



UNIVERSIDAD METROPOLITANA DE CIENCIAS DE LA EDUCACIÓN

FACULTAD DE CIENCIAS BÁSICAS - DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Diseño de un módulo de aprendizaje de modelación QSAR, para predecir actividad ambiental de contaminantes antropogénicos, en el marco de la educación para el desarrollo sostenible.

TESINA PARA OPTAR AL GRADO DE LICENCIADO EN EDUCACIÓN EN QUÍMICA Y AL TÍTULO DE PROFESOR DE QUÍMICA CON MENCIÓN EN TECNOLOGÍA.

Autor: Kevin Olivares Azola

Profesora Guía: Dr. Jorge Rodríguez Becerra

Profesora Co - Guía: Lizethly Cáceres-Jensen

La presente Tesis contó con el apoyo financiero del proyecto

FONDECYT – 1221942

SANTIAGO DE CHILE 2024

IDENTIFICACIÓN DE TESIS/INVESTIGACIÓN

Título de la tesis: Diseño de un módulo de aprendizaje de modelación QSAR, para predecir actividad ambiental de contaminantes antropogénicos, en el marco de la educación para el desarrollo sostenible.

Fecha: Abril 2024

Facultad: Ciencias Básicas

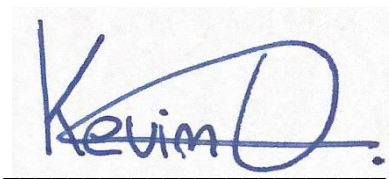
Departamento: Química

Carrera: Licenciatura en Educación en Química y Pedagogía en Química con mención Educación en Tecnología

Título y/o grado: Profesor de Química con Mención Educación Tecnológica

Profesor guía: Prof. Dr. Jorge Rodríguez Becerra

AUTORIZACIÓN: Autorizo a través de este documento, la reproducción total o parcial de este trabajo de investigación para fines académicos, su alojamiento y publicación en el repositorio institucional SIBUMCE del Sistema de Biblioteca UMCE.



Kevin Camilo Olivares Azola

Santiago de Chile, abril 2024

Agradecimientos

A mi familia, mis padres César Olivares y Patricia Azola, quienes han sido un pilar fundamental en todo ámbito de mi vida, siempre apoyándome incluso desde lo lejos que se encuentran. A Javiera Díaz, mi compañera incondicional, con quien comparto mi vida, sueños, alegrías, tristezas y triunfos. A mis gatas Kika y Rita, que alegran mis días con sus travesuras y cariños. A mis abuelos Gladis Astorga y Raúl Azola (QEPD), quienes siempre me demuestran y demostraron su cariño a pesar de la distancia y mis suegros Sra. Encarnación y Don Mario, quienes me han acogido como uno más de la familia.

A mis amigos y compañeros de universidad, que sin duda la vida universitaria no hubiera sido la misma sin ellos: Yuyo, Daniela, Marcela, Pino, Camila, Javier, Pauli y todos quienes siempre me apoyaron, daban ánimos y pasamos gratos momentos.

A mis profesores, quienes siempre se empeñaron en enseñarnos de formas novedosas incluso los ramos más disciplinares, en especial a los profesores Carlos Garrido, Jorge Rodríguez y Víctor Bahamonde, quienes son mi ejemplo de lo que quiero llegar a ser.

A mi profesor guía Dr. Jorge Rodríguez, quien a pesar de lo ocupado que esté, siempre tiene un tiempo para resolver cualquier tipo de inquietud y se empeñó en ayudarme a seguir adelante. Junto a él, a su esposa Dra. Lizethly Cáceres, quien siempre me acogió de buena forma en el laboratorio, así mismo a todo el maravilloso equipo de PACHEM Lab, quienes me ayudaron en todo este proceso.

Finalmente, al Fondo Nacional de Desarrollo Científico y Tecnológico, FONDECYT, por su ayuda económica en la realización de este trabajo.

Índice

1. Resumen	1
2. Abstract	2
3. Introducción	3
3.1 Conocimiento Tecnológico Pedagógico de las Ciencias	4
3.2 La computación científica y la educación en quimioinformática	6
3.3 Quimioinformática y modelamiento QSAR	8
3.3.1 Definir un <i>endpoint</i>	8
3.3.2 Algoritmo inequívoco	8
3.3.3 Dominio de aplicación definido.....	9
3.3.4 Medidas adecuadas de buen ajuste, robustez y predictividad.....	9
3.3.5 Interpretación mecanicista.....	9
3.4 Modelamiento QSAR en sistemas ambientales: predicción adsorción de herbicidas en suelos agrícolas	10
3.4.1 Recopilación de conjunto de datos.....	11
3.4.2 Generación de conformaciones tridimensionales.....	11
3.4.3 Definición de las reglas de alineación	11
3.4.4 Cálculo de campos de interacción (MIF).	11
3.4.5 Generación de modelos.....	11
3.4.6 Validación del modelo.....	11
3.4.7 Interpretación gráfica.....	12
4. Objetivos	14
4.1 Objetivo General	14
4.2 Objetivos Específicos	14
5. Metodología y métodos.....	15
5.1 Criterios de selección: primer cribado.....	15
5.2 Criterios de selección: segundo cribado.....	16

6. Resultados y discusión	17
6.1 Selección de artículos	17
6.2 Bases curriculares y estándares de formación docente	18
6.3 Selección de un modelo reproducible	32
6.4 Programa <i>Chemoface</i>	33
6.5 Lineamientos para un módulo	34
6.5.1 Etapas de un ABP.....	34
6.5.2 Situación problema.....	35
7. Conclusión	37
8. Referencias	38
9. Anexos	44
9.1 Anexo 1	44
9.2 Anexo 2	45
9.3 Anexo 3	51

1. Resumen

La educación científica ha visto grandes avances en los últimos años, permitiendo al profesorado poder avanzar los contenidos disciplinares de diversas maneras. Sin embargo, la tecnología avanza igual de veloz, pero los docentes de ciencias suelen quedarse atrás con el uso de estas tecnologías. Para ello es necesario darles las herramientas necesarias para abordar la educación de estos tiempos y poder afrontarlo de manera eficaz.

El objetivo de esta investigación se centra en dar lineamientos para la creación de un módulo de aprendizaje de modelamiento QSAR (*Quantitative Structure–Activity Relationships*) por medio del método TPASK (*Technological Pedagogical Science Knowledge*) y que pueda ser trabajado usando la metodología de Aprendizaje Basado en Problemas. Este trabajo consideró el método PRISMA (*Preferred Reporting Items for Systematic reviews and Meta-Analyses*) para realizar una revisión sistemática de artículos científicos que se asociaran a la temática por tratar a través de. Esta revisión permite considerar el estado del arte de la investigación, dando cuenta los bajos antecedentes que existen sobre la educación en QSAR. En este respecto, se consultó la base de datos *Web of Science*, empleando las siguientes palabras claves: “*QSAR Model*”, “*cheminformatic*”, “*sorption*” “*herbicides*” y “*software*”. Como resultado se obtuvo un total de 34 artículos, lo cuales fueron analizados, y sometidos a un proceso de cribado.

El proceso de cribado consideró descartar i) los artículos publicados en formato diferente al *open-access*, ii) los artículos que no contemplan el modelamiento QSAR y iii) los artículos que no trataran con sobre temáticas de suelos. Posteriormente, un segundo proceso de cribado contempló: i) inaccesibilidad a los datos brutos empleados en el artículo, ii) softwares no liberados o de pago, iii) dificultad para la instalación de programas o software empleado en la investigación, y iv) lenguaje computacional avanzado. Finalmente, se selección el artículo: “*Three-Parameter Modeling of the Soil Sorption of Acetanilide and Triazine Herbicide Derivatives*” como documento base para definir lineamientos para la creación de un módulo de aprendizaje.

Finalmente, los lineamientos obtenidos son el uso del programa *Chemoface* como base del módulo a crear, así mismo el sustento teórico y contextualización de la situación problema medioambiental para poder alinearse con la metodología ABP.

2. Abstract

Science education has seen great advances in recent years, allowing teachers to advance disciplinary content in a variety of ways. However, technology is advancing just as fast, but science teachers are often left behind with the use of these technologies. For this reason, it is necessary to give them the necessary tools to deal with the education of these times and to be able to face it effectively.

The objective of this research focuses on providing guidelines for the creation of a QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationships) modeling learning module by means of the TPASK (Technological Pedagogical Science Knowledge) method and that can be worked using the Problem Based Learning methodology. This work considered the PRISMA method (Preferred Reporting Items for Systematic reviews and Meta-Analyses) to carry out a systematic review of scientific articles associated with the topic to be addressed through. This review made it possible to consider the state of the art of research, taking into account the limited background on QSAR education. In this regard, the Web of Science database was consulted, using the following keywords: "QSAR Model", "cheminformatic", "sorption", "herbicides" and "software". As a result, a total of 34 articles were obtained, which were analyzed and subjected to a screening process.

The screening process considered discarding i) articles published in a format other than open-access, ii) articles that did not include QSAR modeling, and iii) articles that did not deal with soil issues. Subsequently, a second screening process considered: i) inaccessibility of the raw data used in the article, ii) non-released or paid software, iii) difficulty in installing programs or software used in the research, and iv) advanced computational language. Finally, the article "Three-Parameter Modeling of the Soil Sorption of Acetanilide and Triazine Herbicide Derivatives" was selected as a base document to define guidelines for the creation of a learning module.

Finally, the guidelines obtained are the use of the Chemoface program as the basis of the module to be created, as well as the theoretical support and contextualization of the environmental problem situation in order to align with the PBL methodology.

3. Introducción

En la actualidad el uso de tecnologías ha ido evolucionando velozmente, esto nos ha permitido facilitar, en el caso de los profesores, la enseñanza de las ciencias. Uno de los ejemplos más claros es el modelamiento de átomos o incluso moléculas, esto nos permite predecir ciertas funciones, así como es en la industria farmacéutica.

Ante ello, la formación de profesores en el área de las ciencias, específicamente química, es esencial para que puedan comprender las funciones fisicoquímicas de las estructuras moleculares y así tener la capacidad de predecir actividad biológica a través de descriptores moleculares, cuya calidad de predicción dependerá de la calidad de los datos empleados en el modelamiento molecular.

Las herramientas y animaciones 3DMV mejoran la comprensión conceptual y las capacidades espaciales de los estudiantes. El desarrollo de representaciones visuales favorece la comunicación relacionada con la química, lo que beneficia notablemente el aprendizaje y la enseñanza de la química. En este sentido, el 3DMV mejora la comprensión de algunos fenómenos químicos de alta abstracción y, al mismo tiempo, promueve la adquisición de imágenes mentales dinámicas de los procesos moleculares, ayudando a comprender mejor la estructura molecular y la reactividad química (Rodríguez-Becerra, 2020). Siendo QSAR (*Quantitative structure-activity relationship*) los modelos utilizados con mayor frecuencia.

Desde una perspectiva algo diferente, es decir, la de las últimas reflexiones sobre los enfoques más eficaces de la educación, esta combinación del uso de la tecnología con un enfoque socioconstructivista brinda a los estudiantes la oportunidad de beneficiarse de un verdadero aprendizaje práctico. El plan de estudios combina clases interactivas y herramientas de interacción técnica que les implican en la construcción de un producto científico. Se instancian así el llamado enfoque de aprendizaje trilogico (TLA) y el logro del conocimiento considerado como construcción mediada por artefactos culturales y sociales e implementada a nivel interpersonal, a través de la comunicación e interacción con pares y expertos (Ragno, 2020). Ante ello, la urgencia para una buena formación de nuestros profesores urge no solo en lo pedagógico y disciplinar, sino que también en el uso y manejo de estas tecnologías que han llegado para quedarse, especialmente la quimioinformática. Esto a su vez se desarrolla en el marco del conocimiento tecnológico

pedagógico de las ciencias, el cual permite una preparación más idónea para el profesorado de ciencias en formación.

3.1 Conocimiento Tecnológico Pedagógico de las Ciencias

El Conocimiento Tecnológico Pedagógico del Contenido (TPACK, por su sigla en inglés) se ha posicionado como un modelo de alto impacto en la formación del profesorado en cuanto a sus conocimientos tecnológicos, pedagógicos y de contenido en diferentes campos de formación del profesorado (Chai et al., 2018; Deng et al., 2017; Harris et al., 2017; Koehler et al., 2015; Koh, 2018; Niess, 2018; Willermark, 2018). Para el caso de la formación del profesorado de ciencias, una reciente revisión de literatura relacionada con el diseño e implementación de actividades prácticas de investigación basada en la indagación plantea que los desafíos detectados están vinculados a brechas en varios aspectos de las competencias docentes en el marco de TPACK (Akuma & Callaghan, 2019). Si consideramos, los avances en esta temática en los últimos tres años, es posible encontrar evidencia en la formación del profesorado de química (Bohloko et al., 2019; Cáceres-Jensen, Rodríguez-Becerra, Jorquera-Moreno, et al., 2021; Carpendale et al., 2020; Cetin-Dindar et al., 2018; Rap et al., 2020; Rodríguez-Becerra, Cáceres-Jensen, Díaz, et al., 2020; Zimmermann et al., 2021) y de biología (Dorfman et al., 2019; Gonzales, 2018; Irdalisa et al., 2020; Sebastian-Lopez & Gonzalez, 2020). Sin embargo, de la revisión realizada, en bases de datos como *Web of Science* (WoS) y *Scopus*, por nuestro equipo de investigación para el proyecto “Computación Científica en la formación inicial del profesorado de ciencias: desarrollo del pensamiento computacional en el marco del Conocimiento Tecnológico Pedagógico de las Ciencias” —Fondecyt 1221942—, en el cual se inserta esta tesina, se desprende que existen pocas investigaciones sobre el desarrollo del TPACK en docentes pre-servicio del área de ciencias en sus diferentes disciplinas.

Con el objeto de representar lo que el profesorado de ciencias necesita saber sobre tecnología para realizar una práctica docente en ciencias, integrando de forma adecuada la tecnología, Jimoyiannis (2010) propone el Conocimiento Tecnológico Pedagógico de las Ciencias (TPASK por su sigla en inglés) como una adaptación del modelo TPACK y lo define como un tipo de conocimiento propio del profesorado de ciencia, diferente del conocimiento de un experto disciplinario (un físico, químico o biólogo), o un experto en tecnología, e incluso del conocimiento pedagógico general compartido por el profesorado de otras disciplinas. Con base en las investigaciones y experiencia en la Formación Inicial

Docente (FID) del profesorado de ciencias del grupo de investigación del cual participo, es que apoyamos la perspectiva de que TPASK debe entenderse como un cuerpo de conocimiento distinto, que puede ser desarrollado desde un modelo integrativo (Rodríguez-Becerra & Cáceres-Jensen, 2023). En el marco TPASK propuesto por Jimoyiannis (2010) son siete las áreas de conocimiento que se derivan, algunas de las cuales han sido adaptadas por Cáceres-Jensen, Rodríguez-Becerra, Jorquera-Moreno, et al. (2021) y Rodríguez-Becerra, Cáceres-Jensen, Díaz, et al. (2020), a saber:

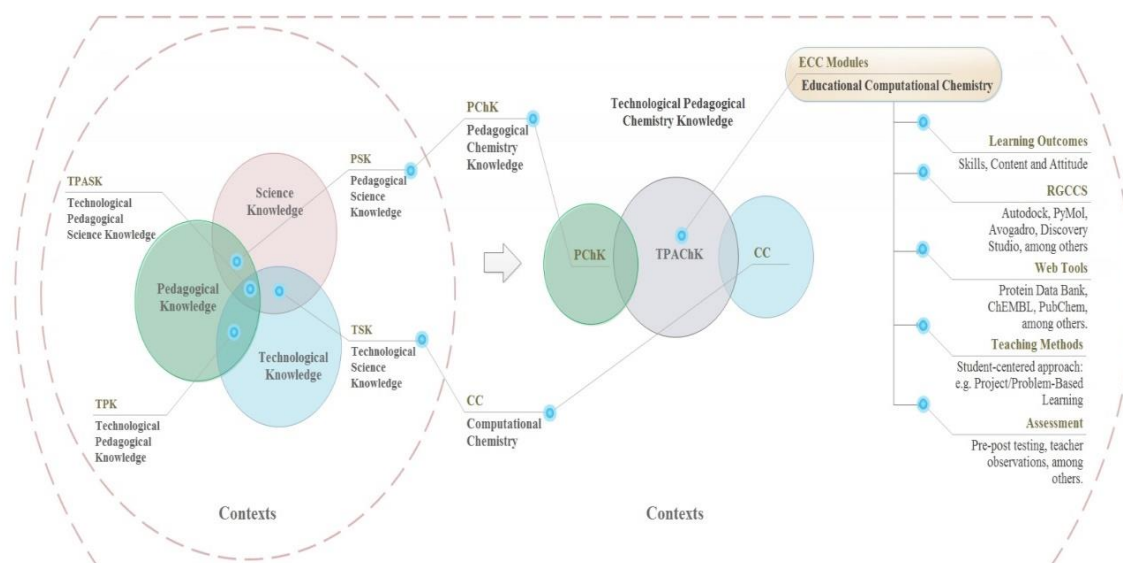
1. Conocimiento Tecnológico, es el conocimiento sobre cómo usar las tecnologías emergentes en un dominio científico específico.
2. Conocimiento de las Ciencias, este conocimiento representa la comprensión de modelos, protocolos, prácticas y productos de la comunidad científica en el área de las ciencias (Cáceres-Jensen, Rodríguez-Becerra, Jorquera-Moreno, et al., 2021).
3. Conocimiento Pedagógico, es el conocimiento genérico sobre aprendizaje y enseñanza.
4. Conocimiento Pedagógico de las Ciencias, este conocimiento representa la comprensión de modelos, protocolos, prácticas y productos del área de las ciencias, incluidos en la educación científica y cómo se pueden usar para implementar entornos que promuevan el aprendizaje de los estudiantes. Además, incluye la comprensión de la construcción del conocimiento científico de estudiantes en contextos de enseñanza (Cáceres-Jensen, Rodríguez-Becerra, Jorquera-Moreno, et al., 2021).
5. Conocimiento Tecnológico de las Ciencias (CTC), este conocimiento representa el conocimiento de cómo usar modelos y simulaciones para representar y aplicar conceptos científicos usando tecnología emergente, por ej. la vinculada a la CSc. (Rodríguez-Becerra, Cáceres-Jensen, Díaz, et al., 2020).
6. Conocimiento Tecnológico Pedagógico (CTP), es el conocimiento sobre las posibilidades y desafíos que implican las diferentes formas de enseñar y aprender.
7. Conocimiento Tecnológico Pedagógico de las Ciencias (TPASK) es la comprensión sobre cómo usar la tecnología emergente de las ciencias para implementar entornos de aprendizaje que promuevan el aprendizaje de las

ciencias en los estudiantes (Rodríguez-Becerra, Cáceres-Jensen, Díaz, et al., 2020).

La Figura 1 muestra la representación esquemática del TPASK como una adaptación de la interpretación del marco TPACK propuesto por Cox and Graham (2009). En concordancia con estos autores, nuestro grupo de investigación sostiene que una determinada secuencia de desarrollo de TPASK, puede considerar, en una etapa inicial, el desarrollo de CTC como un conocimiento independiente de sus proyecciones a contextos pedagógicos, dado que su construcción está directamente relacionada con el desarrollo tecnológico en el área de las ciencias (Rodríguez-Becerra & Cáceres-Jensen, 2023). Así mismo, el TPASK también se refiere a la comprensión de modelos, protocolos y prácticas de la ciencia computacional como herramienta pedagógica y cómo estas pueden implementarse en entornos que promueven el aprendizaje en los estudiantes (Rodríguez-Becerra, Cáceres-Jensen, Díaz, et al., 2020).

Figura 1

Representación de diagramas de Venn para TPASK como un constructo integrativo e interdisciplinario.



Nota. Diagrama tomado de Rodríguez-Becerra, Cáceres-Jensen, Díaz, et al. (2020).

3.2 La computación científica y la educación en quimioinformática

La computación científica es un área que se considera relativamente antigua, ya que data de la década del 50. Sin embargo, aún queda mucho por explorar, debido a las grandes posibilidades que se presentan día a día, no solo en el ámbito disciplinar sino que

también en lo pedagógico. El desarrollo de las tecnologías ha permitido a los científicos poder hacer trabajos mucho más preparados en el ámbito disciplinar, lo cual hace unos años era impensado, hoy en día es una realidad gracias a los avances de la química computacional y quimioinformática. Ésta trata de un campo aplicado a la química que combina teoría, modelamiento molecular, ciencias de la computación y métodos estadísticos que de éstas se desprenden (Hernández-Ramos et al., 2021). El objetivo principal de la quimioinformática es dar soluciones para manejar información química a través de computadoras. También busca potenciar el desarrollo tecnológico en el área de la química, ayudando así, por ejemplo, a modelar moléculas. Ante ello, es que los futuros docentes de química estén capacitados para el manejo de este campo que se desarrolla día a día. A pesar de que esta área se observe como una mejora reciente, lleva aproximadamente 70 años desde su desarrollo inicial. Sin embargo, es un campo que aún le queda mucho por descubrir, debido a que, si bien se utiliza mucho en la disciplina como en el área farmacéutica y en el último tiempo en el campo medioambiental, en el área de FID es casi nula su participación.

La información química se comunica a través de una expresión de lenguaje químico, el que ayuda a contribuir y relacionar las distintas áreas con las que se trabaja, específicamente en la enseñanza STEM (Science Technology Engineering Mathematics). En este sentido, la quimioinformática es un campo multidisciplinario que ofrece múltiples posibilidades en la educación STEM vista desde la integración de diversas asignaturas (Perna, 2022).

La estrecha relación con la educación STEM, tiene como enfoque aportar intereses a los alumnos en el aula, llevando esto al aula, se puede desarrollar por medio de laboratorios, aprendizaje basado en problemas o prácticos que sean más visuales para los profesores de química en formación. No obstante, un problema recurrente en la educación en STEM es la falta de tiempo para los prácticos mencionados, ya que generalmente los docentes se quedan con las clases teóricas dificultando la comprensión para los jóvenes estudiantes. (Levine et al., 2015).

Sin embargo, la utilización del enfoque STEM permite desarrollar el manejo de tecnologías y matemáticas, siendo fundamentales en el área de las ciencias. Una de las herramientas que ayuda a que los profesores de química en formación puedan tener una mejor preparación es el modelamiento QSAR.

3.3 Quimioinformática y modelamiento QSAR

La quimioinformática permite no solo a los científicos a estar mejores preparados para poder enfrentar situaciones complejas ante sus experiencias, sino que también debe ser una herramienta que ayude a los futuros profesores de esta área, sin embargo, existen variadas opciones para poder contribuir a los estudiantes de una enseñanza de las tecnologías.

Una de las mayores dificultades que se han presentado en los jóvenes es dimensionar el espacio que ocupan estas moléculas. Esto se debe a que una de las grandes problemáticas que presentan los estudiantes es la necesidad de realizar diversas tareas espaciales y visualizar la tridimensionalidad de las moléculas, la cuales en libros se representan como bidimensionales. En química, como en muchas otras áreas científicas, la visualización tridimensional es una habilidad importante. Los estudiantes que carecen de esta capacidad suelen tener problemas para desarrollar su comprensión de los temas que la requieren. Esta habilidad, denominada "capacidad espacial", consiste en representar, rotar e invertir objetos en 3D cuando se presentan gráficamente en 2D (Barnea, 2000).

El modelado QSAR es una técnica útil para predecir la actividad de sustancias químicas, como pesticidas en poco tiempo y con bajo costo, estableciendo una estadística relación entre la actividad de las sustancias químicas y sus propiedades estructurales y fisicoquímicas (Jensen, 2018). Así mismo, en un marco regulatorio, la OCDE (Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económicos) estableció cinco puntos para la validación de los modelos QSAR:

3.3.1 Definir un *endpoint*

El *endpoint* se refiere a cualquier propiedad fisicoquímica, biológica o ambiental. Éste es predicho por un modelo dado, ya que un punto final podría ser determinado por diferentes protocolos experimentales y bajo diferentes condiciones experimentales.

3.3.2 Algoritmo inequívoco

La intención de este principio es garantizar la transparencia en la descripción del algoritmo del modelo para permitir una evaluación independiente reproducibilidad de sus predicciones.

3.3.3 Dominio de aplicación definido

Un modelo válido está asociado a un dominio de aplicabilidad (AD) definido. El AD de un modelo (Q)SAR, es el espacio de respuesta y estructura química en el que el modelo realiza predicciones con una determinada fiabilidad. La AD debe tener en cuenta los parámetros, estructural, mecanístico, metabólico y de respuesta del modelo. No obstante, el QAF ((Q)SAR Assessment Framework) no prescribe una forma específica de definir los elementos de evaluación de un modelo porque se pueden utilizar múltiples metodologías válidas.

3.3.4 Medidas adecuadas de buen ajuste, robustez y predictividad

Un (Q)SAR debe ir asociado a "medidas apropiadas de ajuste, robustez y predictividad". Este principio expresa la necesidad de proporcionar información sobre el ajuste y la solidez de un modelo (determinada mediante validación interna) y la predictividad de un modelo (determinada mediante validación externa). Los elementos de evaluación y el rendimiento de un modelo están relacionados. El rendimiento debe medirse dentro del ámbito de aplicabilidad definido por sus desarrolladores. Por lo general, se puede obtener un mayor rendimiento del modelo con una AD más reducida.

3.3.5 Interpretación mecanicista

Debe asociarse a una interpretación mecanicista, si es posible. Los métodos estadísticos utilizados para describir las relaciones entre la estructura química y la actividad no pretenden sustituir a otros conocimientos de química y toxicología cuando tales conocimientos existan. Los evaluadores pueden exigir que la documentación del modelo incluya consideraciones sobre cómo la justificación de un modelo (Q)SAR es coherente o tiene en cuenta los conocimientos relacionados con la propiedad predicha, es decir, una interpretación mecanicista. Las consideraciones toxicocinéticas también forman parte de la interpretación mecanicista, si son relevantes para la propiedad de interés (Schultz, 2018).

Posterior a la interpretación mecanicista, se debe considerar la ecuación que representa esta interpretación. El modelo QSAR para esta propuesta de lineamientos de modulo está representado en la siguiente ecuación:

$$K_{oc} = X * \log K_{ow} + Y * MW + Z * MV$$

Siendo $\log K_{ow}$, MW y MV los descriptores que guían esta propuesta de modulo. Además, cuyos valores están representados en la figura 16, en la sección de anexos.

Partes de las ventajas del modelamiento QSAR no solo es que permita visualizar el modelamiento de las moléculas, sino que también se puede utilizar para plantear problemáticas de carácter ambiental y de la vida real. Esto contribuye a que se puedan utilizar técnicas didácticas como el ABP, el cual es sabido que contribuye al aprendizaje de los estudiantes y permite considerar situaciones cotidianas.

3.4 Modelamiento QSAR en sistemas ambientales: predicción adsorción de herbicidas en suelos agrícolas

El diseño de este módulo permitirá preparar a futuros docentes de ciencias para que puedan abordar el pensamiento computacional e incluso aplicarlo en sus futuras carreras docentes.

El pensamiento computacional (PC) se considera necesario para todos y para la vida cotidiana en el nuevo siglo. Es la práctica o el proceso de pensamiento de aplicar conceptos fundamentales de la informática para resolver problemas. Más concretamente, incluye extraer información clave de los detalles concretos de un problema (abstracción), reformular un problema mayor en un conjunto de problemas más pequeños (descomposición), detectar los patrones incrustados en los datos, desarrollar y aplicar algoritmos, etc (Wang, 2022). En este proyecto se propone un prototipo de módulo de aprendizaje basado en problemas medioambientales auténticos —reales— a ser abordados desde el área del modelamiento QSAR, por medio de descriptores —moleculares o del suelo—. Se realizará en base a la adsorción de herbicidas en suelos.

En general, el proceso de adsorción de herbicidas en suelos agrícolas chilenos derivados de cenizas volcánicas, es un proceso de adsorción de no equilibrio (no equilibrio químico) siendo atribuido a un mecanismo de resistencias de transferencia de masa (MT) durante el proceso inicial de adsorción en ese tipo de suelo presentado, isothermas de adsorción no lineal (proceso de adsorción limitado de por la velocidad de adsorción), histéresis positiva (proceso de adsorción irreversible) (Cáceres-Jensen, Rodríguez-Becerra, Garrido, et al., 2021). El diseño de este módulo tiene el propósito de desarrollar conocimiento tecnológico pedagógico de la ciencia en el profesorado de química en formación, éste último concepto se abrevia con las siglas de TPASK, donde los profesores de ciencias desarrollan un conocimiento que "es diferente del conocimiento de un experto disciplinario (físico, químico o biólogo) o un experto en tecnología, y del conocimiento pedagógico general compartido por los profesores en todas las disciplinas",

de esta forma TPASK representa lo que los profesores de ciencias necesitan saber sobre las TIC en la enseñanza de las ciencias” (Rodríguez-Becerra, Cáceres-Jensen, Diaz, et al., 2020).

Por su parte, el modelado QSAR hace referencia a un conjunto de sustancias químicas estructuralmente relacionadas que desarrollan una correlación matemática entre una respuesta y los atributos químicos que definen las características de las moléculas analizadas. Por lo tanto, los modelos QSAR permiten establecer una función matemática que relaciona una actividad (biológica/ambiental/propiedad) con un conjunto de propiedades físicas y químicas que pueden extraerse de las estructuras químicas utilizando medios experimentales o computaciones adecuados.

Los pasos para realizar un modelamiento QSAR son los siguientes (Ragno et al., 2020):

- 3.4.1 Recopilación de conjunto de datos.** Se deben compilar los datos moleculares los cuales deben contener propiedades biológicas con actividades asociadas (respuestas). Se recomienda que las actividades biológicas, se expresen en concentraciones (IC50, EC50, Ki).
- 3.4.2 Generación de conformaciones tridimensionales.** El conjunto de datos generalmente se encuentra en formato SMILES, Necesario para generar las estructuras 2D o 3D.
- 3.4.3 Definición de las reglas de alineación.** El objetivo es superponer (alinear) cada una de las moléculas para identificar un modelo satisfactorio.
- 3.4.4 Cálculo de campos de interacción (MIF).** Las moléculas se colocan virtualmente una cuadrícula de dimensiones.
- 3.4.5 Generación de modelos.** En este punto se toman todos los datos necesarios para generar un modelo predictivo (por ej. Modelo de Regresión Lineal.). Esto se evalúa por medio el coeficiente de correlación que se expresa.

$$r^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_{\text{exp}_i} - y_{\text{calc}_i})^2}{\sum_{i=1}^n (y_{\text{exp}_i} - \bar{y})^2}$$

- 3.4.6 Validación del modelo.** El mejor modelo se selecciona por medio de:
 - *Robustez:* Validación cruzada que indica el modelo más robusto sobre la base de un coeficiente interno q^2 evaluado mediante la siguiente ecuación:

$$q^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_{\text{exp}_i} - y_{\text{pred}_i})^2}{\sum_{i=1}^n (y_{\text{exp}_i} - \bar{y})^2}$$

- *Falta de correlación casual.* Consiste en reasignar aleatoriamente las potencias experimentales a los compuestos.
- *Capacidad de predicción.* Para los casos de disponibilidad de moléculas externas a este conjunto de construcción de modelos, la práctica habitual de análisis de campo molecular comparativo (CoMFA) permite evaluar la capacidad predictiva de su modelo final, calculando el error de raíz cuadrada media (RMSE) por medio de la siguiente ecuación:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}{n}}$$

3.4.7 Interpretación gráfica. Por medio de la observación de los gráficos generados, se inspeccionan, describen y diseñan nuevas derivadas sobre la base de la observación de los gráficos superpuestos a las moléculas en el conjunto.

La denominación del estudio depende de la naturaleza de la respuesta (también conocida como "punto final") que se modela dando lugar a la relación cuantitativa estructura-propiedad/actividad/toxicidad (QSPR/QSAR/QSTR) que consideran la modelización de las propiedades fisicoquímicas y biológicas, respectivamente.

Se utilizarán los términos "QSAR" para designar todos estos estudios. Dado que se desarrolla una relación matemática, estos estudios permiten de comportamiento molecular de nuevas sustancias químicas o incluso de moléculas hipotéticas (Roy et al., 2015).

El diseño de este módulo será implementado en base al Aprendizaje Basado en Problemas/Proyectos, la metodología de ABP se ha posicionado para involucrar a los estudiantes en su proceso de aprendizaje y como estrategia para vincular situaciones del mundo real como punto de partida para la adquisición e integración de nuevos conocimientos.

A los estudiantes se le presenta un problema original y desafiante, que pueden ser semiestructurados o no estructurados antes de la instrucción. El trabajo se realiza entre los estudiantes, que asumen roles específicos dentro de cada equipo para resolver la situación propuesta. El ABP involucra a los estudiantes en un aprendizaje profundo, ya

que es constructivo, autodirigido, colaborativo y contextual. Existe una amplia evidencia de la eficacia de esta metodología. Según el autor Hernández-Ramos (2023) el problema sociocientífico en un escenario enriquecido con tecnología ABP es un elemento de diseño interesante para cursos de aprendizaje electrónico de ciencias orientados a docentes en servicio. Debido a que el ABP permite el desarrollo de competencias profesionales y contempla la calidad de aprendizaje (Sanabria & Riobueno, 2017). Esto se refleja mediante: i) la participación y motivación de los estudiantes, ii) el fomento del trabajo en grupo, iii) la resolución de problemas y el aprendizaje contextual. Así mismo, ayuda al pensamiento creativo, las habilidades de aprendizaje autorregulado, la autonomía, la autoevaluación, la creatividad, la colaboración, la síntesis, la comunicación, el desarrollo de habilidades útiles en el laboratorio como la recogida de datos y la extracción y análisis de muestras. (Hernández-Ramos et al., 2021).

4. Objetivos

4.1 Objetivo General

Proponer lineamientos para el diseño de un módulo de modelamiento QSAR que aborde el proceso de cinética de adsorción de herbicidas en suelos agrícolas para la formación inicial del profesorado de ciencias y estudiantes de tercero y cuarto medio de la educación media en Chile.

4.2 Objetivos Específicos

- Realizar una revisión sistemática de literatura científica en revistas de corriente principal indexadas en la base de datos WoS.
- Identificar oportunidades y desafíos en la enseñanza aprendizaje de las ciencias ambientales por medio de modelos QSAR.
- Seleccionar modelos QSAR de actividad ambiental pertinentes para diseñar una actividad de aprendizaje.

5. Metodología y métodos

Se realizó una búsqueda bibliográfica sistemática utilizando la base de datos de **Web of Science (WoS)**. Debido a que las revistas contenidas en los catálogos principales de esta base de datos son de reconocido impacto científico y pasan por rigurosos procesos de revisión de pares.

La búsqueda se realizó empleando el campo “*Topic*”, el cual contempla los subcampos: “*title*”, “*abstract*”, “*author keywords*”, and “*Keywords Plus*”. Para esto se utilizaron los tres catálogos principales de WoS, a saber: *Science Citation Index Expanded* (SCI-EXPANDED), *Social Sciences Citation Index* (SSCI), *Arts & Humanities Citation Index* (A&HCI). Si bien las palabras claves que se utilizaron podrían ser actualizadas, se estima que el proceso inicie con las siguientes: “*QSAR Model*”, “*cheminformatic*”, “*sorption*”, “*herbicides*” y “*software*”. Para considerar posibles variaciones de las palabras claves, se trabajó usando el símbolo “*”. La búsqueda bibliográfica se limitó a buscar artículos en español e inglés. Para la selección de publicaciones a utilizar se trabajó solamente con: artículos y revisiones científicas. El periodo de búsqueda, debido al rápido avance del campo, se focalizó en publicaciones entre el 1 de enero de 2012 hasta la fecha de cierre de búsqueda considerada en 31 de diciembre de 2023.

5.1 Criterios de selección: primer cribado

Se procedió a revisar los resúmenes, títulos y palabras claves con objeto de seleccionar investigaciones pertinentes a la pregunta de investigación y objetivos del trabajo a desarrollar, por ej. se consideró el tipo de acceso a los softwares, que los artículos den cuenta de los detalles computacionales empleados en el proceso de modelamiento o simulación, y pertinencia de los tópicos científicos implícitos en la problemática abordada por el artículo.

Para el proceso de revisión de los artículos en extenso, se consideró como criterio el poder conseguir los artículos mediante los canales o fuentes disponibles por nuestra institución y laboratorio de investigación.

5.2 Criterios de selección: segundo cribado

Se realizó un metaanálisis de los artículos seleccionados, considerando aspectos como: año de publicación, procedencia y características del estudio, autores, entre otros.

Una vez concluida la primera etapa se procedió a seleccionar una base de datos para el proceso de diseño de la secuencia de enseñanza-aprendizaje. Con ello, se continuó definiendo el *end-point*, el cual debió cumplir a lo menos con los siguientes criterios:

- Metodología de obtención del dato, reproducible y replicable.
- Debe dar cuenta de una actividad ambiental específica.
- Datos con amplia variabilidad, es esperable que posean tres o más ordenes de magnitud.

En la siguiente etapa, se identificarán *softwares* de licencia liberada o abierta. Además, se realizó una revisión de los requisitos de hardware necesarios para cada software seleccionado.

Finalmente, se procederá a establecer lineamientos de diseño de un módulo QSAR apto para profesores en formación de ciencias sobre la base de la evidencia científica acumulada.

6. Resultados y discusión

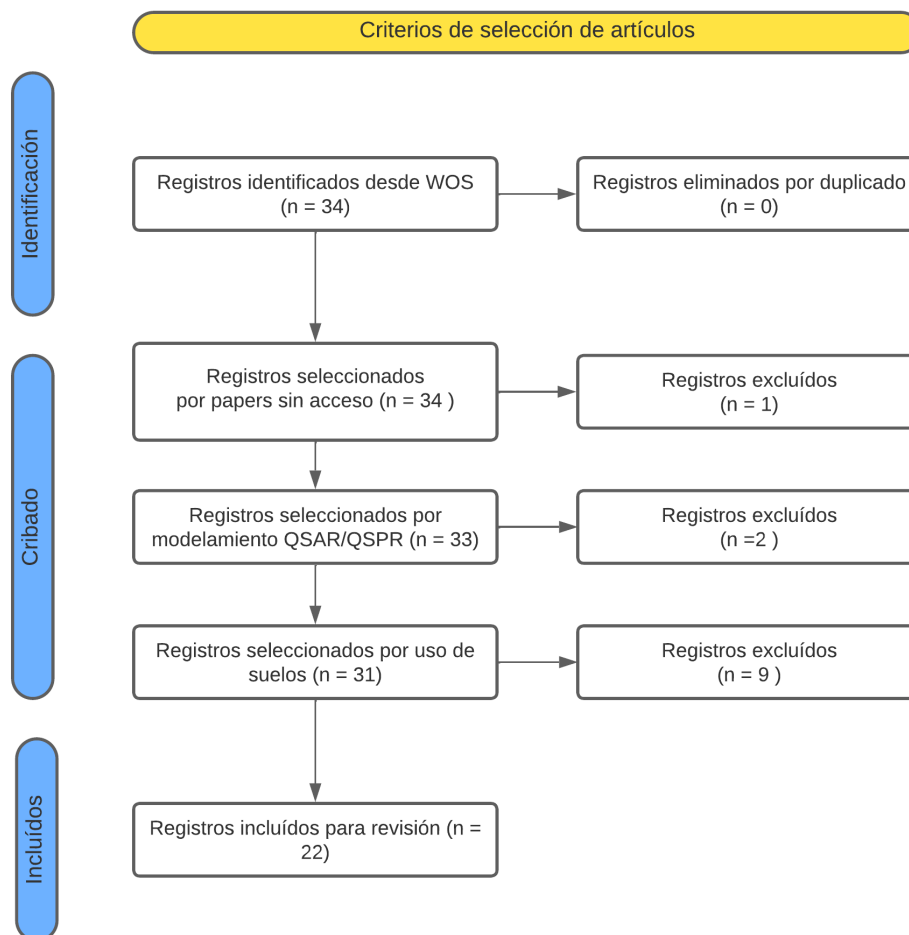
6.1 Selección de artículos

A través de la base de datos de WoS, el resultado obtenido por medio de las palabras claves utilizadas, arroja un total de 34 artículos. Con ellos se procede a realizar una base de datos en donde se describen los siguientes puntos para cada artículo: “*EndPoint*”, “QSAR”, “Suelo”, “Tipo de modelo matemático”, “Base de datos accesibles”, “Origen de base de datos”, “Tipos de descriptores moleculares” y “accesibilidad de los softwares a utilizar”. Ya definidos estos parámetros a analizar, se revisan los resúmenes de cada artículo para completar la base de datos realizada y reflejada en la Tabla 1 (anexos).

Dentro de la base de datos realizada, se procede con los filtros respectivos y que sean útiles para la generación de este módulo. Para ello, se determinó la duplicidad de los artículos dando un total de cero. Posteriormente, se excluyen los artículos sin un acceso liberado, donde se obtiene solo un artículo. Luego, se selecciona aquellos artículos que trabajen con modelamiento QSAR/QSPR, de estos, se excluyen solo dos. A continuación, se eliminan aquellos *artículos* que no trabajen con suelos, arrojando un total de nueve. Finalmente, para el análisis más exhaustivo, del total de 34 artículos obtenidos originalmente, se eliminan un total de 12, obteniendo así 22 *artículos* para su revisión en conjunto con el profesor guía Dr. Jorge Rodríguez-Becerra y la Dra. Lizethly Cáceres-Jensen. Este filtrado se refleja en el siguiente diagrama PRISMA.

Figura 2

Diagrama PRISMA de selección de artículos para análisis.



Nota. Formato extraído desde (Page et al., 2021).

6.2 Bases curriculares y estándares de formación docente

A través de la búsqueda de las bases curriculares de 3ro y 4to medio correspondientes a su última modificación en base al decreto supremo N°193/2019 (Biblioteca del Congreso Nacional, 2019), se obtienen los siguientes objetivos de aprendizajes basales en la Tabla 2 que pueden ser utilizados para acoplar los lineamientos del módulo por crear.

Tabla 2

Objetivos de aprendizaje basales 3ro y 4to medio.

Unidad	Objetivos de aprendizaje basales
Química Electivo	<p>OAB01: Evaluar el desarrollo del conocimiento científico y tecnológico en nanoquímica y química de polímeros, considerando sus aplicaciones y consecuencias en ámbitos tales como el ambiental, médico, agrícola e industrial.</p> <p>OAB04: Explicar efectos del cambio climático sobre los ciclos biogeoquímicos y los equilibrios químicos que ocurren en los océanos, la atmósfera, las aguas dulces y los suelos, así como sus consecuencias sobre el bienestar de las personas y el desarrollo sostenible.</p> <p>OAB05: Analizar el origen, las vías de exposición, los efectos y las propiedades de contaminantes químicos provenientes de actividades domésticas e industriales (como minería, agricultura y desarrollo urbano) sobre los sistemas naturales y los servicios ecosistémicos que estos brindan a las personas y a la sociedad.</p> <p>OAB06: Evaluar la contribución de la química y sus aplicaciones tecnológicas en el entendimiento, la prevención y mitigación de efectos derivados del cambio climático y la restauración de los sistemas naturales afectados.</p> <p>OAB07: Valorar la importancia de la integración de los conocimientos de la química con otras ciencias para el análisis y la propuesta de soluciones a problemas actuales, considerando las implicancias éticas, sociales y ambientales.</p>
Física Electivo	<p>OAB01: Analizar, con base en datos científicos actuales e históricos, el fenómeno del cambio climático global, considerando los patrones observados, sus causas probables, efectos actuales y posibles consecuencias futuras sobre la Tierra, los sistemas naturales y la sociedad.</p>

Unidad	Objetivos de aprendizaje basales
Matemáticas: Formación general	OAB02: Tomar decisiones en situaciones de incerteza que involucren el análisis de datos estadísticos con medidas de dispersión y probabilidades condicionales.
Matemáticas: Probabilidad y estadística	OAB02: Resolver problemas que involucren los conceptos de media muestral, desviación estándar, varianza, coeficiente de variación y correlación muestral entre dos variables, tanto de forma manuscrita como haciendo uso de herramientas tecnológicas digitales.
Matemáticas: Pensamiento computacional	OAB01: Aplicar conceptos de Ciencias de la Computación –abstracción, organización lógica de datos, análisis de soluciones alternativas y generalización– al crear el código de una solución computacional.
Biología: Biología de los Ecosistemas	OAB03: Explicar los efectos del cambio climático sobre la biodiversidad, la productividad biológica y la resiliencia de los ecosistemas, así como sus consecuencias sobre los recursos naturales, las personas y el desarrollo sostenible.
	OAB04: Investigar y comunicar cómo la sociedad, mediante la ciencia y la tecnología, puede prevenir, mitigar o reparar los efectos del cambio climático sobre los componentes y procesos biológicos de los sistemas naturales.

OAB05: Valorar la importancia de la integración de los conocimientos de la biología con otras ciencias para el análisis y la propuesta de soluciones a problemas actuales presentes en sistemas naturales, considerando las implicancias éticas, sociales y ambientales.

Unidad	Objetivos de aprendizaje basales
Biología: Biología celular y molecular	<p>OAB01: Investigar el desarrollo del conocimiento de biología celular y molecular a lo largo de la historia y su relación con diversas disciplinas como la Química, la Física y la Matemática, entre otras.</p> <p>OAB07: Analizar aplicaciones biotecnológicas en diversas áreas, como tratamientos para el cáncer, preservación y uso de células madre, y producción de organismos transgénicos, entre otros, y evaluar sus implicancias éticas, sociales y legales.</p>
Biología: Ciencias para la salud	<p>OAB04: Investigar y comunicar la relación entre la calidad del aire, las aguas y los suelos con la salud humana, así como los mecanismos biológicos subyacentes.</p> <p>OAB05: Evaluar el desarrollo científico y tecnológico, a través de innovaciones en biotecnología, nanomedicina, medicina nuclear, imagenología y farmacología, entre otras, influyen en la calidad de vida de las personas.</p>
Cs. para la ciudadanía: Bienestar y salud	<p>OAB01: Analizar, sobre la base de la investigación, factores biológicos, ambientales y sociales que influyen en la salud humana (como la nutrición, el consumo de alimentos transgénicos, la actividad física, el estrés, el consumo de alcohol y drogas, y la exposición a rayos UV, plaguicidas, patógenos y elementos contaminantes, entre otros).</p>

Unidad	Objetivos de aprendizaje basales
Cs. para la ciudadanía: Seguridad, prevención y autocuidado	<p>OAB01: Investigar sustancias químicas de uso cotidiano en el hogar y el trabajo (medicamentos, detergentes y plaguicidas, entre otros), analizando su composición, reactividad, riesgos potenciales y medidas de seguridad asociadas (manipulación, almacenaje y eliminación).</p> <p>OAB03: Analizar, a partir de modelos, riesgos de origen natural o provocados por la acción humana en su contexto local (como aludes, incendios, sismos de alta magnitud, erupciones volcánicas, tsunamis e inundaciones, entre otros) y evaluar las capacidades existentes en la escuela y la comunidad para la prevención, la mitigación y la adaptación frente a sus consecuencias.</p>
Cs. para la ciudadanía: Ambiente y sostenibilidad	<p>OAB03: Modelar los efectos del cambio climático en diversos ecosistemas y sus componentes biológicos, físicos y químicos, y evaluar posibles soluciones para su mitigación.</p>
Cs. para la ciudadanía: Tecnología y sociedad	<p>OAB03: Evaluar alcances y limitaciones de la tecnología y sus aplicaciones, argumentando riesgos y beneficios desde una perspectiva de salud, ética, social, económica y ambiental.</p>

Nota. Datos extraídos de (Mineduc, 2019).

Así mismo, se extraen los siguientes estándares de formación inicial docente (FID) que pueden asociarse con la propuesta de módulo descrito en la Tabla 3.

Tabla 3

Estándares de formación inicial docente.

Estándar	Conocimiento disciplinar	Didáctica disciplinar
Química: ESTÁNDAR A: Habilidades de Investigación Científica	<p>1. Plantea preguntas que pueden abordarse a través de procedimientos científicos, y los usa para formular investigaciones científicas escolares a través de experiencias, indagaciones y proyectos.</p>	<p>13. Genera oportunidades para que sus estudiantes formulen preguntas de carácter científico que puedan ser resueltas a través de actividades de investigación científica escolar, ya sea a través de experiencias, indagaciones o proyectos.</p>
	<p>4. Formula hipótesis sobre fenómenos del mundo natural, fundamentando los resultados esperados en el conocimiento científico vigente.</p>	<p>16. Selecciona e implementa experimentos, demostraciones, simulaciones digitales y laboratorios virtuales, que permitan a sus estudiantes formular y fundamentar hipótesis; recolectar y analizar datos; elaborar, argumentar y comunicar conclusiones, desarrollando en ellos una visión de la Ciencia, más allá de la intuición y las fórmulas, en la que la observación sistemática, el registro adecuado y la interpretación rigurosa son indispensables.</p>
	<p>9. Discute los resultados obtenidos en investigaciones científicas, contrastando el análisis de datos cualitativos y cuantitativos con el conocimiento científico vigente.</p>	<p>17. Diseña e implementa actividades de indagación científica en torno a una pregunta inicial compleja, para contribuir a que sus estudiantes logren los objetivos de aprendizaje en particular aquellos relacionados al pensamiento, las habilidades y las actitudes científicas prescritas para el nivel correspondiente.</p>

Estándar	Conocimiento disciplinar	Didáctica disciplinar
Química: ESTÁNDAR B: Naturaleza de la Ciencia	10. Elabora conclusiones a partir de evidencia teórica y empírica, dando respuesta a las preguntas planteadas, formulando nuevas preguntas y reconociendo las limitaciones y proyecciones de la investigación realizada.	18. Planifica e implementa experiencias de aprendizaje en que sus estudiantes deben diseñar, ejecutar y divulgar individual o colaborativamente proyectos de investigación de la disciplina o interdisciplinarios orientados a responder preguntas científicas, y así piensen, actúen y se comuniquen científicamente.
	3. Entiende los modelos científicos como representaciones aproximadas de los sistemas Físicos, Químicos, Biológicos, Geológicos y Astronómicos y su utilidad para explicar, argumentar, predecir y resolver problemas, reconociendo el carácter interpretativo y provisorio del conocimiento científico.	12. Dispone de un amplio repertorio de modelos concretos, pictóricos y simbólicos, y selecciona el más adecuado, de acuerdo con el contexto y nivel educativo, para facilitar que sus estudiantes formulen predicciones, explicaciones, argumentaciones y resuelvan problemas científicos.

Estándar	Conocimiento disciplinar	Didáctica disciplinar
<p data-bbox="235 742 414 782">Química:</p> <p data-bbox="235 798 448 837">ESTÁNDAR D:</p> <p data-bbox="257 853 425 893">Interacciones</p> <p data-bbox="235 909 448 949">Intermoleculares</p>	<p data-bbox="504 327 1052 694">7. Analiza críticamente cuestiones sociocientíficas locales y globales, poniendo el conocimiento, las habilidades de investigación científica y las formas de razonar de diversas disciplinas al servicio del desarrollo de una ciudadanía activa y comprometida con el desarrollo sostenible.</p> <p data-bbox="504 710 1052 1085">10. Está consciente que debe profundizar los contenidos de las disciplinas científicas que menos domina y actualizar constantemente sus marcos conceptuales y epistemológicos respecto de la Ciencia y su didáctica, para potenciar su quehacer docente.</p>	<p data-bbox="1086 327 1982 582">15. Selecciona textos informativos donde se presenten cuestiones sociocientíficas pertinentes al nivel de desarrollo e intereses de sus estudiantes, y los utiliza como recursos didácticos que les permitan realizar análisis críticos que integren Física, Química y Biología, así como otras disciplinas no científicas.</p> <p data-bbox="1086 710 1982 973">17. Utiliza la metodología aprendizaje basado en proyectos para empoderar a sus estudiantes como gestores de cambio, dada la identificación de problemáticas presentes en su contexto territorial y la ejecución de acciones concretas para resolverlas desde un enfoque sostenible.</p> <p data-bbox="1086 989 1982 1252">20. Valora el diálogo con otros/as profesionales de la educación sobre los saberes de sus respectivas especialidades y articula colaboraciones, para incorporar aspectos disciplinares, didácticos y pedagógicos que contribuyan a que sus estudiantes aborden de manera interdisciplinar temáticas asociadas con el desarrollo sostenible.</p>

Estándar	Conocimiento disciplinar	Didáctica disciplinar
Química: ESTÁNDAR D: Interacciones Intermoleculares	<p>2. Explica los efectos de la variación de las condiciones del sistema en las sustancias, mediante el análisis del comportamiento de las partículas y sus interacciones, para evaluar el impacto del cambio climático en su territorio y proponer estrategias para su mitigación.</p>	
	<p>4. Identifica los procesos que permiten separar los componentes de una mezcla, mediante la comparación de sus propiedades físicas y químicas, para diseñar procedimientos experimentales que permitan resolver problemáticas medioambientales como la contaminación del suelo, el agua o del aire.</p>	

Estándar	Conocimiento disciplinar	Didáctica disciplinar
Matemáticas: ESTÁNDAR A: NÚMEROS Y ÁLGEBRA	<p>4.- Identifica los elementos y las propiedades básicas de una función y sus representaciones, y estudia funciones, tales como, valor absoluto, lineales, afines, definidas por tramos, cuadráticas, potencia de exponente racional, racionales y combinaciones entre estas, poniendo atención a la pertinencia del dominio.</p>	<p>10.- Diseña actividades de aprendizaje anticipando las posibles dificultades y errores de sus estudiantes en la determinación del dominio y recorrido de funciones y propone actividades para superar dichas dificultades.</p>
	<p>5.- Resuelve problemas y modela fenómenos de crecimiento y/o periódicos con las funciones exponencial, logaritmo y trigonométricas en colaboración con docentes de otras disciplinas como Economía y Ciencias Naturales y utilizando herramientas digitales.</p>	<p>13.- Anticipa dificultades y prepara preguntas en actividades de manipulación de expresiones algebraicas, para que sus estudiantes expliquen y argumenten sus procedimientos y resultados.</p>

Estándar	Conocimiento disciplinar	Didáctica disciplinar
Matemáticas: ESTÁNDAR A: NÚMEROS Y ÁLGEBRA	<p>8.- Resuelve problemas que integran conocimientos de Números y Álgebra con los conocimientos de los otros estándares como, por ejemplo, problemas que involucran combinatoria, ecuaciones y cuerpos geométricos</p>	<p>14.- Incentiva, en colaboración con docentes del área de Ciencias, que sus estudiantes trabajen en grupo en la modelación del crecimiento de poblaciones de especies, por ejemplo, que expliquen a sus pares las decisiones y procedimientos utilizados y contrasten los distintos modelos obtenidos por cada grupo.</p>
	<p>9.- Comprende las múltiples interconexiones entre las ideas matemáticas presentes en estos estándares, las que dan coherencia y unidad a la matemática escolar, estableciendo relaciones entre el estándar de Números y Álgebra y los demás.</p>	<p>15.- Escucha en forma activa las explicaciones que un grupo de estudiantes da sobre los supuestos que han hecho para modelar un fenómeno periódico y, en base a ello, formula preguntas para que el grupo discuta sobre la validez de estos supuestos.</p>
		<p>18.- Diseña actividades de resolución colaborativa de problemas que integren herramientas digitales dinámicas para el análisis de funciones, para que sus estudiantes conecten las representaciones algebraicas y gráficas, usen parámetros y planteen generalizaciones.</p>

Estándar	Conocimiento disciplinar	Didáctica disciplinar
<p>Matemáticas: ESTÁNDAR C: PROBABILIDADES Y ESTADÍSTICA</p>	<p>2.- Vincula la estadística descriptiva y la inferencial, usando los datos como evidencia, generalizando más allá de la descripción de los datos, y expresando conclusiones con cierto grado de incertidumbre para conectar con la inferencia formal.</p> <p>3.- Comprende los elementos de un proceso de inferencia estadística, entendiendo que este utiliza datos de muestras aleatorias para inferir sobre la población de que provienen, y comprende el rol de la distribución muestral de los estadísticos al cuantificar la incertidumbre de las inferencias.</p>	<p>13.- Diseña planes de clases que integren software dinámico para la representación y análisis de datos en la resolución de problemas estadísticos sobre poblaciones minoritarias, considerando los contextos de sus estudiantes y enriqueciendo la interpretación de los resultados.</p> <p>14.- Planifica unidades didácticas que promuevan la resolución de problemas estadísticos con uso de herramientas digitales, en el marco de situaciones relevantes de la vida social, cultural y científica, para fomentar el ejercicio de una ciudadanía informada y crítica que toma decisiones basadas en evidencia.</p>

Estándar	Conocimiento disciplinar	Didáctica disciplinar
<p>Matemáticas: ESTÁNDAR C: PROBABILIDADES Y ESTADÍSTICA</p>	<p>4.- Explora y describe el comportamiento de datos uni y bivariados, usando estadísticos, representaciones gráficas y tabulares y apoyándose con tecnologías, para el desarrollo de habilidades de análisis exploratorio de datos, propias del razonamiento estadístico.</p> <p>8.- Define variables aleatorias y las utiliza para modelar fenómenos aleatorios, describiendo el comportamiento de la variable a través de funciones de probabilidad o densidad, como la Binomial y la Normal, y evalúa la pertinencia del modelo en situaciones de incertidumbre de índole social, cultural o científica.</p>	

10.- Construye intervalos de confianza e interpreta su significancia estadística para el análisis crítico de información y para la realización de inferencias respecto de una población, en el contexto de proyectos colaborativos con áreas como las ciencias sociales, ciencias de la salud y educación.

Estándar	Conocimiento disciplinar	Didáctica disciplinar
Matemáticas: ESTÁNDAR E: PENSAMIENTO COMPUTACIONAL Y PROGRAMACIÓN	1.- Conoce los elementos básicos de la ciencia de la computación: hardware y software, representación digital de la información, bases de datos, redes informáticas, inteligencia artificial y robótica, sus aplicaciones prácticas y su impacto en la sociedad.	

Nota. Datos extraídos de (Mineduc, 2021; Mineduc, 2022).

6.3 Selección de un modelo reproducible

De un total de 22 artículos recopilados en el diagrama PRISMA, se seleccionó el artículo con título: "*Three-Parameter Modeling of the Soil Sorption of Acetanilide and Triazine Herbicide Derivatives*" (M. R. Freitas et al., 2014). Se decidió descartar los 21 artículos restantes debido a los siguientes factores: a) inaccesibilidad de los datos para trabajar; b) softwares no liberados; c) dificultad para la instalación de los mismos programas; d) lenguaje computacional avanzado. Para los puntos "a" y "b" se puede observar el detalle en la Tabla 1 ubicada en anexos. Mientras que para los puntos "c" y "d", los softwares que se tuvo complicaciones en la instalación fueron: I) Qikprop, este no permitía la descarga desde la página oficial ya que se debía registrar, al momento de realizar ese registro, solicitaba tener cargos académicos más avanzados y acreditarlos, este programa aparece en el artículo 12 (Langeron et al., 2014) según la Tabla 1 de anexos; II) DRAGON, la licencia de este programa solo es de pago, por lo que no se pudo llegar a la instalación, no obstante, existe una versión en línea pero que no cuenta con las herramientas necesarias para la obtención de los resultados. Este programa se sugiere en los artículos 7, 10 y 13 (dos Reis et al., 2014; Roy et al., 2020; Sabour & Movahed, 2017) según la Tabla 1; III) Python 3.7, la instalación fue amena y rápida, pero si se requiere un conocimiento computacional mucho más avanzado y concreto, ya que en el artículo 2 (Kobayashi et al., 2020) según la Tabla 1, que es donde se utiliza este programa se habla de lenguaje computacional muy avanzado, es decir, solicitaba códigos y programación, considerando que este módulo será expuesto para profesores en formación sin un conocimiento previo de informática se decide descartar; IV) QSARINS, este programa aparece en los artículos 4 y 6 (Olguín et al., 2019; Olguín et al., 2017) según la Tabla 1. A pesar de que sea un programa liberado, al momento de su instalación solicita la descarga previa de Javascript 11.0 posteriormente solicita ingresar unos códigos descritos desde la misma página de descarga de QSARINS para su correcto funcionamiento. A pesar de haberse realizado los pasos correspondientes, no se logró la instalación de éste; V) Material Studio, a pesar que la descripción de la página menciona ser un software liberado, no fue posible encontrar la zona de descarga y por ende instalarlo, apareciendo solo en el artículo 16 (Radian et al., 2015) según la Tabla 1; VI) Volsurf, al igual que el software de Qikprop, solicita registrarse, pide tener un grado académico y acreditarlo, al intentar hacer el registro solicita algún documento que verifique el título profesional, ante ello no se pudo instalar el software pertinente, en donde solo aparece en el artículo 18 (Soares et al., 2014) según la Tabla 1.

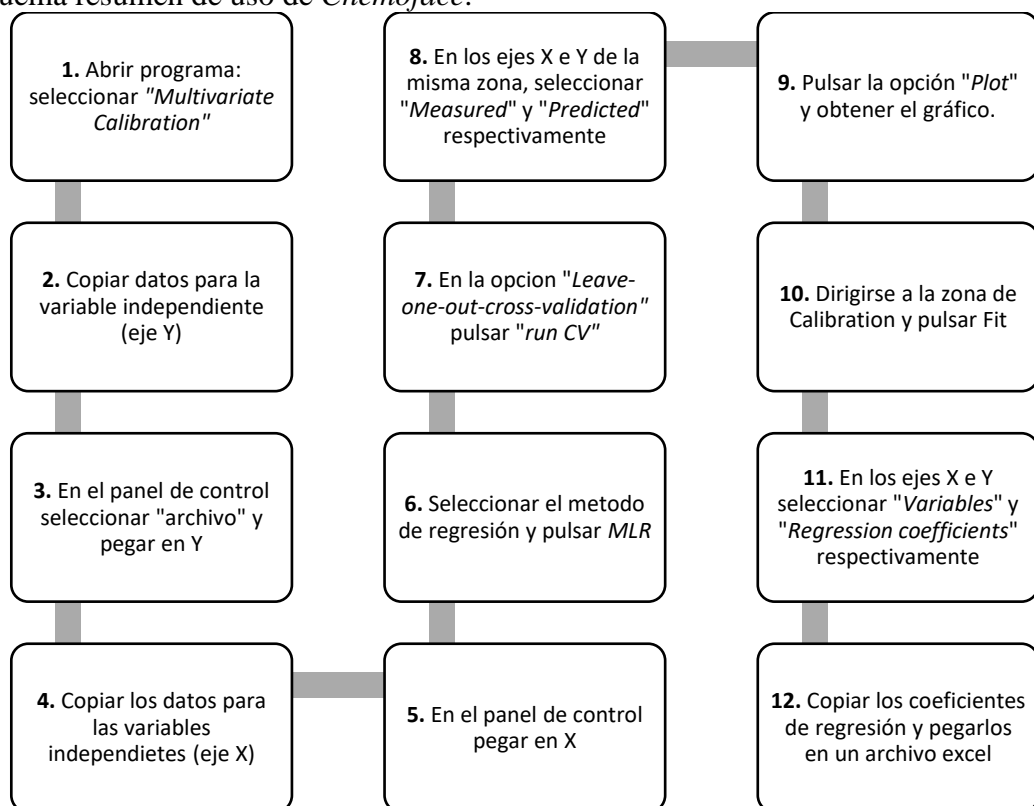
Por otro lado, la elección del artículo se debe a que contiene una base de datos accesible, estos se encuentran descritos dentro del artículo, estos datos pueden ser copiados en un archivo Excel y citados para su posterior trabajo de modulo. Además, cuenta con un software liberado y de fácil entendimiento llamado *Chemoface*, perteneciente a la misma rama de los programas de MATLAB. Este programa solita la descarga de una extensión correspondiente a MATLAB y la descarga del propio software. La instalación de este programa para su respectiva prueba se realizó en un notebook HP Victus, con sistema Windows 11, procesador Intel Core I5 de 11va generación, memoria RAM de 8 GB y 256 GB de disco duro, estas características permitieron un trabajo rápido y fluido. Finalmente, la aplicación de este trabajo permitirá resultados en base a los siguientes parámetros evaluados: r^2 , q^2 , RMSECV y $r_{Y\text{-rand}}^2$.

6.4 Programa *Chemoface*

Una vez hecha la instalación, se procede a abrir el programa *Chemoface* para poder replicar los resultados del módulo tal como se reflejan en el siguiente esquema.

Figura 3

Esquema resumen de uso de *Chemoface*.



El programa *Chemoface*, tiene la particularidad de pertenecer a la rama de programas MATLAB, siendo de una instalación amigable y sencilla. El uso de este software permite poder determinar los distintos valores de regresión lineal múltiple para la base de datos empleada en el artículo seleccionado. Para poder observar el detalle de la utilización del programa, se sugiere ver anexos 2.

6.5 Lineamientos para un módulo

Con base en el modelo STEM y así mismo en el marco de TPASK, se propone la aplicación de un prototipo de ABP para la realización de este módulo.

6.5.1 Etapas de un ABP.

1. Contextualización del escenario ABP: Los estudiantes leen, reflexionan y escriben sobre un hito importante para la contextualización de un problema del mundo real.

2. Lluvia de ideas: Los estudiantes anotan preguntas enunciados, hechos, conceptos y restricciones implícitos implícitas en el problema.

3. Sistematización: Los estudiantes leen sus notas y las clasifican en diferentes categorías, temas y procesos.

4. Descripción del problema: Basándose en las etapas 2 y 3 los estudiantes formulan metas de aprendizaje (objetivos) para resolver un problema del mundo real.

5. Distribución de roles: Los estudiantes designan roles basados en trabajo cooperativo, donde identifican y asignan las metas (objetivos) de aprendizaje propuestas en la etapa 4. Posteriormente, los estudiantes analizan los recursos educativos y recopilan información adicional para desarrollar metas de aprendizaje para el grupo.

6. Identificación de objetivos: Cada estudiante presenta la información recopilada de acuerdo con su papel dentro del grupo. Posteriormente y mediante trabajo cooperativo trabajo cooperativo, los alumnos identifican objetivos de investigación que permitan resolver un problema del mundo real a través de una metodología de trabajo.

7. Análisis de datos: Los estudiantes trabajan en la identificación y control de variables. A continuación, interpretan los resultados utilizando datos agrupados o tabulados pregunta de investigación.

8. Conclusiones: Los estudiantes formulan sus conclusiones teniendo en cuenta: i) las regularidades observadas en los resultados; ii) coherencia con la hipótesis y los objetivos; iii) validez de las conclusiones.

9. Comunicación científica: Los estudiantes presentan resultados de la investigación a otros estudiantes y a la comunidad académica a través de carteles.

10. Evaluación por pares: Los estudiantes realizan una evaluación por pares al final de la realización del módulo ECC, considerando tres categorías: compromiso con la asignación, concordancia entre los requisitos del rol y desarrollo del trabajo, y calidad del trabajo.

11. Autoevaluación: Al final, los estudiantes asisten a una grupo y realizan una autorreflexión guiada sobre su aprendizaje. La reflexión se lleva a cabo mediante un cuestionario que ayuda a identificar "qué" y "cómo" han aprendido durante la aplicación del módulo ECC (Rodríguez-Becerra, Cáceres-Jensen, Díaz, et al., 2020).

Considerando que la primera etapa del ABP es la contextualización y la presentación de la pregunta de investigación, se procede a plantear una situación problema para el trabajo a realizar.

6.5.2 Situación problema.

“La Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura (FAO) estima que, en los países en desarrollo, se proyecta que el 80% del aumento en la producción de alimentos necesario para mantener el ritmo del crecimiento de la población procederá de aumentos en el rendimiento o el número de veces al año que se pueden plantar los cultivos en la misma tierra. Se espera que solo el 20% de la producción adicional de alimentos sea el resultado de una expansión de las tierras agrícolas.

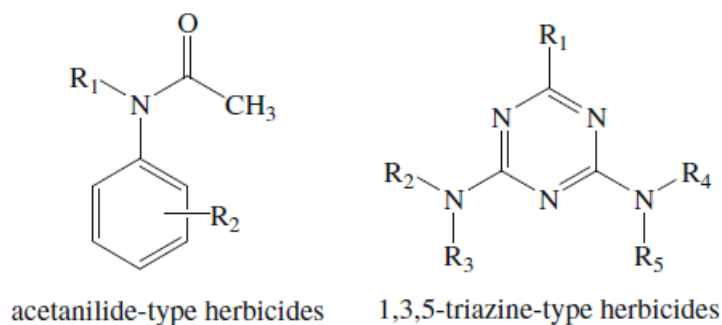
Los plaguicidas pueden prevenir grandes pérdidas de cultivos y, por lo tanto, seguirán desempeñando un papel en la agricultura. Sin embargo, los efectos de la exposición a los plaguicidas en los seres humanos y el medio ambiente son una preocupación constante (World Health Organization: WHO, 2022).

El riesgo medioambiental de los nuevos herbicidas puede determinarse mediante la estimación de su sorción en el suelo ($\log K_{oc}$), que suele estar correlacionado con el coeficiente de partición octanol/agua ($\log K_{ow}$). Sin embargo, esta correlación no es válida para algunos acetanilidas y triazinas. Por lo tanto, es necesario relación cuantitativa

estructura-propiedad para predecir el logKoc de los análogos de estos compuestos. Coeficiente de partición octanol/agua, se calcularon el peso molecular y el volumen contra logKoc (M. R. Freitas et al., 2014).

Figura 16.

Estructuras básicas de acetanilida y triazina utilizadas en el modelado QSAR.



Con estos tres descriptores, es posible realizar un modelo de relación estructura – actividad predictivo y validado para obtener herbicidas más amigables con la naturaleza y la salud humana.

En base a los antecedentes planteados, la OMS se ha contactado con ustedes, en su calidad de expertos y profesionales para resolver la siguiente problemática medioambiental.

Considerando un modelo predictivo de relación cuantitativa estructura – actividad. ¿Cuál de las dos familias de herbicidas contribuirá de mejor manera al control de malezas considerando los descriptores fisicoquímicos planteados? Considere la base de datos dispuesta en anexos 3”

7. Conclusión

El presente trabajo está focalizado en poder realizar lineamientos para el diseño de un módulo de modelamiento QSAR destinado para la formación inicial de profesores de ciencias, así mismo se pudo relacionar en conjunto con los objetivos de aprendizaje a estudiantes de 3ro y 4to medio. Para ello, se desglosa en diversas tareas que permitieron el cumplimiento del objetivo general.

Considerando una metodología rigurosa y minuciosa, la realización de una revisión sistemática de la literatura científica por medio de WoS permitió obtener una comprensión profunda de los avances actuales en el campo del modelamiento QSAR, no solamente a nivel nacional, sino que también internacional, esto aplicado a la adsorción de herbicidas en determinados tipos de suelos. Este conocimiento crítico se convirtió en la base sobre la cual se identificó oportunidades y desafíos específicos relacionados con la integración de modelos QSAR en la enseñanza y aprendizaje de las ciencias ambientales.

Asimismo, el proceso de selección de un modelo QSAR de actividad ambiental pertinente no solo ha contribuido a la creación de un marco de referencia robusto, sino que también ha sentado las bases para diseñar una actividad de aprendizaje efectiva por medio de la metodología ABP. La cuidadosa elección del modelo trabajado ha sido crucial para garantizar que el módulo propuesto no solo sea educativo, sino también relevante y aplicable en el contexto de la formación de futuros profesores de ciencias e incluso estudiantes de 3ro y 4to medio.

Finalmente, los lineamientos propuestos son los siguientes: i) uso del programa *Chemoface*; ii) la contextualización de una situación problemática real, iii) una metodología rigurosa y sólida; iv) una base de datos reproducible. Estos lineamientos permiten un diseño novedoso por medio de una metodología emergente como lo es el ABP en la educación, tanto universitaria como secundaria. Teniendo así un enfoque didáctico y autónomo por parte del estudiantado.

8. Referencias

- Akuma, F. V., & Callaghan, R. (2019, May). A systematic review characterizing and clarifying intrinsic teaching challenges linked to inquiry-based practical work [Review]. *Journal of Research in Science Teaching*, 56(5), 619-648. <https://doi.org/10.1002/tea.21516>
- Barnea, N. (2000). Teaching and learning about chemistry and modelling with a computer managed modelling system. In *Developing models in science education* (pp. 307-323). Springer.
- Blondel, A., Langeron, J., Sayen, S., Hénon, E., Couderchet, M., & Guillon, E. (2013). Molecular properties affecting the adsorption coefficient of phenylurea herbicides. *Environmental Science and Pollution Research*, 20, 6266-6281.
- Bohloko, M., Makatjane, T. J., George, M. J., & Mokuku, T. (2019, Jan). Assessing the Effectiveness of using YouTube Videos in Teaching the Chemistry of Group I and VII Elements in a High School in Lesotho [Article]. *African Journal of Research in Mathematics Science and Technology Education*, 23(1), 75-85. <https://doi.org/10.1080/18117295.2019.1593610>
- Burke, V., Treumann, S., Duennbier, U., Greskowiak, J., & Massmann, G. (2013). Sorption behavior of 20 wastewater originated micropollutants in groundwater—column experiments with pharmaceutical residues and industrial agents. *Journal of Contaminant Hydrology*, 154, 29-41.
- Cáceres-Jensen, L., Rodríguez-Becerra, J., Garrido, C., Escudey, M., Barrientos, L., Parra-Rivero, J., Domínguez-Vera, V., & Loch-Arellano, B. (2021). Study of Sorption Kinetics and Sorption–Desorption Models to Assess the Transport Mechanisms of 2, 4-Dichlorophenoxyacetic Acid on Volcanic Soils. *International journal of environmental research and public health*, 18(12), 6264.
- Cáceres-Jensen, L., Rodríguez-Becerra, J., Jorquera-Moreno, B., Escudey, M., Druker-Ibañez, S., Hernández-Ramos, J., Díaz-Arce, T., Perna, J., & Aksela, M. (2021, 2021/05/11). Learning Reaction Kinetics through Sustainable Chemistry of Herbicides: A Case Study of Preservice Chemistry Teachers' Perceptions of Problem-Based Technology Enhanced Learning. *Journal of Chemical Education*, 98(5), 1571-1582. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.0c00557>
- Carpendale, J., Delaney, S., & Rochette, E. (2020, Sep). Modeling Meaningful Chemistry Teacher Education Online: Reflections from Chemistry Preservice Teacher Educators in Australia [Article]. *Journal of Chemical Education*, 97(9), 2534-2543. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.0c00718>

- Cetin-Dindar, A., Boz, Y., Sonmez, D. Y., & Celep, N. D. (2018, Jan). Development of pre-service chemistry teachers' technological pedagogical content knowledge [Article]. *Chemistry Education Research and Practice*, 19(1), 167-183. <https://doi.org/10.1039/c7rp00175d>
- Chai, C. S., Hwee Ling Koh, J., & Teo, Y. H. (2018). Enhancing and Modeling Teachers' Design Beliefs and Efficacy of Technological Pedagogical Content Knowledge for 21st Century Quality Learning [Article in Press]. *Journal of Educational Computing Research*. <https://doi.org/10.1177/0735633117752453>
- Cox, S., & Graham, C. R. (2009). Diagramming TPACK in practice: Using an elaborated model of the tpack framework to analyze and depict teacher knowledge [Article]. *TechTrends*, 53(5), 60-69. <https://doi.org/10.1007/s11528-009-0327-1>
- Daré, J. K., Silva, C. F., & Freitas, M. P. (2017). Revealing chemophoric sites in organophosphorus insecticides through the MIA-QSPR modeling of soil sorption data. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 144, 560-563.
- Deng, F., Chai, C. S., So, H. J., Qian, Y. Y., & Chen, L. L. (2017). Examining the validity of the technological pedagogical content knowledge (TPACK) framework for preservice chemistry teachers. *Australasian Journal of Educational Technology*, 33(3), 1-14. <https://doi.org/10.14742/ajet.3508>
- Djohan, D., Yu, J., & Connell, D. (2017). Partition kinetics of chlorobenzenes in a sediment-water system. *Chemosphere*, 186, 938-947.
- Dołowy, M., Miszczyk, M., & Pyka, A. (2014). Application of various methods to determine the lipophilicity parameters of the selected urea pesticides as predictors of their bioaccumulation. *Journal of Environmental Science and Health, Part B*, 49(10), 730-737.
- Dorfman, B. S., Terrill, B., Patterson, K., Yarden, A., & Blonder, R. (2019, Oct). Teachers personalize videos and animations of biochemical processes: results from a professional development workshop [Article]. *Chemistry Education Research and Practice*, 20(4), 772-786. <https://doi.org/10.1039/c9rp00057g>
- dos Reis, R. R., Sampaio, S. C., & de Melo, E. B. (2013). The effect of different log P algorithms on the modeling of the soil sorption coefficient of nonionic pesticides. *Water Research*, 47(15), 5751-5759.
- dos Reis, R. R., Sampaio, S. C., & de Melo, E. B. (2014). An alternative approach for the use of water solubility of nonionic pesticides in the modeling of the soil sorption coefficients. *Water Research*, 53, 191-199.

- Eckel, W. P. (2019). Novel calculator for estimation of Freundlich partitioning coefficient. *Chemosphere*, 230, 308-315.
- Freitas, M. R., Barigye, S. J., & Freitas, M. P. (2015). Coloured chemical image-based models for the prediction of soil sorption of herbicides. *Rsc Advances*, 5(10), 7547-7553.
- Freitas, M. R., Freitas, M. P., & Macedo, R. L. (2014). Aug-MIA-QSPR modeling of the soil sorption of carboxylic acid herbicides. *Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology*, 93, 489-492.
- Freitas, M. R., Matias, S. V., Macedo, R. L., Freitas, M. P., & Venturin, N. (2014, Feb). Three-parameter modeling of the soil sorption of acetanilide and triazine herbicide derivatives. *Bull Environ Contam Toxicol*, 92(2), 143-147. <https://doi.org/10.1007/s00128-013-1184-3>
- Gonzales, A. L. (2018, Jul). Exploring Technological, Pedagogical, and Content Knowledge (TPACK) and Self Efficacy Belief of Senior High School Biology Teachers in Batangas City [Article]. *Palawan Scientist*, 10, 29-47. <Go to ISI>://WOS:000440388800003
- Harris, J., Phillips, M., Koehler, M., & Rosenberg, J. (2017). TPACK/TPACK research and development: Past, present, and future directions [Editorial]. *Australasian Journal of Educational Technology*, 33(3), 1-8. <https://doi.org/10.14742/ajet.3907>
- Hernández-Ramos, J., Perna, J., Cáceres-Jensen, L., & Rodríguez-Becerra, J. (2021). The Effects of Using Socio-Scientific Issues and Technology in Problem-Based Learning: A Systematic Review. *Education Sciences*, 11(10), 640.
- Irdalisa, Paidi, & Djukri. (2020, Apr). Implementation of Technology-based Guided Inquiry to Improve TPACK among Prospective Biology Teachers [Article]. *International Journal of Instruction*, 13(2), 33-44. <https://doi.org/10.29333/iji.2020.1323a>
- Jimoyiannis, A. (2010). Designing and implementing an integrated technological pedagogical science knowledge framework for science teachers professional development. *Computers & Education*, 55(3), 1259-1269. <https://doi.org/http://doi.org/10.1016/j.compedu.2010.05.022>
- Kobayashi, Y., Uchida, T., & Yoshida, K. (2020). Prediction of soil adsorption coefficient in pesticides using physicochemical properties and molecular descriptors by machine learning models. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 39(7), 1451-1459.

- Koehler, M. J., Mishra, P., & Cain, W. (2015). What Is Technological Pedagogical Content Knowledge (TPACK)? *Virtualidad Educacion Y Ciencia*, 6(10), 9-23. <Go to ISI>://WOS:000373008700002
- Koh, J. H. L. (2018). Articulating Teachers' Creation of Technological Pedagogical Mathematical Knowledge (TPMK) for Supporting Mathematical Inquiry with Authentic Problems [Article in Press]. *International Journal of Science and Mathematics Education*. <https://doi.org/10.1007/s10763-018-9914-y>
- Langeron, J., Blondel, A., Sayen, S., Hénon, E., Couderchet, M., & Guillon, E. (2014). Molecular properties affecting the adsorption coefficient of pesticides from various chemical families. *Environmental Science and Pollution Research*, 21, 9727-9741.
- Levine, M., Serio, N., Radaram, B., Chaudhuri, S., & Talbert, W. (2015). Addressing the STEM gender gap by designing and implementing an educational outreach chemistry camp for middle school girls. *Journal of Chemical Education*, 92(10), 1639-1644.
- Lim, S. J., & Fox, P. (2014). Effects of halogenated aromatics/aliphatics and nitrogen (N)-heterocyclic aromatics on estimating the persistence of future pharmaceutical compounds using a modified QSAR model. *Science of the Total Environment*, 470, 348-355.
- Muhire, J., Li, S. S., Yin, B., Mi, J. Y., & Zhai, H. L. (2021). A simple approach to the prediction of soil sorption of organophosphorus pesticides. *Journal of Environmental Science and Health, Part B*, 56(6), 606-612.
- Niess, M. L. (2018). Introduction to teachers' knowledge-of-practice for teaching with digital technologies: A technological pedagogical content knowledge (TPACK) framework. In *Teacher Training and Professional Development: Concepts, Methodologies, Tools, and Applications* (Vol. 1, pp. 145-159). <https://doi.org/10.4018/978-1-5225-5631-2.ch07>
- Olguin, C., Sampaio, S., Dos Reis, R., Remor, M., & Olguin, C. (2019). QSPR modelling of the soil sorption coefficient from training sets of different sizes. *Sar and Qsar in Environmental Research*, 30(5), 299-311.
- Olguin, C. J. M., Sampaio, S. C., & Dos Reis, R. R. (2017). Statistical equivalence of prediction models of the soil sorption coefficient obtained using different log P algorithms. *Chemosphere*, 184, 498-504.
- Page, M. J., McKenzie, J. E., Bossuyt, P. M., Boutron, I., Hoffmann, T. C., Mulrow, C. D., Shamseer, L., Tetzlaff, J. M., Akl, E. A., & Brennan, S. E. (2021). The

PRISMA 2020 statement: an updated guideline for reporting systematic reviews. *International journal of surgery*, 88, 105906.

- Pernaa, J. (2022, 2022/03/08). Possibilities and Challenges of Using Educational Cheminformatics for STEM Education: A SWOT Analysis of a Molecular Visualization Engineering Project. *Journal of Chemical Education*, 99(3), 1190-1200. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.1c00683>
- Radian, A., Fichman, M., & Mishael, Y. (2015). Modeling binding of organic pollutants to a clay–polycation adsorbent using quantitative structural–activity relationships (QSARs). *Applied Clay Science*, 116, 241-247.
- Ragno, R., Esposito, V., Di Mario, M., Masiello, S., Viscovo, M., & Cramer, R. D. (2020, 2020/07/14). Teaching and Learning Computational Drug Design: Student Investigations of 3D Quantitative Structure–Activity Relationships through Web Applications. *Journal of Chemical Education*, 97(7), 1922-1930. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.0c00117>
- Rap, S., Feldman-Maggor, Y., Aviran, E., Shvarts-Serebro, I., Easa, E., Yonai, E., Waldman, R., & Blonder, R. (2020, Sep). An Applied Research-Based Approach to Support Chemistry Teachers during the COVID-19 Pandemic [Article]. *Journal of Chemical Education*, 97(9), 3278-3284. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.0c00687>
- Rodriguez-Becerra, J., & Caceres-Jensen, L. (2023). Manuscript in preparation.
- Rodríguez-Becerra, J., Cáceres-Jensen, L., Díaz, T., Druker, S., Bahamonde Padilla, V., Pernaa, J., & Aksela, M. (2020). Developing technological pedagogical science knowledge through educational computational chemistry: a case study of pre-service chemistry teachers' perceptions [10.1039/C9RP00273A]. *Chemistry Education Research and Practice*, 21(2), 638-654. <https://doi.org/10.1039/c9rp00273a>
- Rodríguez-Becerra, J., Cáceres-Jensen, L., Diaz, T., Druker, S., Padilla, V. B., Pernaa, J., & Aksela, M. (2020). Developing technological pedagogical science knowledge through educational computational chemistry: a case study of pre-service chemistry teachers' perceptions. *Chemistry Education Research and Practice*, 21(2), 638-654.
- Roy, J., Ojha, P. K., Carnesecchi, E., Lombardo, A., Roy, K., & Benfenati, E. (2020). First report on a classification-based QSAR model for chemical toxicity to earthworm. *Journal of Hazardous Materials*, 386, 121660.
- Roy, K., Kar, S., & Das, R. N. (2015). *A primer on QSAR/QSPR modeling: fundamental concepts*. Springer.

- Sabour, M. R., & Movahed, S. M. A. (2017). Application of radial basis function neural network to predict soil sorption partition coefficient using topological descriptors. *Chemosphere*, *168*, 877-884.
- Sanabria, M. L. V., & Riobueno, G. A. C. (2017). Solucionando dificultades en el aula: una estrategia usando el aprendizaje basado en problemas. *Revista Cuidarte*, *8*(3), 1907-1918.
- Schultz, T. W., Diderich, R., Kuseva, C. D., & Mekenyan, O. G. (2018). The OECD QSAR toolbox starts its second decade. *Computational Toxicology: Methods and Protocols*, 55-77.
- Sebastian-Lopez, M., & Gonzalez, R. D. (2020, Nov). Mobile Learning for Sustainable Development and Environmental Teacher Education [Article]. *Sustainability*, *12*(22), 13, Article 9757. <https://doi.org/10.3390/su12229757>
- Soares, G. C. d. S., Silva, L. d. M. e., Farias, C. H. d. A., Scotti, L., & Scotti, M. T. (2014). Quantitative structure–sorption relationships of pesticides used in the sugarcane industry in the Northern coastal area of Paraíba state, Brazil. *Alternatives to Laboratory Animals*, *42*(1), 81-90.
- Wang, X., Li, Q., Li, M., & Li, Y. (2018). Interference adsorption mechanisms of dimethoate, metalaxyl, atrazine, malathion and prometryn in a sediment system containing coexisting pesticides/heavy metals based on fractional factor design (resolution V) assisted by 2D-QSAR. *Chemical Research in Chinese Universities*, *34*, 397-407.
- Willermark, S. (2018). Technological Pedagogical and Content Knowledge: A Review of Empirical Studies Published From 2011 to 2016 [Article]. *Journal of Educational Computing Research*, *56*(3), 315-343. <https://doi.org/10.1177/0735633117713114>
- Zimmermann, F., Melle, I., & Huwer, J. (2021, Jun). Developing Prospective Chemistry Teachers' TPACK-A Comparison between Students of Two Different Universities and Expertise Levels Regarding Their TPACK Self-Efficacy, Attitude, and Lesson Planning Competence [Article]. *Journal of Chemical Education*, *98*(6), 1863-1874. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.0c01296>

9. Anexos

9.1 Anexo 1

Tabla 1. Artículos recolectados en base de datos WOS

#	Article Title	EndPoint	QSAR-QSPR	Suelos	Tipo de modelo	Base de datos accesibles	Origen base de datos	Tipos de descriptores	Software utilizado	Tipo de licencia
1	A simple approach to the prediction of soil adsorption	Koc	QSPR	Si	Regresión lineal	Si	Chemspider	Fisicoquímica	Matlab	Pagada
2	Prediction of Soil Adsorption	Koc	QSPR	Si	Regresión lineal múltiple	Si	DDP	Topológico	Python 3.7	Liberada
3	Novel calculator for estimation of K _{oc}		QSAR	Si	Regresión lineal	No	Sin registro	Sin registro	Sin registro	Sin registro
4	QSPR modelling of the soil sorption	Koc	QSPR	Si	Regresión lineal	No	Vcclab	Topológico	QSARINS	Liberada
5	Revealing chemophoric sites	Koc	QSPR	Si	Regresión por mínimos cuadrados múltiples	Si	Chemspider	Fisicoquímica	Chemoface	Liberada
6	Statistical equivalence of prediction of soil adsorption	Koc	QSPR	Si	Regresión lineal múltiple	Si	DDP	Sin registro	QSARINS	Liberada
7	Application of radial basis function neural network	Koc	QSAR	Si	Red neuronal de regresión generalizada	No	EPA	Topológico	DRAGON	Pagada
8	Coloured chemical image-based prediction of soil adsorption	Koc	QSPR	Si	Regresión lineal múltiple	Si	DDP	2D	Sin registro	Sin registro
9	Aug-MIA-QSPR Modeling of soil adsorption	Koc	QSPR	Si	Regresión por mínimos cuadrados parciales	Si	DDP	Fisicoquímica	Sin registro	Sin registro
10	An alternative approach for prediction of soil adsorption	Koc	QSPR	Si	Regresión lineal múltiple	Si	DDP	Fisicoquímica	DRAGON	Pagada
11	The effect of different log P values on soil adsorption	Koc	QSPR	Si	Regresión lineal	Si	Sin registro	Fisicoquímica	Minitab	Pagada
12	Molecular properties affecting K _d		QSPR	Si	Regresión lineal	No	PPDB	Cuánticos	Qikprop	Liberada
13	First report on a classification of soil adsorption	Toxicidad	QSAR	Si	Coefficiente discriminación lineal	No	EFSA	Topológico	DRAGON	Pagada
14	Interference Adsorption Mechanism of Adsorption	($\mu\text{mol}\cdot\text{g}^{-1}$)	QSAR	Si	Diseño factorial fraccional	Si	DDP	Sin registro	Minitab	Pagada
15	Partition kinetics of chlorobenzene	Constantes de velocidad (k ₁ ,k ₂)	QSAR	Si	Regresión lineal	Sin registro	Sin registro	Sin registro	Sin registro	Sin registro
16	Modeling binding of organic pollutants	K _d	QSAR	Si	Regresión lineal múltiple	No	DDP	Fisicoquímica	Material Studio	Liberada
17	Molecular properties affecting K _d		QSPR	Si	Regresión lineal múltiple	Si	PPDB	Cuánticos	Qikprop	Liberada
18	Quantitative Structure-Sorption Relationship	Koc	QSPR	Si	Regresión lineal mínimos cuadrados múltiples	No	OCHEM	Fisicoquímica	Volsurf	Liberada
19	Three-Parameter Modeling of Soil Adsorption	Koc	QSPR	Si	Regresión lineal múltiple	Si	DDP	Fisicoquímica	Chemoface	Liberada
20	Effects of halogenated aromatic hydrocarbons	Koc	QSAR	Si	Water half life	Sin registro	Sin registro	Sin registro	Sin registro	Sin registro
21	Application of various methods for prediction of soil adsorption	LogP	QSAR	Si	Regresión lineal	No	Vcclab	Fisicoquímica	STATISTICA 10.0	Pagada
22	Sorption behavior of 20 waste	K _d	QSAR	Si	Regresión lineal	No	Sin registro	Sin registro	Sin registro	Sin registro

DDP: Datos disponibles en paper

Nota. Tabla de autoría propia, información extraída de (Blondel et al., 2013; Burke et al., 2013; Daré et al., 2017; Djohan et al., 2017; Dołowy et al., 2014; dos Reis et al., 2013, 2014; Eckel, 2019; Freitas et al., 2015; Mirlaine R Freitas et al., 2014; M. R. Freitas et al., 2014; Kobayashi et al., 2020; Langeron et al., 2014; Lim & Fox, 2014; Muhire et al., 2021; Olguin et al., 2019; Olguin et al., 2017; Radian et al., 2015; Roy et al., 2020; Sabour & Movahed, 2017; Soares et al., 2014; Wang et al., 2018).

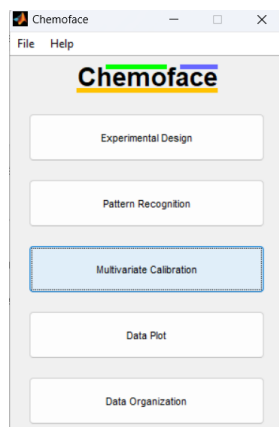
9.2 Anexo 2

Como utilizar *Chemoface* paso a paso.

- a) Seleccionar la opción “*Multivariate Calibration*”.

Figura 4

Tablero de opciones *Chemoface*.



- b) Copiar los datos correspondiente a la variable dependiente (eje Y del gráfico) desde la base de datos dispuesta en un Excel.

Figura 5

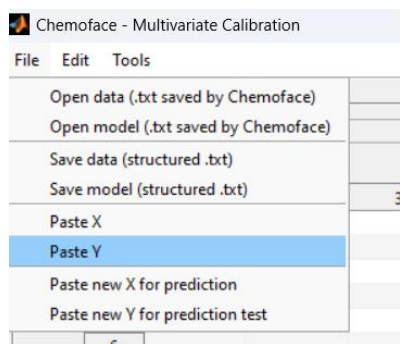
Selección de variable dependiente desde base de datos.

#	Compound	logK _{oc}	logK _{ow}	MW	MV
1	Acetanilide	1.43	1.156	135.2	132.0
2	2-Cl-acetanilide	1.58	1.786	169.6	145.5
3	3-CH ₃ -acetanilide	1.45	1.581	149.2	148.6
4	3-F-acetanilide	1.57	1.296	153.2	136.9
5	3-Cl-acetanilide	1.86	1.810	169.6	145.5
6	3-Br-acetanilide	2.01	1.941	214.1	149.9
7	3-CF ₃ -acetanilide	1.75	2.028	203.2	163.3
8	3-NO ₂ -acetanilide	1.94	1.091	180.2	155.3
9	4-F-acetanilide	1.48	1.320	153.2	136.9
10	4-Br-acetanilide	1.95	1.965	214.1	149.9
11	4-OCH ₃ -acetanilide	1.40	1.213	165.2	157.5
12	Butyranilide	1.71	2.550	163.2	165.6
13	Propachlor	2.42	2.639	211.7	196.1
14	3,4-diCl-acetanilide	2.34	2.440	204.0	159.1
15	3-Cl-4-OCH ₃	1.95	1.819	199.6	171.1
16	Alachlor	2.28	3.671	269.8	255.2
17	Butachlor	2.86	5.109	311.8	305.6
18	Norfluorazo	3.28	2.886	303.7	229.4
19	Acetchlor	2.32	3.580	269.8	255.2
20	Metholachlo	2.46	3.548	283.8	271.8
21	Matalaxyl	1.57	2.339	279.3	269.2
22	Simazine	2.10	2.251	201.7	176.6
23	Propazine	2.40	2.845	229.7	209.8

c) Dentro del panel de control, seleccionar la opción *file* y luego *paste Y*.

Figura 6

Pegar variable dependiente en programa.



d) Copiar los datos correspondiente a las variables independientes (eje X del gráfico) desde la base de datos dispuesta en un Excel.

Figura 7

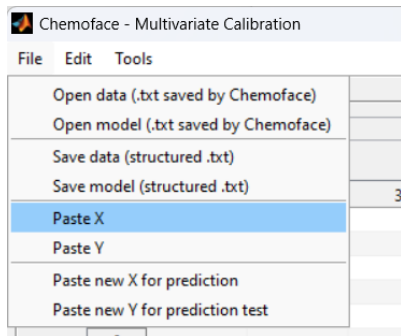
Selección de variables independientes desde base de datos.

#	Compound	logK _{oc}	logK _{ow}	MW	MV
1	Acetanilide	1.43	1.156	135.2	132.0
2	2-Cl-acetanilide	1.58	1.786	169.6	145.5
3	3-CH ₃ -acetanilide	1.45	1.581	149.2	148.6
4	3-F-acetanilide	1.57	1.296	153.2	136.9
5	3-Cl-acetanilide	1.86	1.810	169.6	145.5
6	3-Br-acetanilide	2.01	1.941	214.1	149.9
7	3-CF ₃ -acetanilide	1.75	2.028	203.2	163.3
8	3-NO ₂ -acetanilide	1.94	1.091	180.2	155.3
9	4-F-acetanilide	1.48	1.320	153.2	136.9
10	4-Br-acetanilide	1.95	1.965	214.1	149.9
11	4-OCH ₃ -acetanilide	1.40	1.213	165.2	157.5
12	Butyranilide	1.71	2.550	163.2	165.6
13	Propachlor	2.42	2.639	211.7	196.1
14	3,4-diCl-acetanilide	2.34	2.440	204.0	159.1
15	3-Cl-4-OCH ₃ -acetanilide	1.95	1.819	199.6	171.1
16	Alachlor	2.28	3.671	269.8	255.2
17	Butachlor	2.86	5.109	311.8	305.6
18	Norfluorazo	3.28	2.886	303.7	229.4
19	Acetchlor	2.32	3.580	269.8	255.2
20	Metholachlo	2.46	3.548	283.8	271.8
21	Matalaxyl	1.57	2.339	279.3	269.2
22	Simazine	2.10	2.251	201.7	176.6
23	Propazine	2.40	2.845	229.7	209.8

e) Dentro del panel de control, seleccionar la opción *file* y luego *paste X*.

Figura 8

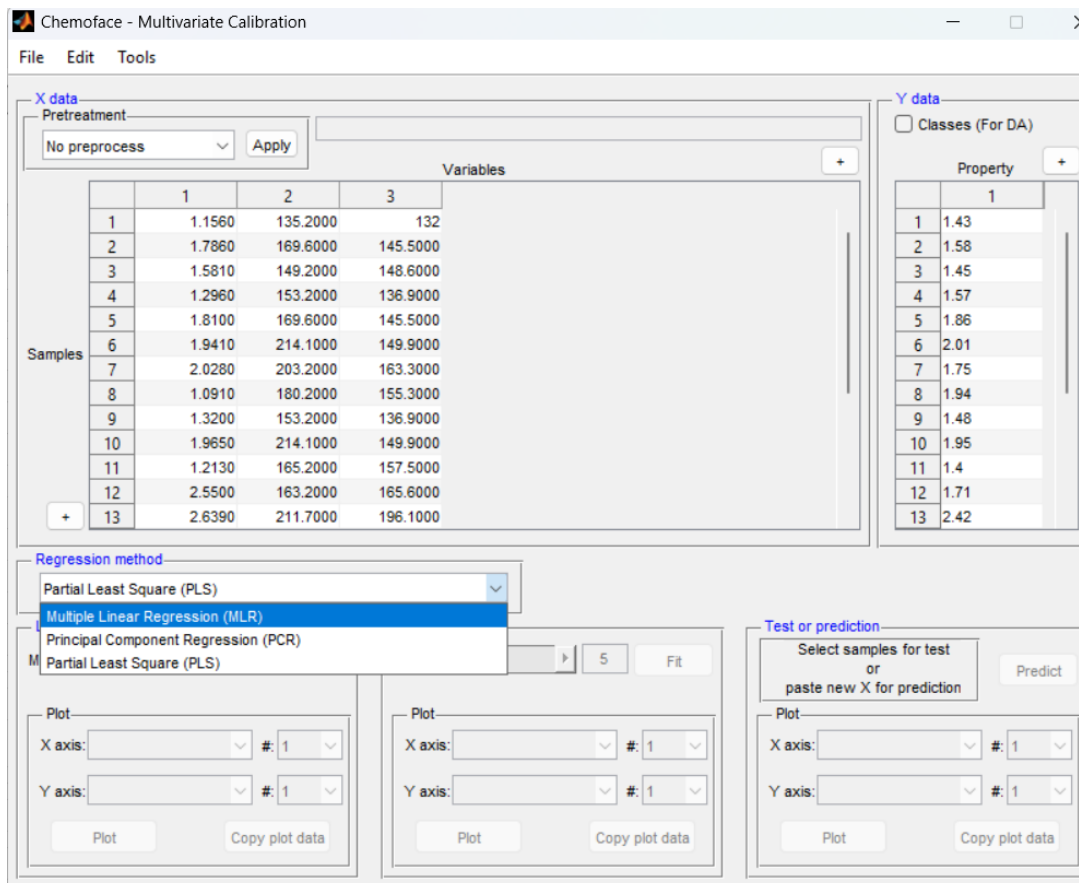
Pegar variables independientes en programa.



f) Dirigirse a la opción *regression method* y seleccionar *MLR*.

Figura 9

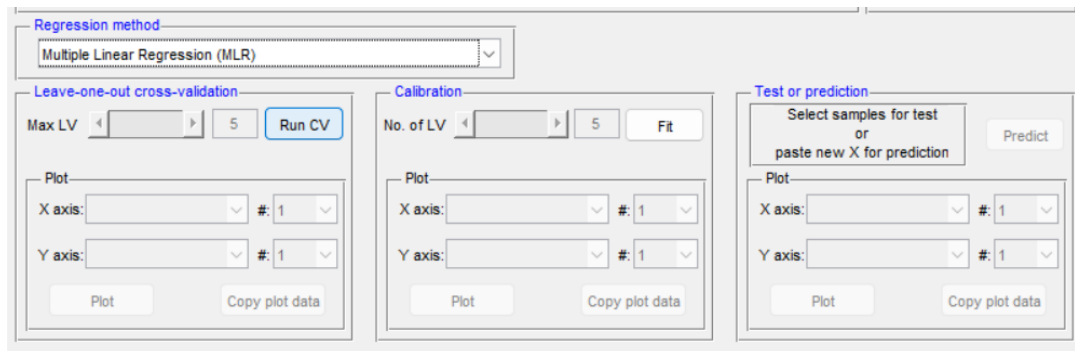
Selección del modelo de regresión lineal.



g) Dentro del panel, dirigirse a la zona de *Leave-one-out-cross-validation* y pulsar la opción *Run CV*.

Figura 10

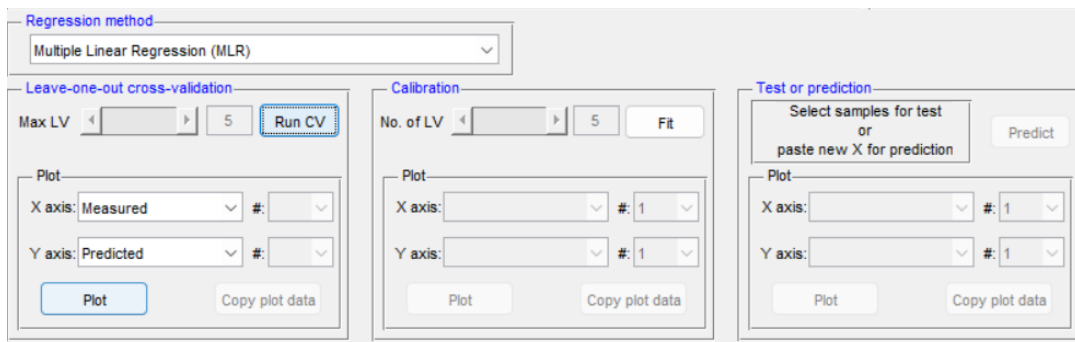
Selección de Run CV.



- h) Verificar que los ejes X e Y estén con las opciones *Measured* y *Predicted* respectivamente y pulsar *Plot*.

Figura 11

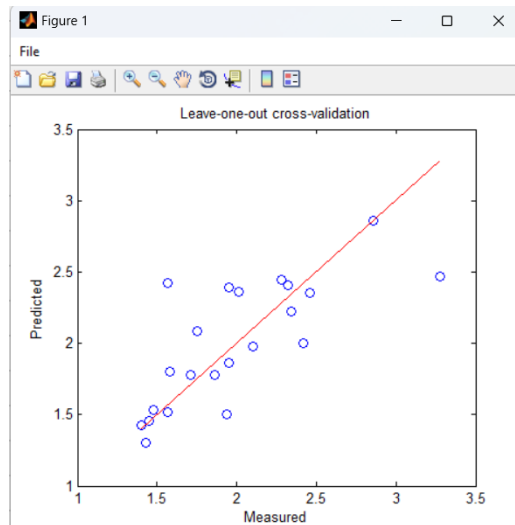
Selección de *Plot* en *leave-one-out-cross-validation*.



- i) Se obtiene el gráfico con los resultados de la *cross-validation*.

Figura 12

Resultado graficado.



j) Dentro del panel, dirigirse a la zona de *Calibration* y pulsar la opción *Fit*.

Figura 13

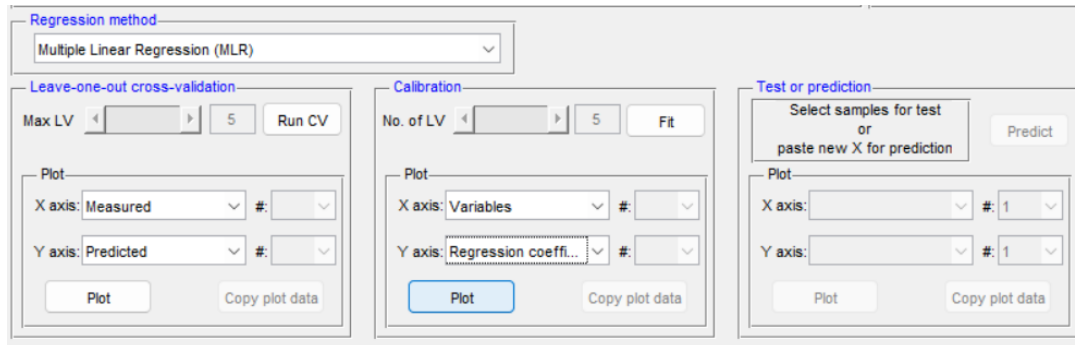
Selección de *Fit* en *Calibration*.

The screenshot displays the software's configuration panel. At the top, the "Regression method" is set to "Multiple Linear Regression (MLR)". Below this, there are three main sections: "Leave-one-out cross-validation", "Calibration", and "Test or prediction". In the "Calibration" section, the "No. of LV" is set to 5, and the "Fit" button is highlighted with a blue border. The "Test or prediction" section has a "Predict" button. Each section also includes a "Plot" area with dropdown menus for X and Y axes and "Plot" and "Copy plot data" buttons.

k) En el eje X seleccionar la opción de *Variables* y en el eje Y seleccionar la opción *Regression coefficients*. Posteriormente, pulsar *Plot*.

Figura 14

Selección de variables para obtención de resultados.



- 1) Finalmente, seleccionar la opción *Copy plot data* y pegar los resultados en una hoja Excel.

Figura 15

Copiar los resultados y exportarlos.

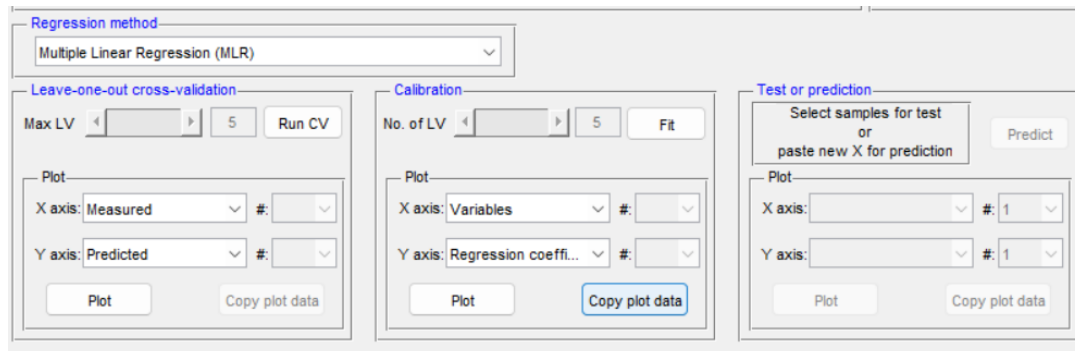


Figura 16

Resultado de coeficientes de regresión

Variables	Regression coefficients
LogKoc	0.754794437601882
LogKow	0.329386825980101
MW	0.0111432127592222
MV	-0.00998179693702721

9.3 Anexo 3

Figura 17

Base de datos para propuesta de módulo.

#	Compound	logK _{oc}	logK _{ow}	MW	MV
1	Acetanilide	1.43	1.156	135.2	132.0
2	2-Cl-acetanilide	1.58	1.786	169.6	145.5
3	3-CH ₃ -acetanilide	1.45	1.581	149.2	148.6
4	3-F-acetanilide	1.57	1.296	153.2	136.9
5	3-Cl-acetanilide	1.86	1.810	169.6	145.5
6	3-Br-acetanilide	2.01	1.941	214.1	149.9
7	3-CF ₃ -acetanilide	1.75	2.028	203.2	163.3
8	3-NO ₂ -acetanilide	1.94	1.091	180.2	155.3
9	4-F-acetanilide	1.48	1.320	153.2	136.9
10	4-Br-acetanilide	1.95	1.965	214.1	149.9
11	4-OCH ₃ -acetanilide	1.40	1.213	165.2	157.5
12	Butyranilide	1.71	2.550	163.2	165.6
13	Propachlor	2.42	2.639	211.7	196.1
14	3,4-diCl-acetanilide	2.34	2.440	204.0	159.1
15	3-Cl-4-OCH ₃ -acetanilide	1.95	1.819	199.6	171.1
16	Alachlor	2.28	3.671	269.8	255.2
17	Butachlor	2.86	5.109	311.8	305.6
18	Norfluorazon	3.28	2.886	303.7	229.4
19	Acetchlor	2.32	3.580	269.8	255.2
20	Metholachlor	2.46	3.548	283.8	271.8
21	Matalaxyl	1.57	2.339	279.3	269.2
22	Simazine	2.10	2.251	201.7	176.6
23	Propazine	2.40	2.845	229.7	209.8
24	Ametryn	2.59	2.728	213.3	197.8
25	Terbutryn	2.85	3.537	241.4	230.6
26	Prometron	2.60	3.033	225.3	221.8
27	Atrazine	2.24	2.548	215.7	193.2
28	Ipazine	2.91	3.916	257.8	243.4
29	Trietazin	2.76	3.619	243.7	226.8
30	Dipropetryn	3.07	3.698	255.4	247.8
31	Terbutylazirone	2.32	3.061	229.7	209.5
32	Prometryn	2.85	3.322	241.4	231.0
33	Metribuzin	1.71	1.460	214.3	192.2
34	Cyanazine	2.28	2.470	240.7	209.8
35	Sec-Bumeton	2.78	3.272	225.3	222.0
36	Metamitron	2.17	0.357	202.2	179.3

Nota. Base de datos extraídos de (M. R. Freitas et al., 2014)