

VISUALIZACIÓN MOLECULAR CON JMOL: UNA HERRAMIENTA EDUCATIVA PARA BACHILLERATO

GARRIDO GARRIDO, M. (1)

CIENCIAS NATURALES. COLEGIO GUADALAVIAR belengarrido@gmail.com

Resumen

La visualización de modelos moleculares en páginas web mediante Jmol, es un recurso que facilita el estudio de la estructura molecular. Los modelos moleculares visualizados con este visor son *“moléculas activas”* ya que admiten distintas manipulaciones por parte del usuario mediante el teclado y el ratón.

En este trabajo se propone una serie de actividades sobre proteínas diseñadas en páginas web basadas en Jmol. Están dirigidas a alumnos de Biología de 2º de bachillerato, y posibilitan un estudio práctico que complementa al método tradicional de la pizarra y el libro de texto ya que es posible analizar, de modo interactivo, aspectos básicos de la estructura proteica. Al ofrecer un enfoque interactivo se enriquece el proceso de aprendizaje de las proteínas y se favorece el aumento significativo de la comprensión del aspecto tridimensional de estas biomoléculas.

Objetivos

Llevando a cabo actividades sobre proteínas basadas en el visor Jmol (applet de Java) se pretende que los alumnos de bachillerato desarrollen la visión en 3D y usen una herramienta que, además de visualizar modelos moleculares, les permita llevar a cabo un análisis estructural básico de estas biomoléculas y, por lo tanto, captar con mayor profundidad los aspectos estructurales tridimensionales de las mismas. De este

modo los alumnos pueden conseguir un aumento significativo de la comprensión de las proteínas, ser conscientes de su complejidad, de la importancia que tiene la estructura tridimensional para el funcionamiento de las mismas y su implicación en distintos procesos biológicos.

Marco teórico

Los modelos de estructuras moleculares o modelos moleculares son muy útiles para el estudio de todos aquellos aspectos de la química y biología que tienen que ver con la forma tridimensional de las moléculas. La investigación didáctica ha constatado que los estudiantes mejoran en el aprendizaje significativo de la geometría molecular cuando manejan modelos moleculares (Ingham et al, 1991).

Cuando un profesor de bachillerato aborda el estudio estructural de las biomoléculas, normalmente usa modelos moleculares impresos, principalmente como imágenes del libro de texto. El recurrir a estas representaciones impresas, aunque ayuda a la visualización espacial, tiene deficiencias ya que es difícil que una representación plana de algo tridimensional refleje adecuadamente su estructura real.

La informática juega un papel muy importante en el campo del modelado y visualización espacial de modelos moleculares ya que facilita la elaboración y el uso de los mismos. Existen distintas aplicaciones informáticas dirigidas a la visualización de modelos moleculares, una de ellas es el *plug-in* Chemscape Chime, ampliamente utilizado durante los últimos diez años para visualizar modelos moleculares en páginas web (Garrido y col. 2001).

En la actualidad el visor Jmol es el que conjuga la mejor relación sencillez de uso/cantidad de recursos y está desplazando a Chime. Jmol es un visor Java de código abierto para estructuras químicas en tres dimensiones (<http://www.jmol.org/>). Como es un Applet de Java es multiplataforma y compatible con cualquier navegador de páginas web.

Este visor consta de varios componentes; entre ellos, el que interesa para la propuesta educativa que aquí se expone, es el *JmolApplet*, miniaplicación que puede integrarse en páginas web y es ideal para el desarrollo de material docente a través de la web.

Cuando se abre una página web implementada con Jmol, se visualizan directamente en la pantalla estructuras moleculares tridimensionales a partir de ficheros de coordenadas moleculares (archivos con formatos pdb, mol y muchos otros correspondientes a programas de visualización molecular) embebidos en dichas páginas. Estos modelos no son simples imágenes estáticas sino que son “*moléculas activas*” ya que permiten interactividad. Mediante el teclado y el ratón el usuario puede realizar sobre los modelos moleculares que aparecen en la pantalla del ordenador distintas operaciones: giros, desplazamientos, cambios de tamaño, tipo de representación molecular, resaltar la estructura secundaria de una proteína o el esqueleto de un ácido nucleico, medir distancias y ángulos, entre otras.

El uso más básico de Jmol es acceder a algún tutorial basado en Jmol. En la Web existen una gran cantidad de este tipo de tutoriales; la mayoría de ellos son de nivel universitario aunque hay algunos como BioModel (www2.uah.es/biomodel) que tienen apartados dirigidos a la educación secundaria. Para que su uso sea eficaz, en muchos casos, es interesante que el profesor personalice las actividades que los alumnos deben llevar a cabo sobre estos tutoriales.

En un segundo nivel el profesor con un conocimiento intermedio de informática puede crear sus propios materiales (Herráez, 2007).

Metodología

He diseñado varias actividades basadas en Jmol para que mis alumnos de 2º de bachillerato analicen aspectos básicos de la estructura proteica. Se puede acceder a ellas a través de la página www.uv.es/mabegaga/tallerdemoleculas/.

Estas actividades son complementarias a la exposición tradicional previa por parte del profesor del tema “Proteínas” en la asignatura de Biología de 2º de bachillerato. Se desarrollarán en el aula de informática en dos sesiones de 50 minutos. Los alumnos trabajarán en parejas o grupos de tres.

En la primera sesión el profesor hará una pequeña introducción sobre la importancia de los modelos

moleculares, explicando qué es Jmol y sus posibilidades como visualizador de modelos moleculares. Los alumnos accederán on line a la página “Guía Jmol” y aprenderán y practicarán las manipulaciones básicas que se pueden hacer con el ratón-teclado sobre las “moléculas activas” visualizadas con Jmol.

En la segunda sesión accederán a la página “Investigando proteínas” donde podrán cargar en la pantalla modelos moleculares de distintas proteínas sobre los que harán las actividades propuestas por el profesor. Los alumnos deberán manipular los modelos moleculares para conseguir resolver las distintas cuestiones propuestas y elaboraran un documento de texto con las respuestas; en algunos casos, deberán insertar alguna imagen de modelos moleculares capturadas de la pantalla del ordenado. Al acabar la actividad mandarán este documento al profesor de la asignatura vía e-mail. En cada actividad hay un enlace que los alumnos pueden visitar para complementar su conocimiento sobre la proteína estudiada.

Conclusiones

Debido a sus características de interactividad y de visualización tridimensional, el uso páginas web basadas en Jmol ayuda a que los alumnos aumenten de modo significativo su comprensión sobre el aspecto tridimensional de las proteínas. También aumenta la motivación en el aprendizaje de esta materia y predisponde al alumnado para una indagación personal sobre el tema, interesándolos por aspectos CTS (enfermedades genéticas, biotecnología...) relacionados con las proteínas. También, cada vez más, la formación informática de los profesores hace posible que estos puedan diseñar y crear recursos didácticos propios basados en Jmol. Este aspecto es muy interesante ya que de este modo se pueden utilizar en el aula recursos personalizados y contextualizados lo que, en principio, debe conducir a una mayor eficacia en el aprendizaje de los alumnos.

Referencias bibliográficas

GARRIDO GARRIDO M.B., CASTELLÓ HERNÁNDEZ M. Y FURIÓ MÁS C. (2001). *Manipulación de moléculas en las páginas web mediante el plug-in Chime*. Alambique. Didáctica de las Ciencias Experimentales, 30, pp. 67-74.

HERRÁEZ, A (2007). *Cómo utilizar Jmol para estudiar y presentar estructuras moleculares*. Morrisville, NC, USA: Lulu Enterprises

INGHAM, A., POLYTECHNIC, T. AND GILBERT, J. (1991). *The use of analogue models by students of chemistry at higher education level*. *International Journal of Science Education*, 13 (2), pp. 193-302.

CITACIÓN

GARRIDO, M. (2009). Visualización molecular con jmol: una herramienta educativa para bachillerato. *Enseñanza de las Ciencias*, Número Extra VIII Congreso Internacional sobre Investigación en Didáctica de las Ciencias, Barcelona, pp. 1724-1728
<http://ensciencias.uab.es/congreso09/numeroextra/art-1724-1728.pdf>