

Models360 i ChemEd X Data: plataformes web per navegar, representar i interpretar informació química

Models360 and ChemEd X Data: web platforms to navigate, represent and interpret chemical data

Xavier Prat-Resina / Universitat de Minnesota. Center for Learning Innovation (Rochester, Minnesota, EUA)



resum

Les pàgines web que aquí es presenten, Models360 i ChemEd X Data, estan dissenyades per cobrir unes necessitats emergents en la didàctica de la química, com són explorar, visualitzar i interpretar dades científiques. Models360 és una base de dades visual que mostra informació molecular com ara propietats estructurals, electrostàtiques i vibracionals. ChemEd X Data és un navegador de dades per representar tendències i periodicitats de resultats experimentals. Es mostren exemples de possibles activitats, així com un cas d'implementació i avaluació.

paraules clau

Visualització 3D, dades científiques, activitats basades en dades, ensenyament al web, aprenentatge per descobriment.

abstract

The websites presented in this paper, Models360 and ChemEd X Data, are designed to cover an emerging set of skills in chemistry instruction, that is, being able to navigate, visualize and interpret scientific data. Models360 is a visual database that shows molecular information like structure, electrostatic and vibrational properties. ChemEd X Data is a data browser tool to represent trends and periodicities between experimental results. We show a list of possible activities as well as an example of delivery and assessment.

keywords

3D visualization, scientific data, data-oriented activities, web learning, discovery learning.

Introducció

Des de la irrupció d'Internet, els professionals de l'educació han mirat d'esbrinar el paper que els continguts en línia poden desenvolupar com a eina educativa. Per exemple, el material en línia permet, gairebé per definició, una navegació no seqüencial i no lineal i, per tant, requereix un nivell alt d'autoregulació i autoavaluació per part de l'alumne, que molt sovint en cursos introductoris de química no es posseeix (Devolder, Braak i Tondeur, 2012; Moore, Herzog

i Perkins, 2013; Moos i Azevedo, 2009). Per tant, cal concebre el material en línia no com un substitut dels llibres de text, sinó com una eina complementària per a la qual cal preparació. El fet que un contingut en línia sigui molt visual o molt interactiu no significa que tingui valor pedagògic en qualsevol context. Tot i que aquesta discussió va més enllà de l'objectiu d'aquest article, és important destacar des del començament que les eines que aquí es descriuen només podrien tenir un efecte

pedagògic positiu quan es considera detingudament el context didàctic en el qual es fan servir.

En aquest article es descriuen dues aplicacions web interactives que miren de cobrir dues necessitats en la didàctica de la química ben diferenciades. D'una banda, Models360 (Prat-Resina, Holmes i Moore, 2009) se centra en l'exploració de propietats moleculars de compostos i com aquestes propietats estan relacionades amb l'estructura en 3D molecular o reticular del

compost. És ben sabut que alumnes de cursos introductoris de química tenen dificultat a l'hora de visualitzar propietats moleculars com ara càrregues, moments dipolars i estructura en general i, per tant, no poden connectar estructura i propietat de manera completa (Bucat i Mocerino, 2009). La característica principal de Models360 és que mostra una única substància per pàgina i ofereix un gran ventall de propietats moleculars calculades amb les eines computacionals.

D'altra banda, ChemEd X Data (Eklund i Prat-Resina, 2014) posa a disposició una interfície de taules i gràfics on l'alumne pot fàcilment navegar i representar propietats experimentals fisicoquímiques de diversos compostos a la vegada. En aquest cas, l'èmfasi de ChemEd X Data rau a deixar que l'alumne pugui comparar propietats i descobrir per si sol relacions entre estructura i propietat, a la vegada que ha de poder identificar excepcions i descobrir regularitats i lleis físiques de manera semi-autònoma.

Una de les característiques principals de les dues plataformes web que aquí es descriuen és que les dues compilacions de dades científiques són obertes i lliures per a la descàrrega (Prat-Resina, 2014a; Prat-Resina, 2014b) perquè qualsevol les pugui fer servir. De fet, en l'article es descriurà com altres investigadors o professionals de l'educació poden adaptar la informació que nosaltres hem compilat.

L'article es divideix en tres parts principals. La primera i la segona tracten sobre el disseny, el desenvolupament i el manteniment d'aquestes eines web. La tercera és la descripció de l'ampli ventall d'activitats que es poden implementar a l'aula o fora d'aquesta i que fan ús d'aquestes

Una de les característiques principals de les dues plataformes web que aquí es descriuen és que les dues compilacions de dades científiques són obertes i lliures per a la descàrrega perquè qualsevol les pugui fer servir

pàgines. Les diferents activitats aquí exposades miraran de cobrir diferents tipus de necessitats pedagògiques en la didàctica de la química.

Models360: una biblioteca en 3D interactiva

La primera versió de Models360 es va idear i desenvolupar gràcies al projecte Chemical Education Digital Library (<http://www.chemeddl.org>), que pertanyia al programa National Science Digital Library (<http://www.nsdsl.org>) de la National Science Foundation (NSF) (DUE-0632303 i DUE-0938039, sota la direcció de John Moore). Tot i que la idea estava basada en una aplicació anterior anomenada Inorganic Molecules: A Visual Database, que estava entre les aplicacions de subscripció del *Journal of Chemical Education*, es va decidir ampliar la col·lecció de molècules (de setanta a set-cents), calcular de manera quantitativa propietats moleculars i fer les pàgines web més interactives fent servir el visualitzador molecular Jmol (*Jmol...*, s. a.).

El criteri amb el qual es van escollir els compostos orgànics i inorgànics va ser, sobretot, pensant en la llista de compostos que els cursos de química general farien servir. Érem conscients que massa compostos farien la cerca i la navegació més difícils i, alhora,

disminuiria necessàriament la qualitat de la informació i el manteniment seria més feixuc. La mida que es va decidir és d'uns set-cents compostos moleculars.

Construcció de la base de dades

Cada molècula de la nostra col·lecció té tres tipus de dades diferents: descriptors, dades obtingudes per quimioinformàtica i dades calculades amb eines de la química quàntica.

— Descriptors quimioinformàtics: cada molècula té associada una sèrie de descriptors (InChi, InChiKey, SMILES, nom IUPAC, PubChem i índex CAS) que permeten identificar de forma unívoca el compost. Amb un únic descriptor, es va poder connectar amb altres eines i bases de dades [CIR (NIH. *Chemical identifier resolver*, 2009-2016), Wikipedia, PubChem] per obtenir la resta dels descriptors.

— Dades quimioinformàtiques: gràcies a les eines provinents de la quimioinformàtica, es poden automatitzar càlculs moleculars d'una manera molt senzilla. Es van fer servir eines com ara OpenBabel/Pybel (O'Boyle, Morley i Hutchison, 2008) per calcular de manera automàtica masses moleculars, estructura en 2D i connectivitat, així com per identificar compostos aromàtics, amb anells, amb diferents grups funcionals o per classificar cadenes alquílques ramificades i lineals.

— Càlculs quàntics acurats: tot i que les eines de la quimioinformàtica poden predir estructures en 3D de molècules o càrregues atòmiques, en el moment en què la molècula conté un àtom més enllà del segon període, la capacitat predictiva decau considerablement. Així, doncs, per a cada molècula, es va realitzar una sèrie de càlculs quàntics amb el funcional de la densitat b3LYP i amb base doble zeta amb

polarització. Totes les estructures moleculars han estat optimitzades a aquest nivell i s'hi ha fet un càlcul de les segones derivades de l'energia que permet calcular les freqüències i els modes normals de vibració. Una anàlisi de la funció d'ona amb l'estratègia NBO (Weinhold i Landis, 2001) permet també calcular càrregues atòmiques parcials i, fins i tot, predir diferents estructures ressonants amb els pesos corresponents. Tant l'ús del funcional b3LYP com el tractament NBO són tècniques estàndard de la química quàntica i estan àmpliament descrites en llibres de text com ara Cramer (2004).

Quan es va dissenyar la base de dades, es va fer pensant que també es pogués utilitzar per a altres propòsits, a banda de Models360.

Tot i que no es vegi a la plataforma web, Models360 genera la informació fent servir una API (*application programming interface*). Les instruccions per fer servir aquesta API es van descriure a Prat-Resina (2014c), el seu ús és públic i està a l'abast de tothom. Aquesta feina feta «entre bambolines» permet que altres aplicacions, a part de Model360, puguin fer ús de la base de dades. És el cas de les aplicacions que es troben a <http://www.chemeddl.org>, com ara Periodic Table Live!, ChemPrime, ChemPaths i WikiHyper glossary. Gràcies a aquesta API, l'eina de cerca de Models360 permet buscar compostos sobre la base de les seves propietats, com ara grups de simetria, es-estructura RPECV, grups funcionals i quiralitat.

Una aplicació menys tècnica i més accessible a tots els usuaris són les eines per poder inserir una molècula en un blog, un correu electrònic o qualsevol altra pàgina digital. La pestanya

«Export» permet copiar el codi HTML d'una molècula específica.

El web Models360

Per a cada molècula, a part de visualitzar dades estructurals com ara les distàncies, els angles, les càrregues i els moments dipolars, les propietats que es poden visualitzar estan classificades en quatre àmbits diferents:

— Propietats electrostàtiques: a partir de les càrregues atòmiques NBO, el visualitzador Jmol calcula i mostra mapes electrostàtics al voltant de la molècula. Així, doncs, es poden veure superfícies d'isopotencial (vermell i blau per al potencial negatiu i positiu, respectivament) i tant superfícies de Van der Waals com superfícies planes on es projecta un color depenent del valor del potencial electrostàtic (fig. 1). El criteri per als colors també es pot canviar quan s'indica el valor de tall.

— Propietats de vibració molecular: les freqüències de vibració són les calculades en el nivell de teoria descrit més amunt, en fase gas. Així, doncs, els valors propis de la hessiana de l'energia són les constants de força de vibració harmònica i els vectors propis són els modes normals de vibració. És important entendre que aquests valors de freqüència poden ser molt diferents dels que es poden trobar experimentalment. Cal recordar que els càlculs són en fase gas. Tot i així, es pot veure un espectre infraroig teòric i, clicant sobre cada pic de l'espectre, identificar la vibració molecular a la qual correspon. La intensitat del pic també es pot predir teòricament: com més canviï el moment dipolar durant la vibració, més intens serà el pic de l'espectre (fig. 2).

— Orbitals moleculars: els orbitals moleculars es poden visualitzar també gràcies a Jmol. Es mostren en forma d'isosuperfícies

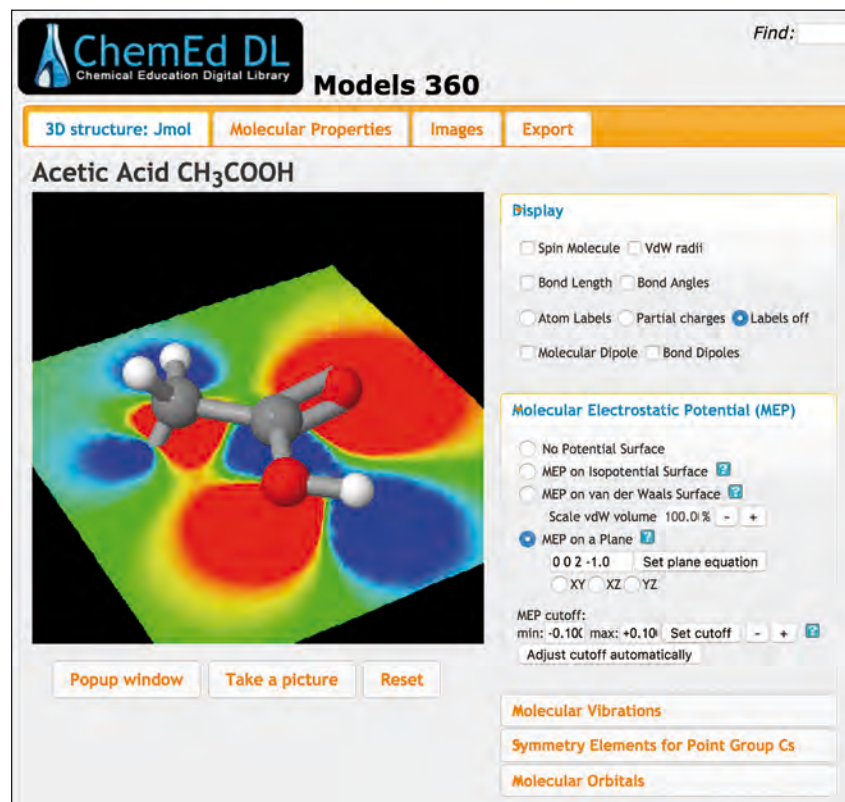


Figura 1. Models360: mapa electrostàtic de l'àcid acètic projectat sobre un pla.

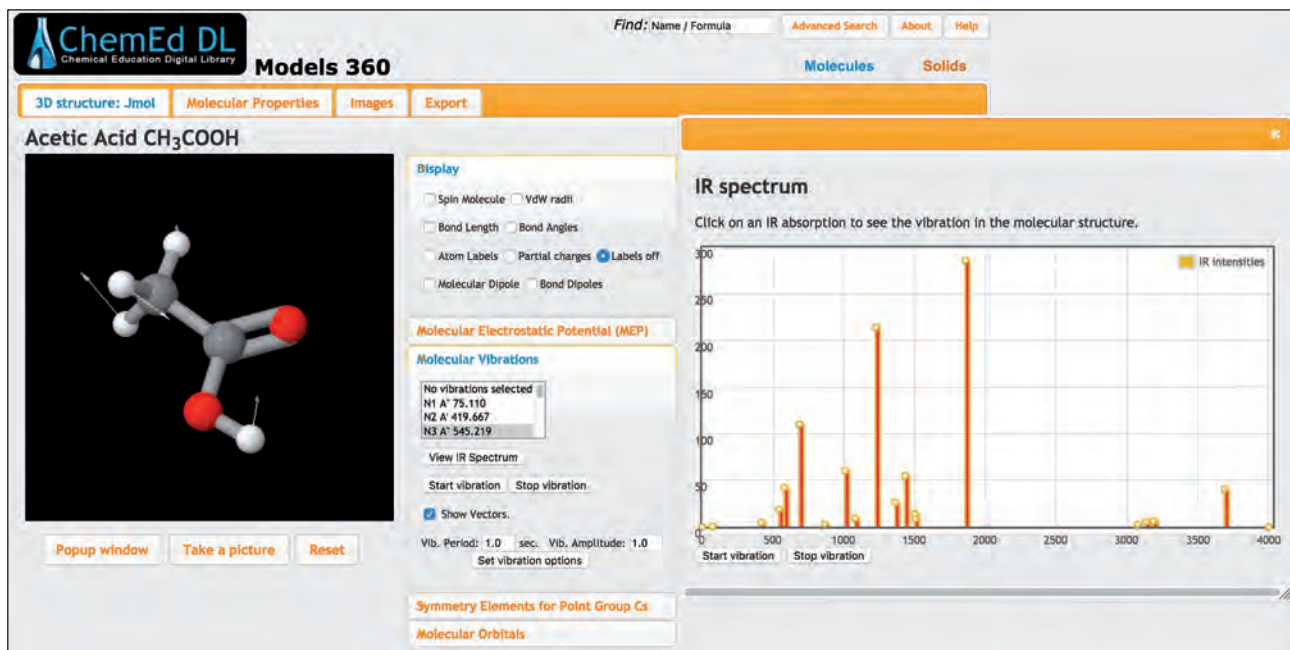


Figura 2. Models360: vibracions moleculars sincronitzades amb les línies de l'espectre infraroig.

en les quals el valor de la funció d'ona té dos colors: per al valor positiu i per al negatiu. Com qualsevol funció de tres coordenades, per representar-la en 3D cal tallar-la d'acord amb un valor. D'aquí ve que l'aplicació permet establir un valor de tall que determinarà la mida de l'orbital molecular.

— Propietats de simetria puntual: l'estructura de les molècules es va optimitzar buscant el mínim absolut d'energia. D'aquí ve que, tot i que moltes molècules de la col·lecció tenen diverses estructures conformacionals, normalment es mostra l'estructura de més baixa energia, que sovint també és la més estable i la més simètrica. Inicialment, es va fer servir un codi desenvolupat per Serguei Patchkovskii per calcular els elements de simetria (Patchkovskii, 2004). Tot i així, les últimes versions de Jmol permeten trobar les operacions de simetria puntual automàticament.

Models360 per a l'estat sòlid

Dins la col·lecció de Models 360, hi ha una subcol·lecció d'estructures de sòlids que,

bàsicament, és la versió interactiva i millorada d'una altra eina anomenada A Window on the Solid State, també disponible només per a subscriptors del *Journal of Chemical Education*.

Aquesta subcol·lecció millorada és oberta a tothom i té cinc subseccions:

- Estructura sòlida d'elements químics: es mostra l'estructura cristal·lina més comuna de cada element químic.
- Estructura d'empaquetaments metàl·lics: es mostra la

cel·la elemental de diferents empaquetaments metàl·lics, així com les capes de repetició que ajuden a diferenciar les diferents disposicions atòmiques. Vegeu la fig. 3 com a exemple il·lustratiu d'aquesta subcol·lecció.

— Estructures primàries de sòlids iònics: permet distingir els llocs ocupats per anions i els forats ocupats per cations, així com diferents mides de cel·la.

— Estructures de sòlids moleculars: estructura cristal·lina del gel, CO_2 i sofre, que permet

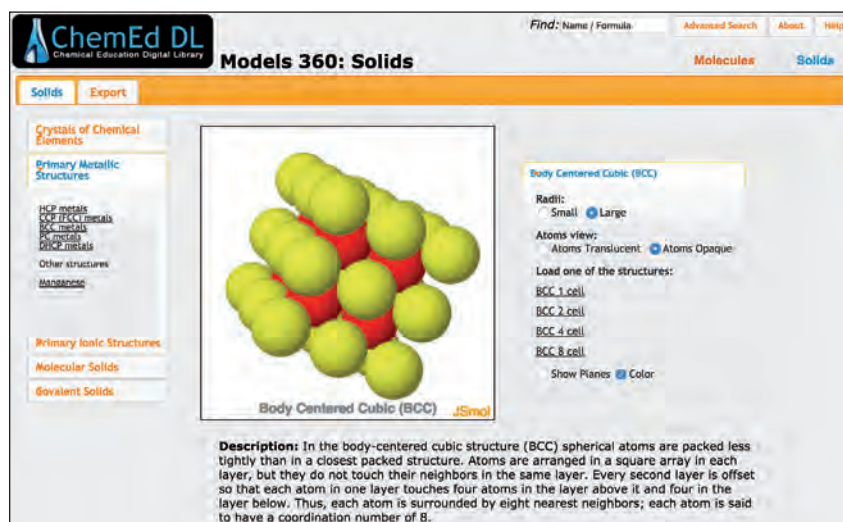


Figura 3. Models360: sòlids. Quatre cel·les de l'estructura primària compacta centrada en el cos.

diferenciar enllaços covalents i interaccions intermoleculares.

— Estructures de sòlids covalents: ofereix les diferents formes al·lotròpiques del carboni i òxids de silici. Per exemple, s'hi poden veure el quars, la zeolita, el diamant, el grafit, diversos nanotubs de carboni i, sobretot, diferents mides de full·lerè. En l'últim cas, es pot veure com una combinació de pentàgons i hexàgons permet la curvatura d'un pla de carboni en el qual tots els àtoms tenen hibridació sp^2 .

ChemEd X Data: navegació, representació i comparació gràfica

ChemEd X Data va néixer de la necessitat d'ensenyar com cal interpretar dades científiques a alumnes que feien cursos introductoris de química. En assignatures de química general, es cobreixen una sèrie de lleis i teories que permeten entendre la connexió entre l'escala atòmica i la macroscòpica (Bucat i Mocerino, 2009). Tot i així, sovint es posa massa l'èmfasi a presentar les teories i periodicitats des del començament, sense deixar que els resultats parlin per si sols.

Per tal de deixar que els alumnes poguessin navegar i representar dades de manera fàcil però desestructurada, calia trobar un punt d'equilibri entre evitar una estructura i una representació massa rígides i una estructura massa desendreçada que fes la navegació impossible. Al cor d'aquest disseny, es troba l'objectiu que els alumnes practiquin l'autoregulació i l'autoavaluació (Devolder, Braak i Tondeur, 2012), i ha calgut fer diverses iteracions de disseny o implementació i l'opinió dels alumnes per aconseguir la versió última de l'aplicació que aquí es presenta.

Col·lecció de dades

ChemEd X Data té tres seccions principals: una de propie-

tats de compostos orgànics, una altra de propietats d'elements químics i compostos inorgànics i una tercera de valors termodinàmics per a reaccions químiques.

Per a les substàncies orgàniques, es va fer una llista dels grups funcionals més comuns en cursos que fan una introducció a la química orgànica. Per a cada grup funcional, es van incloure compostos entre un i deu àtoms de carboni, incloent-hi compostos ramificats, amb anell i aromàtics.

Les dades experimentals que es van extreure de forma semiautomàtica del *NIST Chemistry WebBook* (2016) són els punts d'ebullició i fusió, les entalpies de vaporització i fusió, les capacitats calorífiques del gas i el líquid i les entalpies normals de formació i combustió del gas i el líquid. L'estratègia que segueix el *Chemistry WebBook* és fer una mitjana de les dades que més consens tenen. Aquesta estratègia li dóna una de les millors fonts per a dades experimentals de qualitat.

Per a la secció inorgànica, les propietats dels elements químics (punt de fusió i ebullició, radi atòmic, afinitat electrònica i energia d'ionització) es van agafar de la *Wikipedia*. En aquest cas, es va preferir aquesta segona opció, ja que molts dels nostres compostos no es trobaven al *Chemistry WebBook* i la *Wikipedia* ha demostrat últimament que la qualitat de les seves dades científiques supera la d'altres bases de dades de renom (Williams, Ekins i Tkachenko, 2012).

Pel que fa als compostos inorgànics, estan classificats com a òxids, oxoàcids, oxosals, hidrurs, halurs i d'altres. Les propietats que es van recollir són només el punt d'ebullició i el punt de fusió i l'energia reticular iònica.

Navegació de dades a ChemEd X Data

La pàgina de ChemEd X Data que es carrega per defecte és la de les substàncies orgàniques amb la propietat «Punts d'ebullició» i el grup funcional «Alcohols». Evidentment, aquesta preselecció es pot canviar. S'hi pot incloure més d'un grup funcional, però només una propietat a la vegada. Gràcies a la taula interactiva que apareix a la dreta, es poden ordenar els centenars de molècules preseleccionades per nom, propietat, nombre d'àtoms de carboni o massa molecular. La taula també permet filtrar per paraules clau i seleccionar compostos específics (fig. 4).

El botó «Desar selecció» guarda la selecció específica de molècules en un únic URL. Aquesta és una eina ideal per compartir dades a classe, sigui perquè el professor vol mostrar una selecció específica de molècules o, com es veurà a l'apartat següent, perquè els estudiants realitzin la seva particular selecció de molècules i se'ls pugui avaluar per les capacitats d'exploració, selecció i interpretació de dades.

El botó «View3D!» permet esbrinar si les tendències o excepcions que un pot veure en la representació gràfica poden ser explicades sobre la base de l'estructura molecular. La pàgina que es carrega quan es prem el botó «View3D!» mostra l'estructura de tantes molècules com s'hagin seleccionat a la taula. Gràcies al visualitzador Jmol, la pàgina mostra propietats com ara càrregues atòmiques, mapes electrostàtics, moments dipolars i operacions de simetria (fig. 5). Cal dir que aquestes propietats normalment són força acurades, però no tenen el rigor que tenen les propietats que es mostren a Models360.

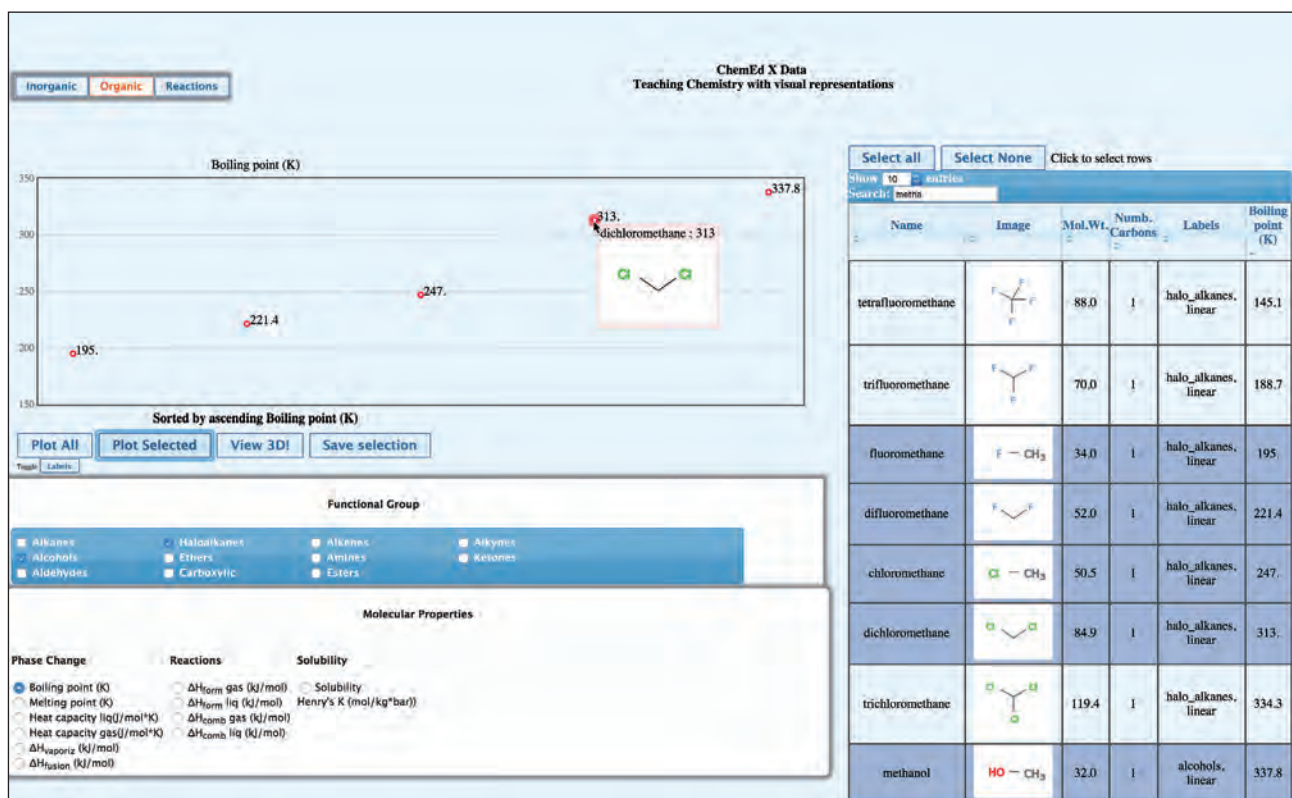


Figura 4. ChemEd X Data: punts d'ebullició de les molècules seleccionades a la taula.

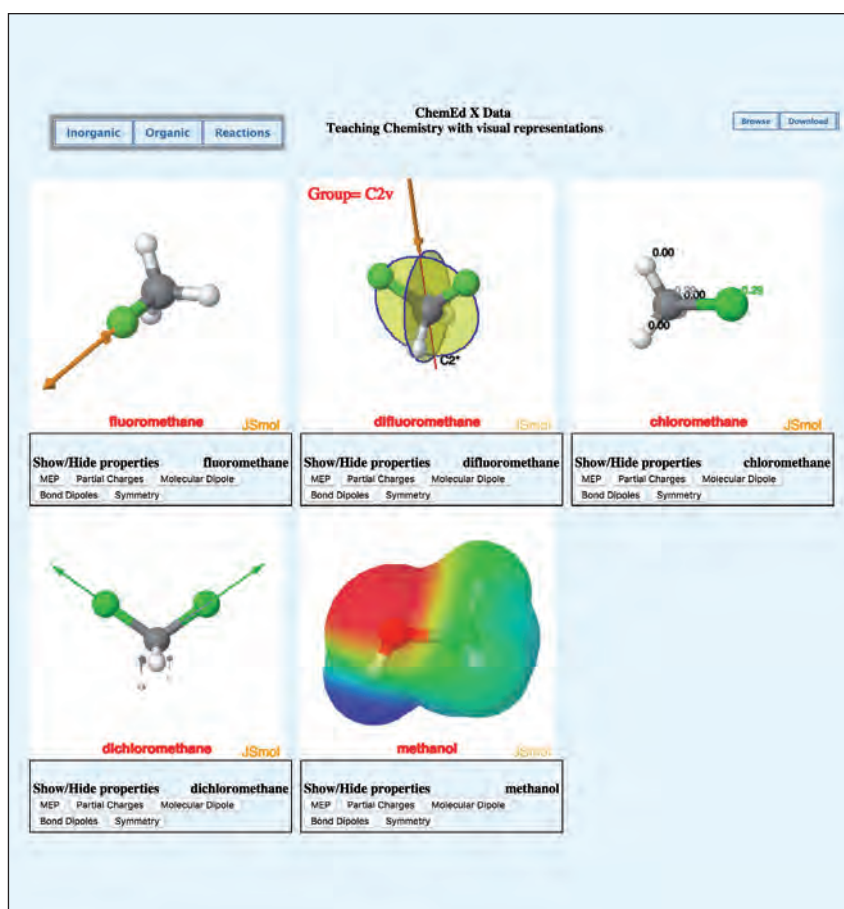


Figura 5. «View3D!» mostra propietats moleculars dels compostos que s'han seleccionat a la taula interactiva.

Per a la secció inorgànica, ChemEd X Data permet seleccionar els compostos a través d'una taula periòdica interactiva. Com es pot veure a la fig. 6, s'hi poden incloure els elements o compostos clicant sobre l'element, el període o el grup de la taula periòdica. La taula interactiva permet ordenar i filtrar la selecció de la mateixa manera que ho fa per a la secció orgànica.

Exemples d'aplicació didàctica

Models360 s'ha fet servir en diversos contextos didàctics, sigui per a demostracions a classe, laboratoris virtuals, projectes i deures, sigui com a font d'informació per a altres tasques. Una llista important d'activitats està disponible a la base de dades de la ChemEd DL («Models360 activities», s. a.), o bé es pot fer una cerca a la conferència biennal d'educació química («Presentations using Models360 at BCCE 2012», 2012). En les referències que aquí es

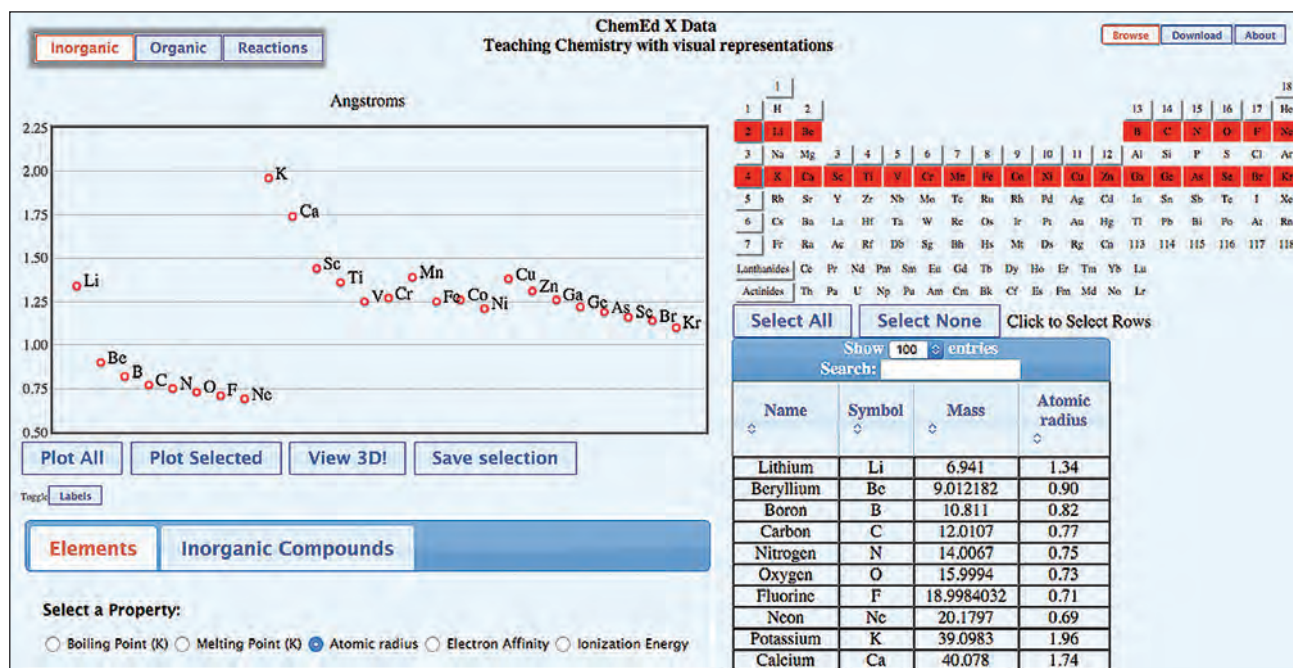


Figura 6. La secció inorgànica de ChemEd X Data permet la representació de propietats d'elements i compostos seleccionant grups i períodes de la taula periòdica.

proporcionen, es pot fins i tot descarregar l'activitat en qüestió. La majoria de les activitats se centren en la visualització de la polaritat, l'estructura molecular i la simetria i com aquestes propietats moleculars tenen conseqüències en les propietats macroscòpiques del compost. Tot i que propietats com els orbitals i les vibracions moleculars podrien creure's massa sofisticades per ser emprades en cursos d'educació secundària, cal destacar un treball en el qual s'estudia la interacció llum-matèria al batxillerat fent servir l'espectre vibracional de Models360 (Rios i Pintó, 2013).

L'aplicació didàctica de ChemEd X Data és molt més concreta i, tot i que el contingut s'adequa millor a cursos universitaris, també es pot emprar a secundària.

Si pensem en termes de la taxonomia de Bloom, sovint en cursos introductoris ensenyem habilitats de baix nivell (memorització i aplicació) i deixem les d'alt nivell (anàlisi, creació i avaluació)

per a cursos més avançats. El problema rau quan s'ensenyava química a alumnes que no necessàriament es llicenciaven en química. Cal llavors pensar en quins són els coneixements i les habilitats que volem que els nostres alumnes adquireixin. Aquesta pregunta és encara més rellevant en el context del rol d'Internet en el coneixement, ja que hi ha molta informació en línia, però no necessàriament es tenen les capacitats per navegar, analitzar i interpretar una tal quantitat d'informació.

En aquest sentit, ChemEd X Data pot ajudar a adquirir aquestes habilitats d'alt nivell en el context de la manipulació i la interpretació d'informació química. Per exemple, de més baix a més alt nivell, enumerarem els tipus d'activitats que es poden fer amb ChemEd X Data:

— Capacitat d'explicar una observació: el professor preselecciona un grup de compostos i demana als alumnes que expliquin l'observació. La resposta correcta és única. Exemple: observa la figura 6 i explica la

periodicitat del radi atòmic a la taula periòdica.

— Resolució de problemes: el professor preselecciona un grup de compostos i demana als alumnes que expliquin una aparent contradicció. La resposta correcta és única. Exemple: observa la figura 4; si sabem que com més massa té una molècula més alt és el punt d'ebullició, com expliques que el metanol tingui un punt d'ebullició més alt que el diclorometà?

— Construcció d'un experiment i demostració: el professor posa a disposició dels alumnes l'ús de ChemEd X Data i els demana que construeixin un experiment controlat (*control of variables strategy* o estratègia de control de variables) que mostri una evidència d'un factor que influeixi en una propietat. La resposta correcta no és única. Exemple: escull una sèrie de compostos que mostrin una evidència que els enllaços d'hidrogen són més forts que les interaccions dipol-dipol.

— Construcció de coneixement: el professor posa a disposició dels alumnes l'ús de ChemEd X Data i els demana que trobin els

factors que afecten una certa propietat. La resposta correcta no és única. Exemple: investiga quines propietats moleculars afecten la capacitat calorífica; escull una sèrie de compostos que mostrin una evidència de les teves conclusions.

A tall d'exemple, mostrem breument una part dels resultats d'una activitat fent servir ChemEd X Data en què s'avaluen les dues habilitats de més alt nivell de la llista anterior, és a dir, la construcció d'un experiment controlat i la interpretació de l'experiment.

L'activitat es basa a investigar els diferents factors que poden afectar el punt d'ebullició de substàncies orgàniques: la massa, el tipus d'interacció intermolecular i l'estructura. Els seixanta-tres alumnes que van completar aquesta activitat són estudiants de química general de segon any de la llicenciatura en ciències de la salut. Els estudiants ja posseïen prou nivell de química orgànica per poder identificar els diferents grups funcionals i la seva estructura.

La primera part de l'activitat pretén avaluar els coneixements de nivell baix, com ara identificar diferents grups funcionals, els tipus d'interacció intermolecular que donen i quins interaccionen d'una manera més forta. A la segona part de l'activitat, es demana als alumnes que dissenyin un experiment controlat i l'interpretin. Per exemple:

1. Fent servir ChemEd X Data, selecciona quatre compostos per investigar l'efecte que la massa té sobre el punt d'ebullició de compostos moleculars.

2. Quines conclusions en treus?

Aquestes dues preguntes es repeteixen amb relació l'efecte que té la ramificació de la molècula.

Es mostra un resum dels resultats a la taula 1, on a la primera

fila es pot veure la fracció d'estudiants que construeixen un bon experiment controlat, és a dir, els que seleccionen una sèrie de molècules en què només el factor que s'estudia és variable. Seguidament, es mostra quina fracció d'estudiants, independentment de si han tret la conclusió correcta, són almenys conseqüents i, per tant, saben interpretar la selecció de molècules. Per exemple, un estudiant que per investigar l'efecte de la massa hagi seleccionat metà, età, propà i butà haurà fet una bona selecció. En canvi, un estudiant que seleccioni metà, clorometà, metanol i fluorometà no haurà fet una bona selecció, ja que en aquesta segona sèrie també canvien els grups funcionals i, per tant, no només estarem avaluant l'efecte de la massa. En aquest últim cas, l'estudiant, a causa de la incorrecta selecció de molècules, ha d'acabar conclouent que la molècula més massiva (el clorometà) no és la que té el punt d'ebullició més alt (metanol). Una lectura similar es pot fer de l'efecte de cadena lineal o ramificada sobre el punt d'ebullició.

Tot i que les dades de la taula 1 són només els resultats d'un estudi preliminar, podem dir que, si bé la majoria dels estudiants coneixia els continguts necessaris per fer l'activitat, una fracció significativa no va saber escollir el conjunt de molècules per fer un experiment controlat. Independentment de si el conjunt de molècules escollides era el

correcte, vam voler saber quants alumnes sabrien interpretar la seva pròpia representació. En aquest cas, l'efecte de la massa sembla més fàcil d'interpretar que l'efecte lineal/ramificat. Per tant, una de les conclusions que es treu d'aquesta breu anàlisi és que cal invertir temps a classe per practicar aquests tipus d'activitats d'alt nivell, tant pel que fa al disseny d'experiments com a l'avaluació.

Conclusions

En aquest article, hem descrit dues eines web, Models360 i ChemEd X Data, que s'han dissenyat pensant en dues necessitats pedagògiques ben diferents. Models360 se centra en la visualització en 3D de propietats moleculars, sobretot, estructurals i electrostàtiques. ChemEd X Data, en canvi, pretén posar en relleu la necessitat dels alumnes de saber explorar, seleccionar i interpretar dades científiques. Es mostren diversos exemples pràctics sobre com es poden fer servir aquestes eines a classe depenent del nivell dels alumnes i del tipus d'habilitat que es vulgui aprendre.

Referències

- BUCAT, B.; MOCERINO, M. (2009). «Learning at the sub-micro level: structural representations». A: GILBERT, P. J. K.; TREAGUST, P. D. (ed.). *Multiple representations in chemical education*. Dordrecht: Springer, p. 11-29.
- CRAMER, C. J. (2004). *Essentials of computational chemistry: Theo-*

Taula 1. Resultats de dues activitats en què es pregunta sobre l'efecte de la massa i el de l'estructura de la molècula sobre el punt d'ebullició fent servir ChemEd X Data. S'hi mostra la fracció d'estudiants que construeixen un experiment vàlid i la fracció que sap interpretar-lo

	Efecte de la massa		Efecte lineal/ramificat		
	Sí	No	Sí	Ambigu	No
Construeix un experiment vàlid?	69,8 %	30,2 %	40 %		60 %
La interpretació és conseqüent amb l'experiment ?	88 %	12 %	40 %	44 %	16 %
			Sí	Ambigu	Es contradiu

- ries and models. Nova York: Wiley.
- DEVOLDER, A.; BRAAK, J. van; TONDEUR, J. (2012). «Supporting self-regulated learning in computer-based learning environments: systematic review of effects of scaffolding in the domain of science education». *Journal of Computer Assisted Learning* [en línia], vol. 28, núm. 6, p. 557-573.
- EKLUND, B.; PRAT-RESINA, X. (2014). «ChemEd X Data: exposing students to open scientific data for higher-order thinking and self-regulated learning». *Journal of Chemical Education*, vol. 91, núm. 9, p. 1501-1504.
- Jmol [recurs electrònic]: An open-source Java viewer for chemical structures in 3D (s. a.) [S. ll.: s. n.]. <<http://www.jmol.org>> [Consulta: 23 març 2016]
- «Models360 activities» (s. a.). A: *ChemEd DL* [en línia]: *Chemical Education Digital Library*. Washington: American Chemical Society. <http://serc.carleton.edu/sp/chemed-dl/activities.html?search_text=models+360&Search=search> [Consulta: 23 octubre 2016].
- MOORE, E. B.; HERZOG, T. A.; PERKINS, K. K. (2013). «Interactive simulations as implicit support for guided-inquiry». *Chemistry Education Research and Practice* [en línia], vol. 14, núm. 3, p. 257-268.
- MOOS, D. C.; AZEVEDO, R. (2009). «Learning with computer-based learning environments: a literature review of computer self-efficacy». *Review of Educational Research*, vol. 79, núm. 2, p. 576-600.
- NIH [en línia]: *Chemical identifier resolver* (2009-2016). Rockville: National Cancer Institute. <<http://cactus.nci.nih.gov/chemical/structure>> [Consulta: 23 octubre 2016].
- NIST Chemistry WebBook [en línia] (2016). Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology. <<http://webbook.nist.gov/chemistry/>> [Consulta: 23 octubre 2016].
- O'BOYLE, N. M.; MORLEY, C.; HUTCHINSON, G. R. (2008). «Pybel: a Python wrapper for the OpenBabel cheminformatics toolkit». *Chemistry Central Journal*, vol. 2, núm. 1, p. 5.
- PATCHKOVSKII, S. (2004). «S. Patchkovskii brute force symmetry analyzer». A: *GitHub* [en línia]. San Francisco: GitHub. <<https://github.com/nquesada/symmetry>> [Consulta: 23 març 2016]
- PRAT-RESINA, X. (2014a). «ChemEd X Data dataset. July, 30». A: *Figshare* [en línia]. Londres: Boston: Nova York: s. n. <http://figshare.com/articles/ChemEd_X_Data_dataset/1121665> [Consulta: 23 octubre 2016].
- (2014b). «Models360 dataset. August, 15». A: *Figshare* [en línia]. Londres: Boston: Nova York: s. n. <http://figshare.com/articles/Models_360_dataset/1140328> [Consulta: 23 octubre 2016].
- (2014c). «Using molecular and element data from Models360 with ChemEd DL API». A: *Bits and bytes of learning* [en línia]. [S. ll.: s. n.]. <<http://xavieratumr.blogspot.com/2014/08/using-molecular-and-element-data-from.html>> [Consulta: 23 octubre 2016].
- PRAT-RESINA, X.; EKLUND, B. P. (2014). *ChemEd X Data web platform* [en línia]. Rochester: Universitat de Minnesota. <<http://chemdata.r.umn.edu/chemedXdata/>> [Consulta: 23 octubre 2016].
- PRAT-RESINA, X.; HOLMES, J.; MOORE, J. W. (2009). «ChemEd DL application: Models360». A: *ChemEd DL* [en línia]: *Chemical Education Digital Library*. Washington: American Chemical Society. <<http://www.chemeddl.org/resources/models360/>> [Consulta: 23 octubre 2016].
- «Presentations using Models360 at BCCE 2012» (2012). A: *Online program guides archive* [en línia]. Washington: American Chemical Society. Biennial Conference on Chemical Education. <<http://www.bcceprogram.haydenmcneil.com/?s=models+360&submit.x=0&submit.y=0>> [Consulta: 23 octubre 2016].
- RIOS, R.; PINTÓ, R. (2013). «Seqüència d'ensenyament-aprenentatge per a l'estudi de la interacció llum-matèria a secundària». *Ciències: Revista del Professorat de Ciències de Primària i Secundària*, núm. 24, p. 2-8.
- WEINHOLD, F.; LANDIS, C. R. (2001). «Natural bond orbitals and extensions of localized bonding concepts». *Chemistry Education Research and Practice*, vol. 2, núm. 2, p. 91-104.
- WILLIAMS, A. J.; EKINS, S.; TKACHENKO, V. (2012). «Towards a gold standard: regarding quality in public domain chemistry databases and approaches to improving the situation». *Drug Discovery Today*, vol. 17, núm. 13-14, p. 685-701.



Xavier Prat-Resina

És llicenciat en química (UB) i doctor en química teòrica (UAB). És *assistant professor* al Center for Learning Innovation de la Universitat de Minnesota a Rochester. Els seus interessos de recerca giren entorn del disseny d'eines web per ajudar en la implementació i l'avaluació d'innovacions pedagògiques. En particular, desenvolupa eines per a ensenyament actiu, *flipped classroom* i avaluació continuada per a classes de química general i de termodinàmica. A/e: pratr001@r.umn.edu.