanzados de química.

33 respuestas



Las bases de datos digitales me permiten acceder rápidamente a información relevante sobre compuestos químicos.

33 respuestas

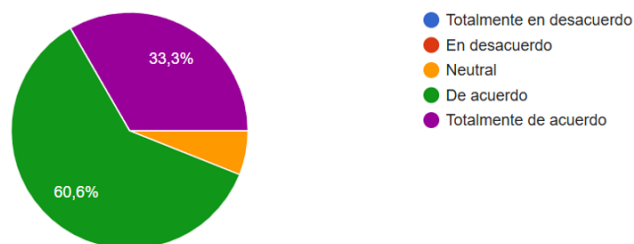


Asimismo, al abordar el papel de tecnologías emergentes como Big Data e inteligencia artificial, los alumnos expresan que estas podrían cambiar de forma significativa la manera en que se enseña la química, permitiendo un aprendizaje más dinámico, interactivo y adaptado a las necesidades individuales. En conjunto, las respuestas reflejan una postura receptiva hacia la transformación digital en la educación, subrayando la importancia de acompañar esta transición con estrategias pedagógicas bien fundamentadas, capacitación continua y condiciones tecnológicas adecuadas (Figura 14). En general, se evidenció una actitud receptiva y propositiva por parte del alumnado hacia la digitalización de la enseñanza de la química. Se destaca, además, su disposición a seguir utilizando estas herramientas a lo largo de su carrera académica, reconociendo en ellas una vía efectiva para adquirir habilidades tecnológicas, comprender mejor la materia y relacionarla con los desafíos de la ciencia aplicada. Este entusiasmo estudiantil representa una oportunidad valiosa para impulsar cambios curriculares que fortalezcan la educación científica desde un enfoque más moderno, interactivo y contextualizado.

Figura 14. Disposición del alumnado para seguir utilizando herramientas digitales en su formación profesional.

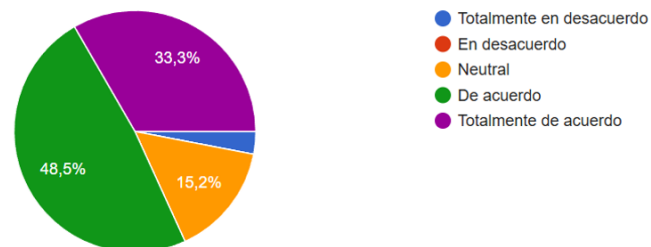
La digitalización de los contenidos académicos facilita el acceso al conocimiento en química.

33 respuestas



Considero que los docentes deben incorporar más tecnologías digitales en las clases de química.

33 respuestas



Discusión

A lo largo del proceso de preparación y visualización de estructuras mediante el uso de la computadora, los estudiantes desarrollaron habilidades en el manejo de software científico, así como en la interpretación de dichos resultados. No obstante, también enfrentaron dificultades técnicas. El uso de programas como ORCA, que requiere conocimiento de comandos en entornos Linux, y la necesidad de interpretar datos como energías absolutas, orbitales moleculares o archivos de salida, representan una curva de aprendizaje considerable. Esto puede generar frustración si no se acompaña con explicaciones claras y estrategias didácticas progresivas.

Asimismo, se identificaron limitaciones logísticas, como la necesidad de equipos de cómputo con capacidad adecuada, acceso a servicios de supercómputo como LeoAtrox, y tiempo suficiente para entrenar a los estudiantes en las herramientas utilizadas. La carga cognitiva adicional que implica esta modalidad requiere una planeación cuidadosa para no interferir con los objetivos curriculares. A pesar de estas complicaciones, la percepción global del estudiantado respecto al uso de simulaciones moleculares fue positiva. La mayoría reconoció una mejora en su comprensión conceptual, un aumento en la motivación por la asignatura y una mayor conexión con aplicaciones reales de la química. Los resultados obtenidos en el inciso a) sugieren que, con un diseño didáctico estructurado, acompañamiento docente constante y recursos de apoyo adecuados, las herramientas digitales pueden integrarse exitosamente como recursos didácticos de alto impacto en la enseñanza de la química molecular.

Con respecto a la experiencia del uso de herramientas computacionales para el análisis químico de suelos o soluciones nutritivas mencionado en el inciso b), esta resultó valiosa tanto para afianzar conocimientos teóricos como para adquirir competencias técnicas relevantes para la ingeniería agrícola.

Desde el punto de vista educativo, los resultados del inciso c) evidencian cómo la integración del modelado molecular en el aula permite a los estudiantes:

- Aplicar conocimientos teóricos de química estructural, enzimología y toxicología.
- Desarrollar habilidades digitales relevantes para la investigación científica contemporánea.
- Generar evidencia cuantitativa y visual para sustentar argumentos técnicos y propuestas de solución a problemas reales.

Este enfoque basado en problemas, sustentado por tecnologías como Molegro Virtual Docker y bases de datos moleculares abiertas (PDB, PubChem), no solo favorece el aprendizaje significativo, sino que también estimula el pensamiento crítico y la formulación de hipótesis.

La percepción estudiantil respecto al uso de herramientas digitales en la enseñanza de la Química, resultados mostrados en el inciso d), fue mayoritariamente positiva. A través

del formulario aplicado, los alumnos manifestaron que el uso de simuladores moleculares, software de modelado y plataformas interactivas les permitió comprender mejor los conceptos complejos de la química, especialmente aquellos relacionados con estructuras tridimensionales, equilibrio químico y mecanismos de interacción molecular. Los estudiantes destacaron que estas herramientas hicieron más dinámicas y significativas las clases, incrementaron su motivación por la asignatura y les ayudaron a relacionar los contenidos teóricos con aplicaciones reales.

Asimismo, muchos señalaron que el aprendizaje fue más autónomo, visual e interactivo, y que se sintieron más comprometidos al poder experimentar de manera virtual con sistemas químicos que no siempre es posible abordar en el laboratorio físico. Entre los beneficios más mencionados estuvieron la facilidad de uso, el acceso a visualizaciones detalladas y la posibilidad de repetir procesos hasta comprenderlos completamente. Sin embargo, también se identificaron áreas de oportunidad, como la necesidad de una capacitación más extensa al inicio del curso y el deseo de contar con más tiempo y recursos tecnológicos para profundizar en las prácticas digitales.

En conjunto, estas opiniones reflejan una disposición favorable hacia la integración de tecnologías emergentes en el aula, así como el reconocimiento de su valor pedagógico para fortalecer el aprendizaje y desarrollar habilidades científicas y digitales pertinentes para su formación profesional.

Conclusiones

La incorporación de herramientas digitales como Avogadro, ORCA, SPARTAN y Molegro Virtual Docker, así como plataformas digitales, permitió a los estudiantes construir modelos moleculares, simular interacciones químicas y biológicas y proponer soluciones fundamentadas a problemáticas reales. Estas actividades promovieron un aprendizaje activo, donde los conceptos no solo se comprendieron en el plano teórico, sino que también se aplicaron de manera práctica y contextualizada, fortaleciendo competencias digitales y científicas.

Los resultados obtenidos evidencian que la integración de tecnologías digitales favorece significativamente la comprensión conceptual, incrementa la motivación y fortalece la autonomía del estudiantado, incluso en contextos educativos con recursos limitados. Si bien se identificaron desafíos de carácter técnico y pedagógico, estos fueron atendidos de manera efectiva mediante el acompañamiento docente, procesos de capacitación gradual y el diseño de actividades didácticas significativas y contextualizadas.

A futuro, se vislumbra un panorama educativo donde la simulación molecular, la inteligencia artificial y el análisis de Big Data serán elementos integrados de manera estructural en los planes de estudio de química. Es necesario continuar desarrollando modelos pedagógicos innovadores, formar a los docentes en competencias digitales, y garantizar el acceso equitativo a las tecnologías. Además, se recomienda explorar nuevas líneas de

investigación en educación química digital, como el uso de realidad aumentada, tutores inteligentes o plataformas adaptativas, que personalicen el aprendizaje según las necesidades del estudiante.

Con una visión de largo plazo, estas herramientas no solo modernizan la enseñanza, sino que también preparan a los futuros profesionistas para enfrentar desafíos científicos y tecnológicos del siglo XXI.

Referencias

- Adamo, C., & Barone, V. (1999). Toward reliable density functional methods without adjustable parameters: The PBE0 model. *The Journal of Chemical Physics*, 110(13), 6158–6170. <https://doi.org/10.1063/1.478522>
- Ali, S. B., Talib, C. A., & Jamal, A. M. (2023). Digital technology approach in chemistry education: A systematic literature review. *Journal of Natural Science and Integration*, 6(1), 1-13.
- Almasri, F. (2024). Exploring the impact of artificial intelligence in teaching and learning of science: A systematic review of empirical research. *Research in Science Education*, 54(5), 977-997.
- Arenas, R. D. M., Cerna, A. N. F., Ramos, M. R. M., Serón, G. I. E., Loli, M. B. L. C., & Leon, G. H. C. (2023). La educación virtual como ciencia: Tendencias en herramientas informáticas.
- Bitencourt-Ferreira, G., & de Azevedo, W. F. Jr. (2019). Molegro Virtual Docker for docking. En W. F. de Azevedo Jr. (Ed.), *Methods in Molecular Biology* (Vol. 2053, pp. 149–167). Springer.
- Chiu, W. K. (2021). Pedagogy of emerging technologies in chemical education during the era of digitalization and artificial intelligence: A systematic review. *Education sciences*, 11(11), 709.
- Chavez Gómez, Y. A., & Cuaran Ceballos, A. D. (2024). *Implementación del simulador PhET para la enseñanza de balanceo de ecuaciones químicas en estudiantes de grado décimo comparado con el modelo tradicional en la IEM La Rosa de Pasto* (Doctoral dissertation, San Juan de Pasto-Nariño [Colombia]: Universidad CESMAG).
- ChemCraft. (2016). *ChemCraft 1.6* [Computer software]. <https://www.chemcraftprog.com>
- Cheng, Y.-P., Pedaste, M., Bardone, E., & Huang, Y.-M. (Eds.). (2024). *Innovative technologies and learning: 7th International Conference, ICITL 2024, Tartu, Estonia, August 14–16, 2024, proceedings, part I* (Lecture Notes in Computer Science, Vol. 14785). Springer Nature Switzerland AG.
- Gómez-Zermeño, M. G. (2023). *Inteligencia Artificial: Conceptos clave y experiencias en prácticas educativas*. Portal de Investigación.
- Gómez, B. R. (2005). Aprendizaje basado en problemas (ABP): Una innovación didáctica para la enseñanza universitaria. *Educación y educadores*, (8), 9-20.
- Grimme, S., Antony, J., Ehrlich, S., & Krieg, H. (2010). A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H–Pu. *The Journal of Chemical Physics*, 132(15), 154104.

[Capítulo 1] Enseñanza de la Química en la Era Digital: Simulación Molecular, Big Data e Inteligencia Artificial

- Kılınç, S. (2023). *Embracing the future of distance science education: Opportunities and challenges of ChatGPT integration*. *Asian Journal of Distance Education*, 18(1), 205–237. <https://doi.org/10.5281/zenodo.7857396>.
- Likert, R. (1932). A technique for the measurement of attitudes. *Archives of Psychology*, 22(140), 1–55.
- Mazzuco, A., Krassmann, A. L., Reategui, E., & Gomes, R. S. (2022). A systematic review of augmented reality in chemistry education. *Review of Education*, 10(1), e3325.
- Neese, F. (2022). Software update: The ORCA program system, version 5.0. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 12(1), e1606.
- Tello, A. E. C., Ramírez, H. C. G., Sosa, P. C. H., Sánchez, M. Á. F., & Paucar, E. C. (2023). El uso del Aprendizaje Basado en Problemas (ABP) en la educación superior. *Educa UMCH*, (21), 29-44.
- Pazos-Yerovi, E. I., & Aguilar-Gordón, F. D. R. (2024). El Aprendizaje Basado en Problemas como estrategia metodológica para el desarrollo del Pensamiento Crítico. *Revista de estudios y experiencias en educación*, 23(53), 313-340.
- Perkins, K. K., Adams, W. K., Dubson, M., Finkelstein, N. D., Reid, S., Wieman, C. E., & LeMaster, R. (2006). *PhET: Interactive simulations for teaching and learning physics*. University of Colorado Boulder.
- Wang, S., Wang, F., Zhu, Z., Wang, J., Tran, T., & Du, Z. (2024). Artificial intelligence in education: A systematic literature review. *Expert Systems with Applications*, 252, 124167.
- Wavefunction, Inc. (2008). *Spartan '08* [Computer software]. Wavefunction, Inc.
- Weigend, F., & Ahlrichs, R. (2005). Balanced basis sets of split valence, triple zeta valence and quadruple zeta valence quality for H to Rn: Design and assessment of accuracy. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 7(18), 3297–3305.