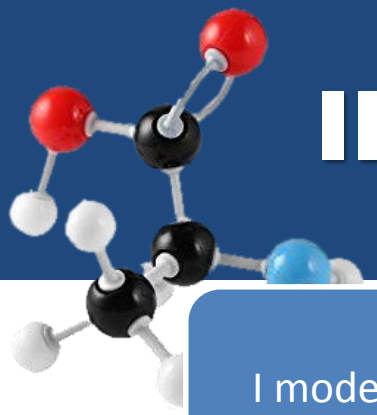
Rizzoli
EDUCATION

La didattica della chimica con i modelli molecolari

Renato Lombardo

Webinar Rizzoli Education

6 marzo 2018



Il webinar in breve

I modelli
- Scienza e modelli
- I modelli molecolari

Usare i modelli molecolari
- Vantaggi nella didattica
- Strategie di impiego

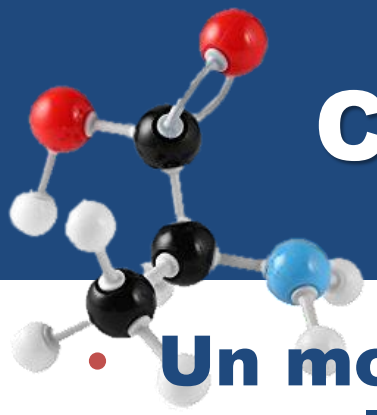
Alcuni possibili esempi
- Ambiti di impiego
- Attività da proporre

I modelli digitali
- Caratteristiche
- Software
- Database pubblici

Limiti dei modelli
- Geometrici e di rappresentazione

La Scienza e i modelli

- **Un modello è un linguaggio che può assumere varie forme a seconda dei contesti**
  - Si parla di modelli matematici, fisici, teorici, empirici, ecc.
- **Lo scopo però è sempre lo stesso**
  - Descrivere un fenomeno
  - Predire proprietà di altri fenomeni a esso connessi
- **La Scienza non fa altro che costruire modelli**
  - Per interpretare nuovi fenomeni
  - Per superare i limiti o le incongruenze dei modelli precedenti

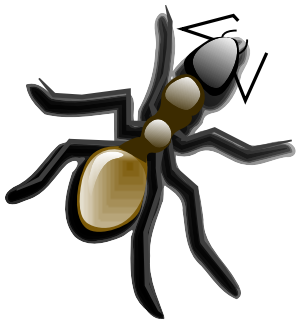


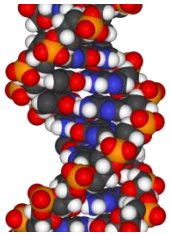
Cogliere l'essenziale

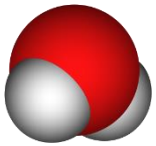
- **Un modello fornisce una rappresentazione <u>semplificata</u> di un fenomeno**
  - Per scelta o per necessità
- **Permette di coglierne gli aspetti <u>essenziali</u>**
  - Quali siano essenziali dipende fortemente dagli scopi e dagli ambiti di applicazione del modello
- **Con la descrizione più semplice possibile**
  - Minor numero di parametri, di assunzioni, ecc.
  - Maggiore generalità di impiego

Superare i limiti della scala

- **Molto spesso un modello serve per cercare di superare i limiti della scala umana**
  - Dove operano i nostri sensi e molti dei nostri strumenti di misura
  - Non possiamo avere una esperienza diretta dei fenomeni al di fuori della nostra scala







10^{3} m 1 m 10^{-3} m 10^{-6} m 10^{-9} m

I modelli molecolari

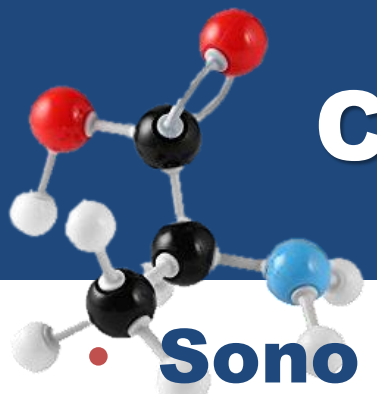
- **Qualsiasi rappresentazione di una molecola costituisce un modello molecolare**
  - Una formula di struttura, un modellino fisico, una serie di equazioni quantomeccaniche, ecc.
- **Oggi ci limiteremo principalmente ai modelli fisici**
  - Con qualche cenno alle rappresentazioni digitali

I modelli molecolari fisici

- **Si tratta di rappresentazioni su scala macroscopica delle molecole tramite oggetti fisici**
  - Che possono essere manipolati direttamente
- **Tipicamente ogni atomo è descritto come una singola entità**
  - Esistono anche modelli che considerano più atomi insieme (ad es, i residui di una proteina o i nucleotidi di una acido nucleico)
- **Ne esistono diverse tipologie**
  - Con differenti scopi, dettagli, capacità esplicativa e predittiva, costi e complessità di impiego

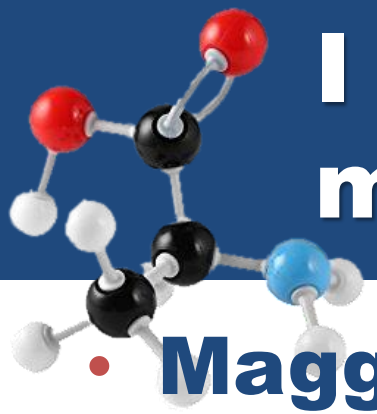
Una tipologia semplice ma efficace

- **I kit più semplici sono costituiti da palline e bacchette di plastica**
- **Semplici ma facilmente accessibili**
  - Sia dal punto di vista economico che pratico
- **Descrivono ragionevolmente bene le proprietà geometriche**



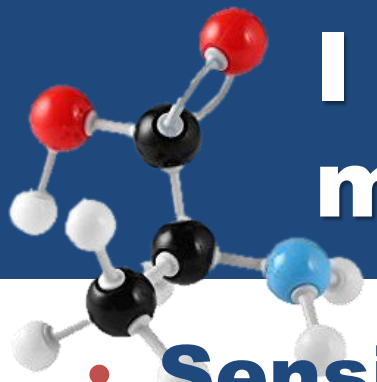
Chimica e abilità spaziali

- **Sono cruciali per la comprensione della chimica**
  - Si osserva una correlazione molto forte fra questa abilità e i risultati ottenuti dagli studenti
  - Esiste una vasta letteratura sull'importanza di promuovere queste abilità
    - Oliver-Hoyo, M.; Babilonia-Rosa, N.A. *J. Chem. Educ.*, 2017, **94**, 996
- **Rivestono grande importanza anche al di fuori della chimica**
  - Determinano molte altre capacità cognitive
  - Influiscono perfino sulle scelte lavorative



I vantaggi nell'impiego di modelli molecolari

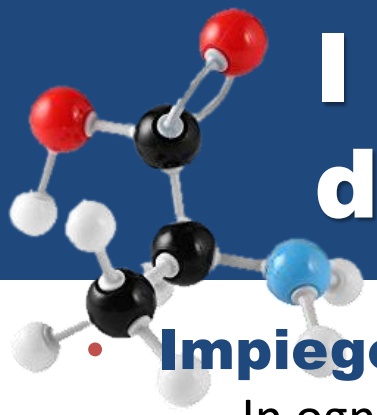
- **Maggiore capacità nel risolvere problemi che coinvolgono visualizzazione e/o manipolazione spaziale**
  - Rotazione di molecole, analisi della simmetria, accostamento di strutture, ecc.
- **Maggiore facilità nel tradurre i concetti da una rappresentazione ad un'altra**
  - E maggiore capacità di impiego di ognuna di esse



I risultati dell'impiego dei modelli

- **Sensibilmente migliori per tutti gli indicatori di valutazione**
  - In minor tempo
- **I concetti acquisiti permangono più a lungo**
- **Sono estesi anche ad argomenti che non coinvolgono direttamente l'impiego di modelli**

Stull, A.T.; Hegarty, M.; *J Educ. Psycol.*, 2016, **108**, 509-527

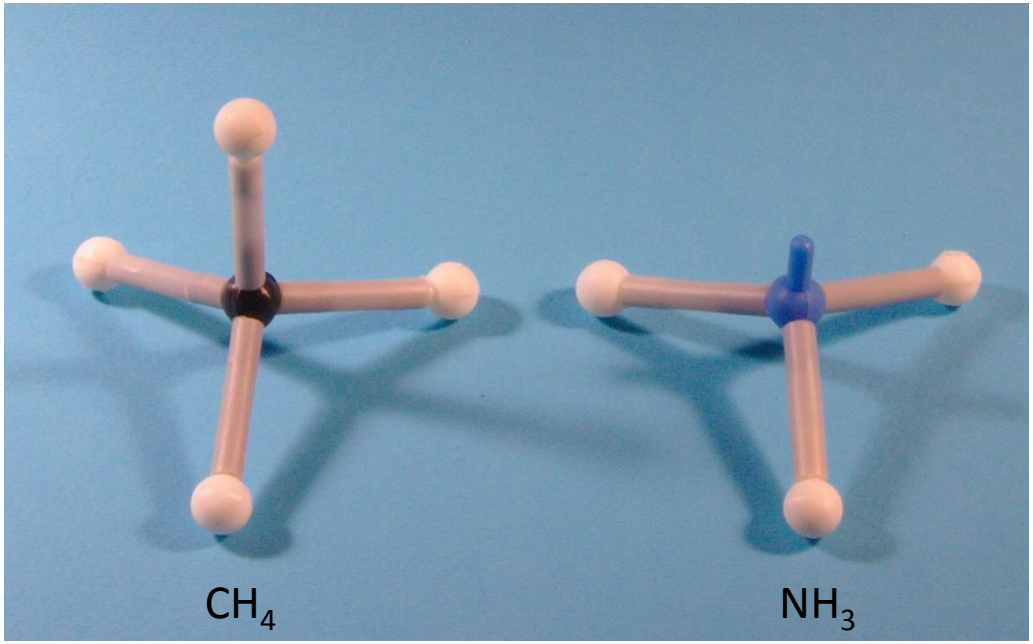


I modelli come strumento didattico

- **Impiego sistematico**
  - In ogni occasione possibile
- **Strumento complementare agli altri**
  - Tutte le abilità devono essere promosse in modo armonico
- **Introduzione graduale**
  - Cominciare da problematiche semplici che possano essere trattate anche con altri strumenti (es. formule di Lewis)
- **Dalla cattedra**
  - Come supporto alla lezione
  - Lasciando comunque che gli studenti possano interagire con i modelli
- **Dai banchi**
  - Stimolando negli studenti la concettualizzazione tramite la manipolazione
  - Di concerto con approcci *inquire based* e di *flipped classroom*

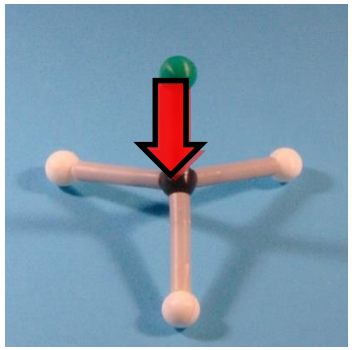
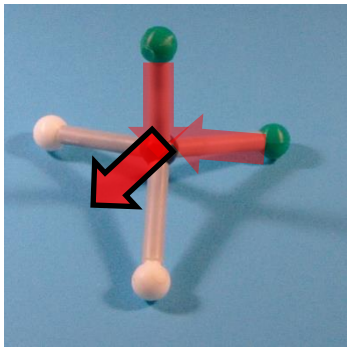
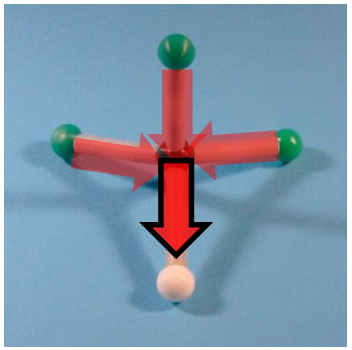
Un primo approccio

- **Dalla formula chimica alla struttura molecolare**
  - Verificare la struttura prevista dalla VSEPR



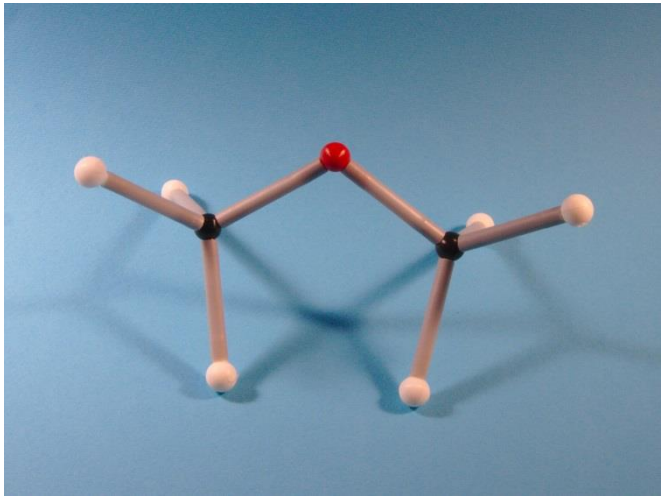
Scoprire le relazioni proprietà-struttura

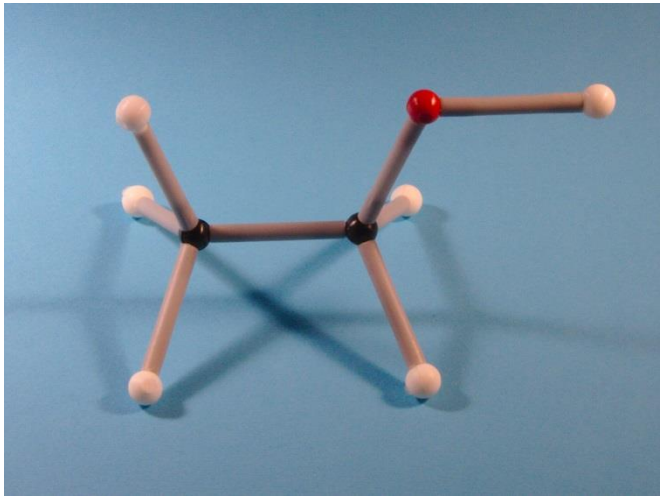
- **Sostituire gli idrogeni di un metano con un alogeno**
  - Determinare la polarità di una molecola dalla sua simmetria
  - Collegare proprietà macroscopiche (es. punti di ebollizione) con la struttura

Ancora su proprietà e struttura

- **Confrontare le strutture del dimetiletere e dell'etanolo**
  - Spiegare l'alta solubilità in acqua
  - Spiegare la diversa temperatura di ebollizione
- **Si potrebbe fare anche con le strutture di Lewis**
  - Ma con i modelli è più facile, giocoso e stimolante
  - Gli studenti si abituano a manipolare strutture tridimensionali e collegarle alle corrispondenti rappresentazioni bidimensionali





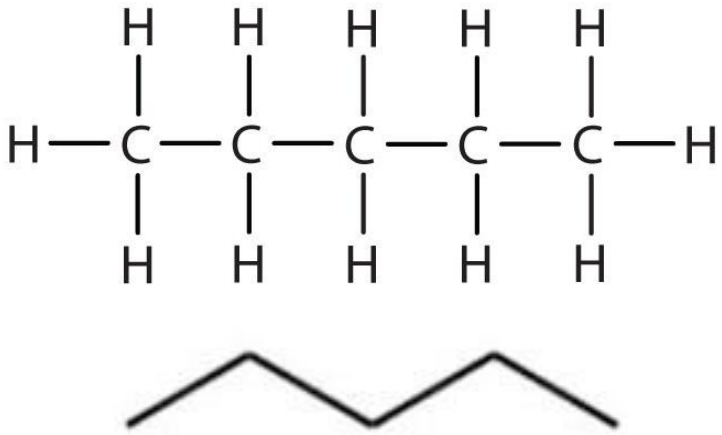
Strutture in chimica organica

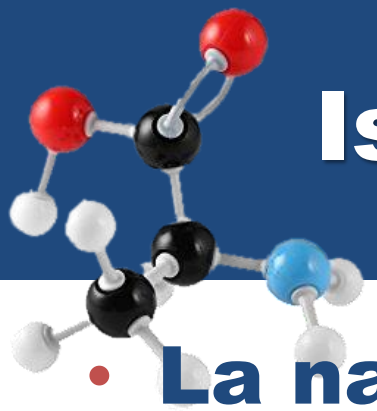
- **L'impiego dei modelli molecolari è di particolare importanza in chimica organica**
  - Le convenzioni per la descrizione delle strutture sono molto compatte ma spesso nascondono molte informazioni

pentano

C_5H_{12}

$CH_3CH_2CH_2CH_2CH_3$



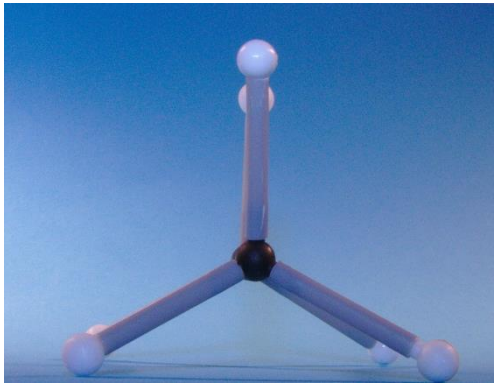


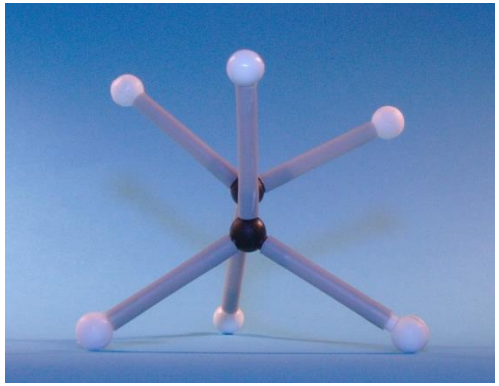
Isomeria conformazionale

- **La natura dei conformeri non è sempre ben compresa dagli studenti**
  - Non si evince dalle formule o dalle formule di struttura
  - La rappresentazione bidimensionale richiede una conoscenza a priori per essere compresa pienamente
    - Proiezioni sul piano, proiezioni di Newman, ecc.

Scoprire i conformeri

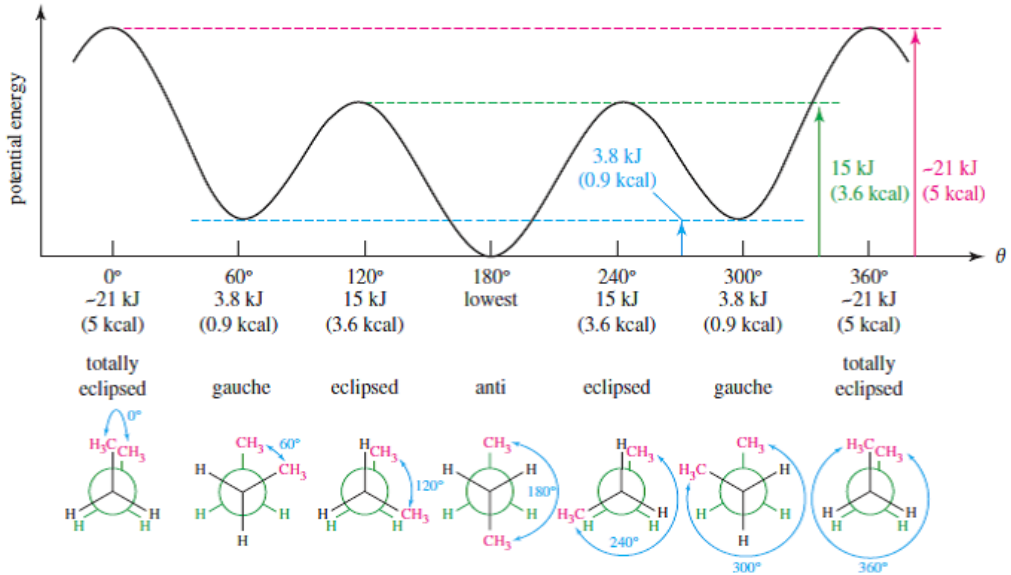
- **Confronto fra varie copie di una molecola semplice (es. etano)**
  - Cercando di stabilire delle «famiglie» di conformeri
  - L'ingombro sterico come fattore determinante

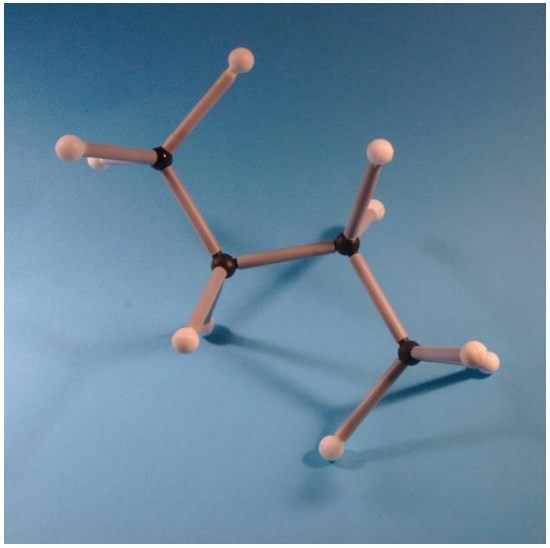


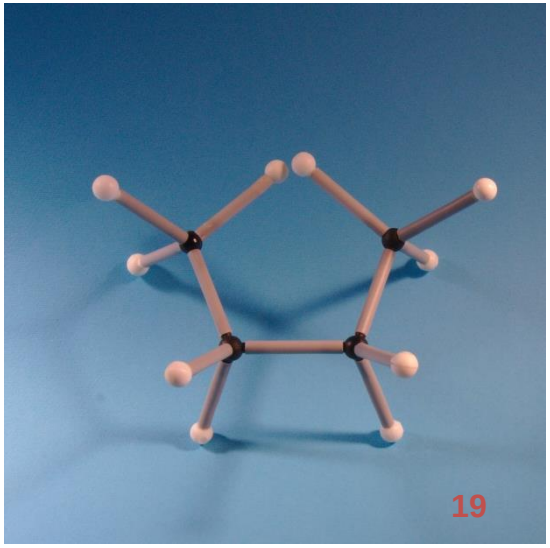


Conformeri più complessi

- **Scoprire cosa succede all'aumentare della complessità**
  - Nel caso del butano si manifestano più conformazioni intermedie

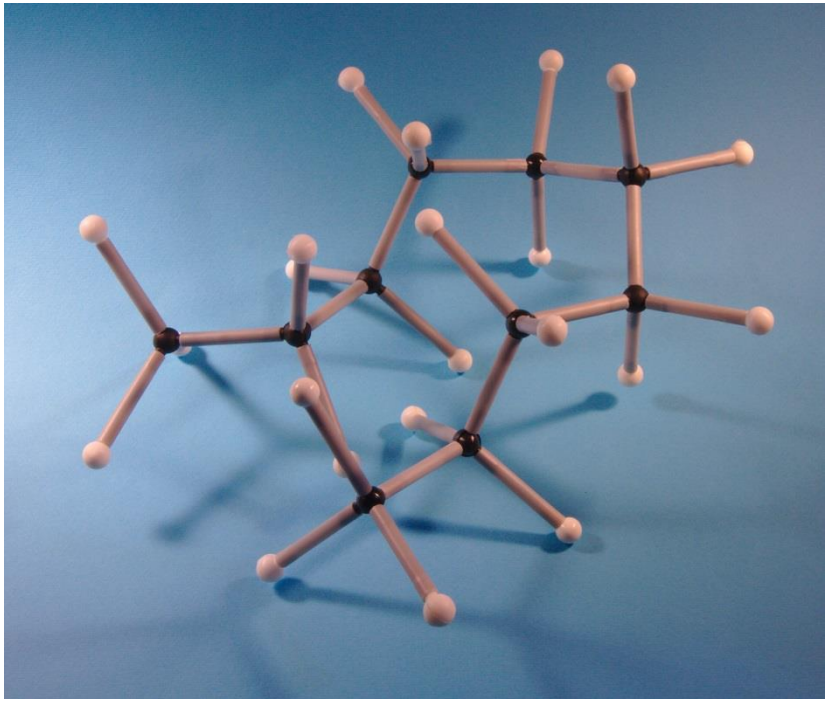


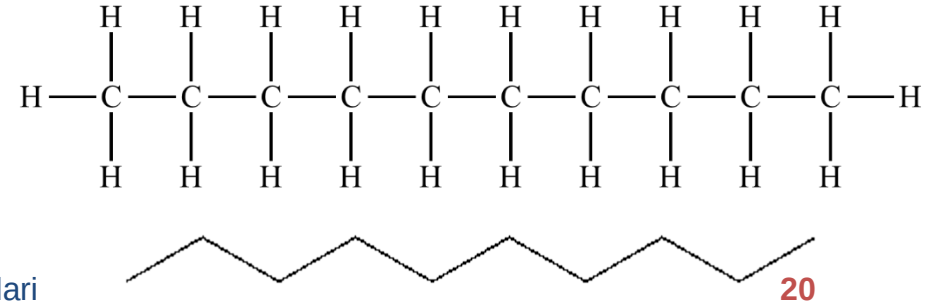




Conformeri e rappresentazione

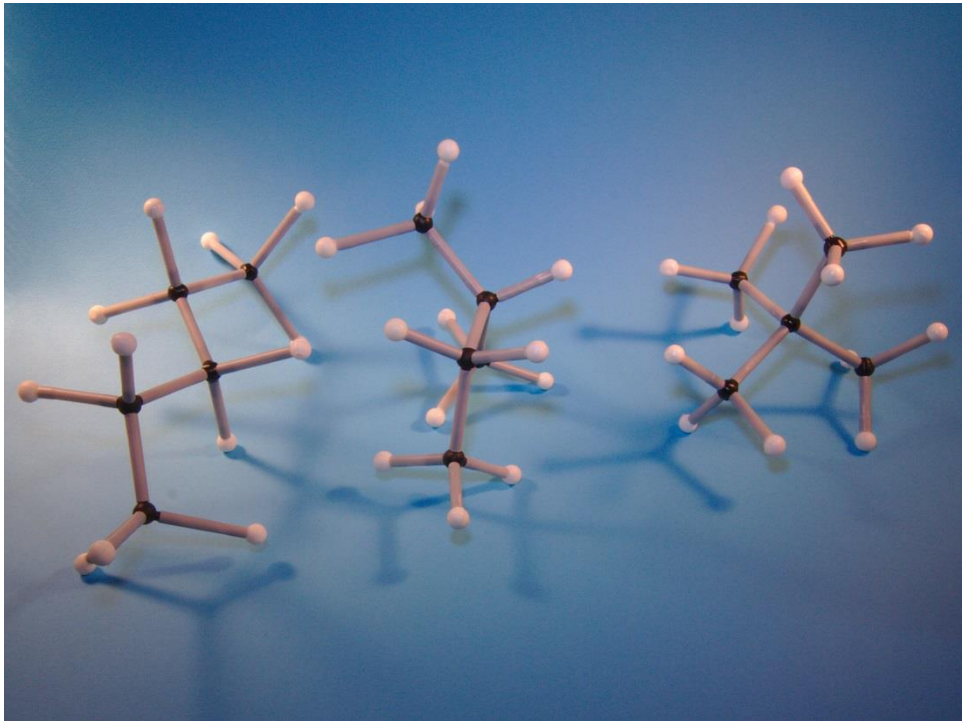
- **Scoprire cosa succede confrontando alcani lineari con catene sempre più lunghe**
  - L'ingombro sterico limita molte configurazioni
- **L'immagine di molecola «lineare» viene completamente messa in crisi**
  - Si mettono in evidenza i limiti di molte rappresentazioni della struttura in chimica organica

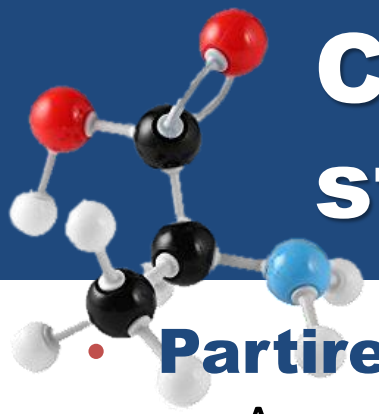




L’isomeria strutturale

- **La trattazione dell’isomeria strutturale si presta molto bene all’impiego dei modelli molecolari**
  - Le differenze risultano immediatamente evidenti
  - Si evitano facilmente errori di nomenclatura IUPAC (es. «3-metilbutano»)
  - La simmetria molecolare viene immediatamente compresa (es. neopentano)



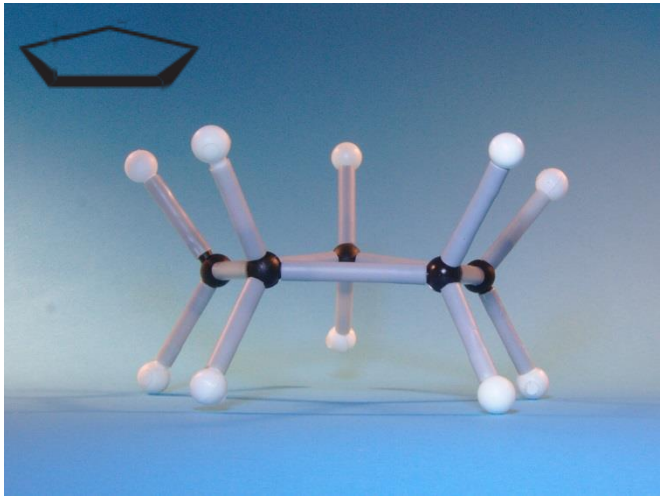


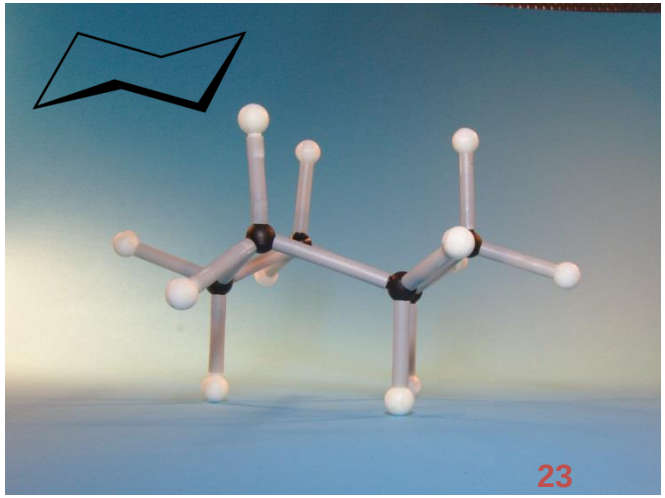
Costruire gli isomeri strutturali degli alcani

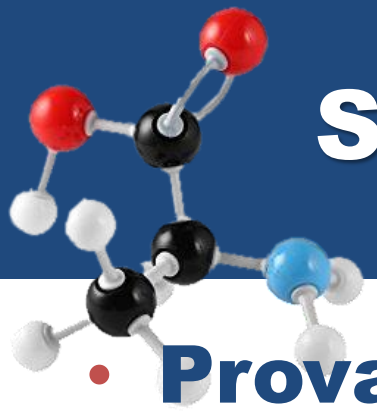
- **Partire dalle strutture lineari dei termini C4-C7**
  - Accorciare la catena rimuovendo prima un carbonio, poi due, ecc. e verificare quanti isomeri si posso costruire per ogni caso
  - Si apprezza subito come il numero degli isomeri aumenta in moto vertiginoso
    - Impiegare software di calcolo per stimarli (es. http://www.mathe2.uni-bayreuth.de/sascha/oeis/alkane.html)
  - La necessità della nomenclatura IUPAC diviene subito evidente
- **Ripetere il procedimento con un gruppo sostituente (es. cloro)**
  - Si nota subito come il numero degli isomeri diviene ancora più grande
  - Per il semplice cloropentano esistono ben otto isomeri

Strutture cicliche

- **La rappresentazione bidimensionale delle strutture cicliche risulta spesso fuorviante**
  - Mostrando i cicli sempre planari
- **La rappresentazione tridimensionale supera questo limite**
  - Planarità e non planarità
  - Distinzione fra conformeri a barca e a sedia
  - Distinzione fra posizioni equatoriali e assiali





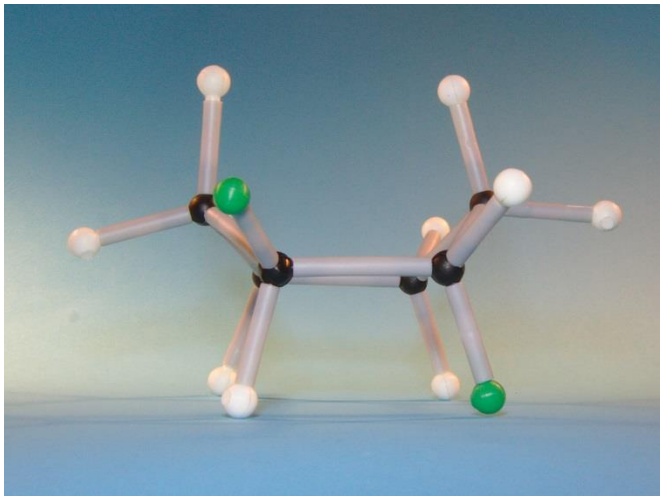


Struttura e stabilità

- **Provare a costruire una serie di cicloalcani**
  - I vincoli geometri impediscono la costruzione di termini troppo piccoli (C3, C4) o troppo grandi (C7, C8, …)
  - Le tensioni di anello sono alla base della ubiquità delle strutture con anelli a cinque o sei termini e le relative strutture policicliche condensate

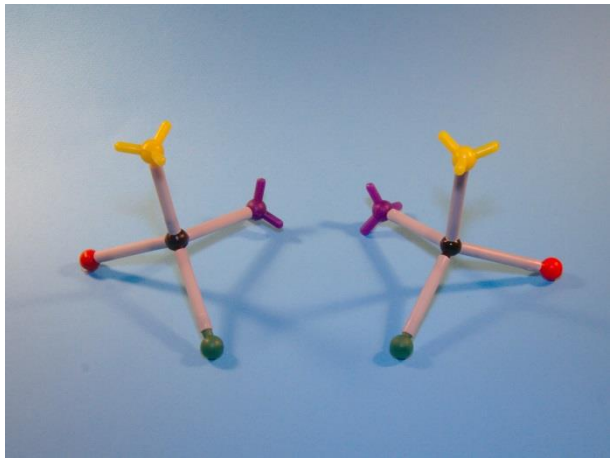
Stereoisomeria

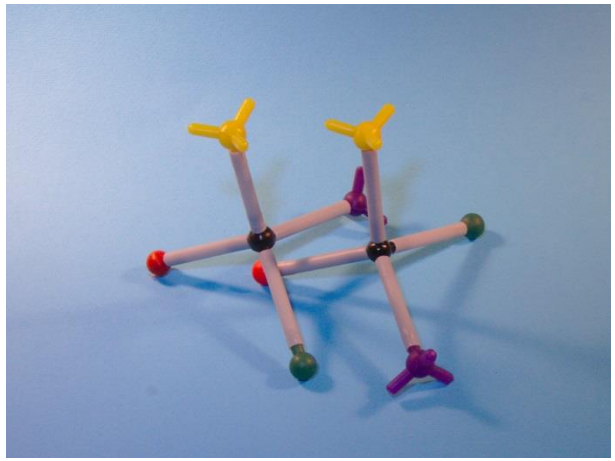
- **Il modello tridimensionale permette di apprezzare facilmente la stereoisomeria**
  - Stessa connettività ma diversa disposizione spaziale
  - L'isomeria cis trans ne è un classico esempio

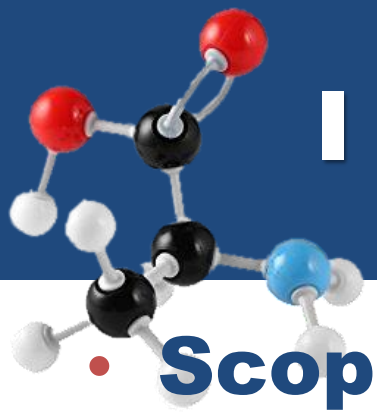


Enantiomeria

- **L'enantiomeria è uno dei casi di stereosiomeria più complessi**
  - Manipolando i modelli molecolari è possibile apprezzare facilmente la differenza fra due enantiomeri
  - Ed assegnare la corretta nomenclatura R-S





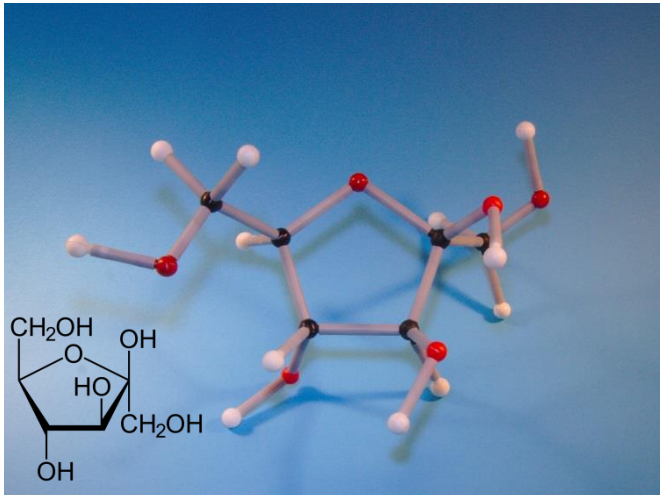


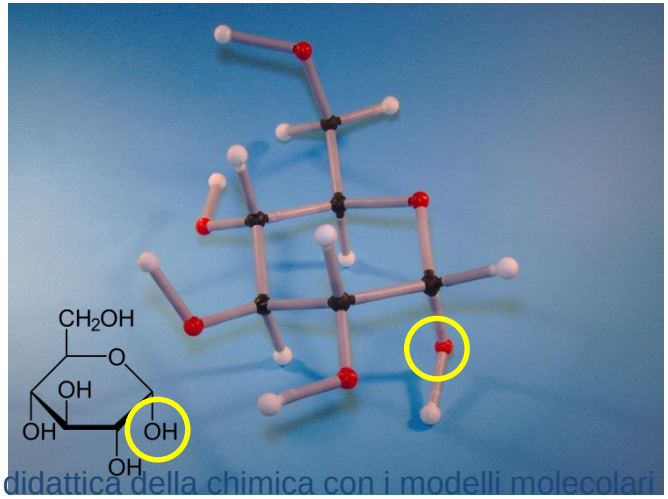
I carboni chirali

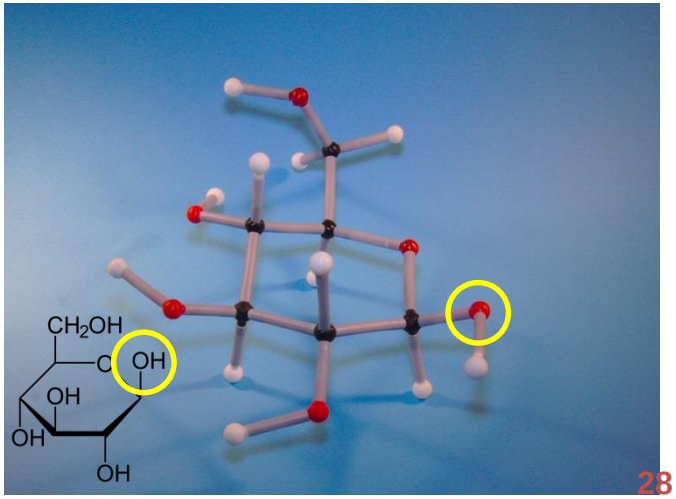
- **Scoperta della chiralità**
  - Far costruire a più gruppi di studenti copie di una semplice molecola chirale e farle confrontare fra loro
- **Le condizioni per la chiralità**
  - Sostituire uno alla volta gli idrogeni di un metano con gruppi sostituenti a scelta
  - Osservare per quali casi nasce un centro chirale
- **Connettere più centri chirali per scoprire la diasteroisomeria**

I glucidi

- **Le strutture dei glucidi possono essere facilmente delucidate e memorizzate**
  - Posizione degli ossidrili per distinguere i diversi aldosi/esosi
  - Piranosici e furanosici
  - Anomerismo







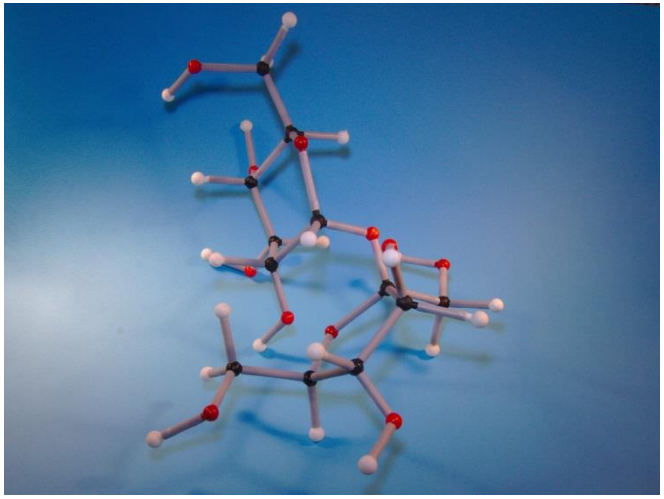
Struttura e numero degli stereoisomeri

- **Costruire la serie degli aldoesosi e scoprire quanti stereoisomeri si ottengono**
  - Confrontare con i chetoesosi
- **Associare le strutture tridimensionali alle rispettive proiezioni di Fisher e di Haworth**

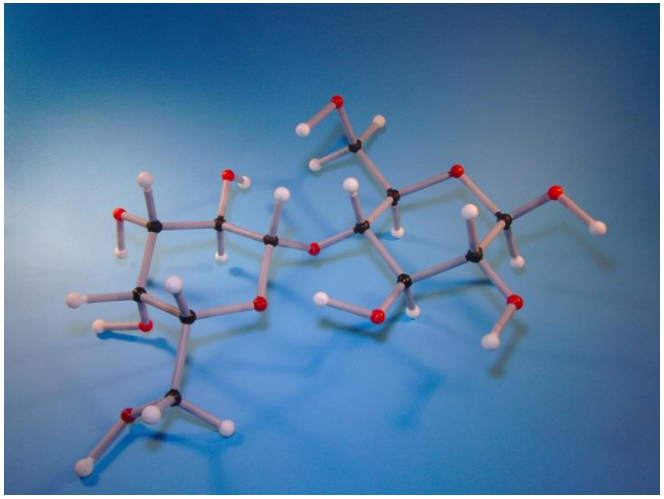
Dalla struttura alla reattività

- **La natura del legame glicosidico permette di ricavare informazioni sulla reattività**
  - Zuccheri riducenti e zuccheri non riducenti
  - Dimostrazione con il saggio di Tollens

Saccarosio: legame α-1,2-glicosidico
Non riducente

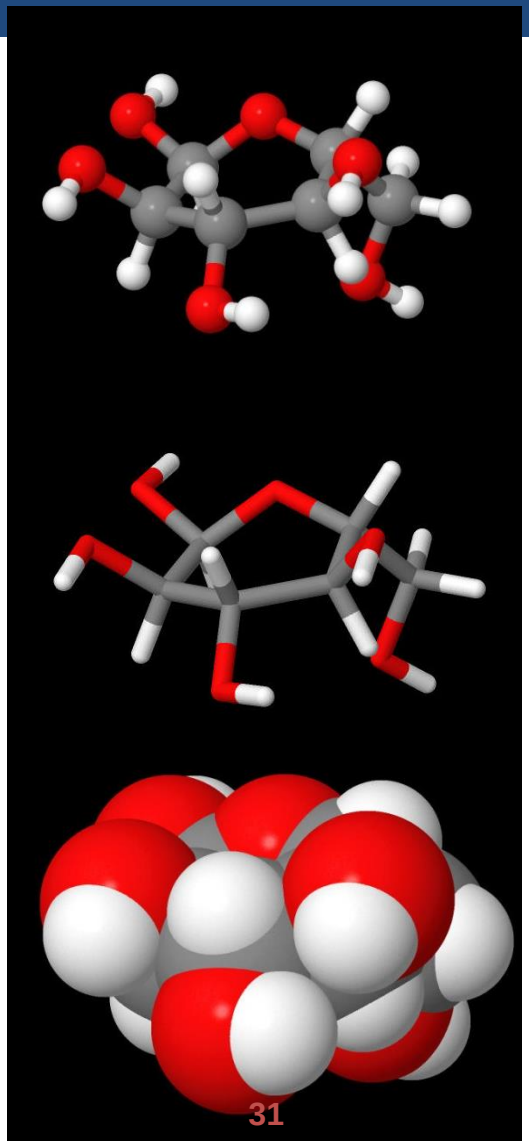


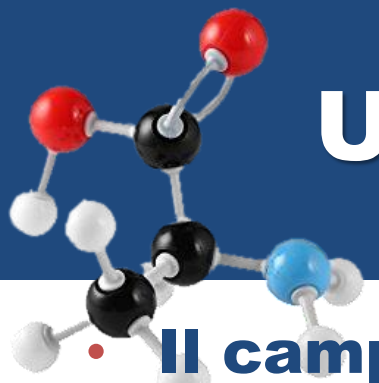
Maltosio: legame β-1,4-glicosidico
Riducente



Modelli digitali

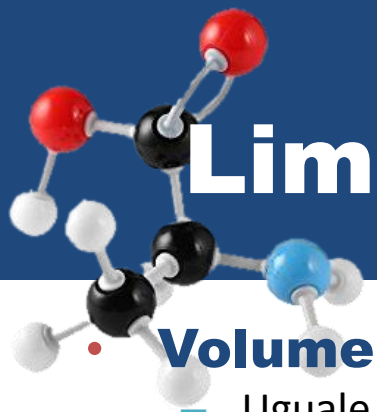
- **Trasferiscono in digitale la descrizione del modello fisico**
- **Vantaggi**
  - Praticità: permettono di visualizzare facilmente strutture complesse (es. proteine)
  - Flessibilità: è possibile impiegare diversi stili di rappresentazione, anche in modo misto
  - Economicità: software e database liberamente disponibili
    - Ma non sempre
- **Svantaggi**
  - Comunque una rappresentazione 2D
    - Mitigata da rappresentazioni immersive tramite anaglifi
  - Impegno cognitivo iniziale maggiore
  - A parità di risultati richiedono un tempo di interazione maggiore
- **L'ideale è un impiego complementare**
  - Cominciare con i modelli fisici per poi passare a quelli digitali quando utile o necessario





Un mondo vastissimo

- **Il campo dei modelli digitali è estremamente ricco e variegato**
  - Molte opportunità di scelta, che comportano anche una maggiore richiesta di valutazione e discernimento
  - Spesso si tratta di applicazioni pensate per la ricerca piuttosto che la didattica
- **Molti software sono liberamente disponibili in rete**
  - Avogadro, pymol, jmol, openrasmol, ecc.
  - Pirhadi, S.; Sunseri, J.; Koes, D.R.; *J. Mol. Graphics and Modelling*, 2016, **68**, 127
- **Esistono numerose raccolte di modelli digitali liberamente scaricabili**
  - ChemSpider, PubChem, RCSB PDB, ecc.



Limiti dei modelli molecolari

- **Volume atomico**
  - Uguale in tutti i casi e lontano da un valore realistico
  - Superato nei modelli digitali
- **Distanza di legame**
  - Uguale in tutti i casi
  - Alcuni kit possiedono legami di diversa lunghezza
- **Ordine di legame**
  - Rappresentazione artificiosa e/o fuorviante del doppio legame
  - Impossibilità di mostrare legami di ordine intermedio
- **Risonanza**
  - Problema di base nella rappresentazione
- **Doppietti liberi**
  - Rappresentati solo in alcuni kit
- **Polarità**
  - Nessuna informazione a parte quella della elettronegatività dei singoli atomi
- **Coordinazione e valenze superiori**
  - Sono pensati essenzialmente per la chimica organica di base
- **Lentezza di costruzione**
  - Ma questo può essere un vantaggio per l'apprendimento, a volte