

Codificació de models moleculars amb SMILES™ i visualització tridimensional amb Jmol: un exemple de pràctica reflexiva

ÁNGEL LUCAS DE LA CRUZ I CARLOS GIMÉNEZ ESTEBAN

Col·legi Sant Gabriel (Viladecans)

RESUM

Ja fa temps que les tecnologies de la informació i la comunicació (TIC) estan presents a l'aula, però sovint simplement es tracta de substituir el format paper per un format digital, sense cap valor afegit. Nosaltres pensem que cal anar més enllà i cercar aplicacions d'aquestes noves tecnologies que realment impliquin un canvi metodològic en el professorat i una millora en la comprensió de conceptes complexos per part de l'alumnat.

En aquesta comunicació, volem compartir una experiència d'aula basada en la pràctica docent reflexiva i consistent en l'ús de programari gratuït que permet la generació de models moleculars de compostos orgànics, la seva representació tridimensional i la seva manipulació.

Aquesta comunicació és una versió resumida de l'article homònim publicat pels autors a *Educació Química EduQ* (Lucas i Giménez, 2010).

PARAULES CLAU

Experiència d'aula, pràctica reflexiva, TIC, models moleculars, SMILES™.

OBJECTIUS

«Una recent campanya publicitària anuncia la retirada dels aliments que contenen greixos “trans” per part d'una cadena de distribució alimentària (Eroski)».

Vam considerar que aquesta informació reunia els requisits necessaris per prendre-la com a punt de partida de la nostra acció docent a partir de la reflexió següent: els nostres alumnes entenen els conceptes científics implicats en aquesta notícia?, de quina manera ens poden ajudar les TIC a millorar aquesta comprensió?

De seguida vam veure que calia dotar els nostres alumnes de les eines necessàries perquè fossin capaços d'entendre que la disposició tridimensional dels àtoms d'una molècula és especialment rellevant per entendre algunes de les seves propietats.

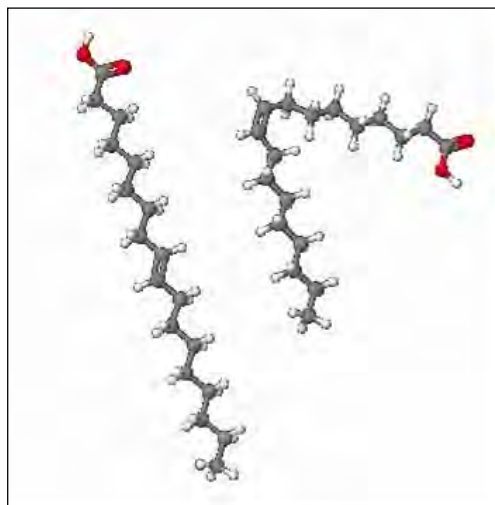


FIGURA 1. Diferència estructural entre els isòmers «trans» (esquerra) i «cis» (dreta) d'un àcid gras.

DESENVOLUPAMENT DE L'EXPERIÈNCIA

El nostre procés de recerca de l'estratègia més adient per a aquest context va estar orientat en tot moment pels criteris bàsics següents:

- Senzillesa: calia trobar un sistema fàcil d'aprendre i d'utilitzar sense renunciar al fet que la solució triada fos versàtil i aplicable a altres contextos.
- Estandardització: el sistema triat havia de ser el més acceptat possible en diversos àmbits científics.
- Programari lliure o gratuït: calia una solució que es pogués utilitzar i compartir sense cost i que fos respectuosa amb les corresponents llicències dels seus autors.

Guiats per aquests principis i havent fet una recopilació i una valoració de diverses solucions, vam arribar a establir una seqüència de treball que implicava l'ús de les eines següents:

- Un llenguatge de codificació de molècules: SMILES™.
- Un programari capaç de calcular la posició tridimensional relativa dels àtoms d'una molècula: ChemSketch®.

- Un visor tridimensional de models moleculars que permet realitzar manipulacions i càlculs a partir d'aquests models: Jmol.

Un cop establerta i comprovada l'eficàcia d'aquesta seqüència, vam dissenyar una experiència d'aula en format de seminari per tal d'instruir els nostres alumnes en l'ús del programari triat i en la comprensió de les diferents fases del procés, així com de les correspondències entre els models generats i les molècules «reals» representades per aquests models.

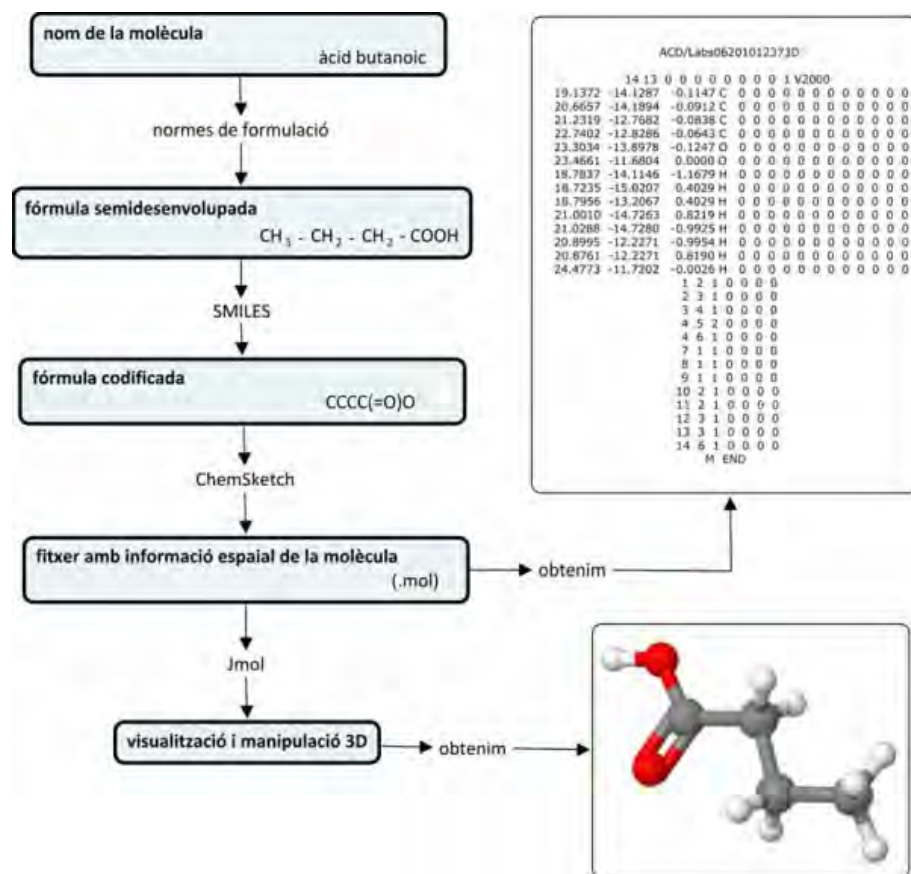


FIGURA 2. Esquema de la seqüència completa.

El seminari s'estructura en dues sessions: una primera sessió introductòria del llenguatge SMILES™ i del programari i una altra sessió, més específica, d'isomeries.

Al començament de la primera sessió, els alumnes reben un dossier amb les normes d'escriptura SMILES™ i un full d'exercicis.

La primera part d'aquesta primera sessió consisteix a explicar als alumnes la raó del seminari, els trets més característics del llenguatge SMILES™ i tot el que té a veure amb la descàrrega, la instal·lació i la manipulació del programari necessari.

A la segona part de la primera sessió, els alumnes posen en pràctica el que se'ls ha explicat, tot realitzant uns exercicis d'aplicació.

Es convida els alumnes a visitar pàgines web en les quals es fa servir SMILES™ com un llenguatge químic més, com ara *ChemSpider* (<http://www.chemspider.com/SimpleSearch.aspx>) o la versió en anglès de *Wikipedia* (http://en.wikipedia.org/wiki/main_page).

La segona sessió del seminari es realitza unes setmanes després de la primera i s'hi tracten essencialment les qüestions relatives a les isomeries.

L'estructura d'aquesta segona sessió és molt similar a la primera, però l'exposició que fem els professors sobre el llenguatge SMILES™ implicat en aquest apartat és més específica, amb més exemples i més comentaris de cada cas.

Els alumnes practiquen amb exercicis preparats per a la sessió, resolen els seus dubtes, superen les dificultats i marxen cap a casa amb nous exercicis per resoldre.

RESULTATS

Els instruments d'observació que utilitzem són els següents:

– A les matèries de Química i de Biologia s'inclouen, a partir d'aquest moment i amb total naturalitat, referències tant al llenguatge SMILES™ com a l'observació de models amb Jmol.

– Els alumnes que realitzen treballs de recerca d'aquest àmbit hi incorporen els coneixements adquirits en aquesta activitat.

– Les matèria de Química de 1r de batxillerat inclou l'estudi de l'enllaç químic, en el qual s'utilitzen, entre altres conceptes, els paràmetres de l'enllaç covalent (energia, longitud i angle).

– Les implicacions geomètriques de certes isomeries resulten més fàcils de comprendre per part dels alumnes.

Finalment, aquesta activitat ens ha permès aprofundir en el concepte *model molecular*. Així, vam poder explicar fàcilment als alumnes la diferència entre la realitat i la modelització d'aquesta realitat.

CONCLUSIONS

Podem concloure que, després d'aquesta experiència, els alumnes han mostrat una major competència en comparació a anys anteriors a l'hora de comprendre els conceptes implicats. D'altra banda, resulta un fet objectiu que l'ús combinat de SMILES™, ChemSketch® i Jmol proporciona als alumnes unes eines TIC que els ajuden a entendre algunes qüestions no precisament trivials relacionades amb l'enllaç químic.

REFERÈNCIES BIBLIOGRÀFIQUES

HERRÁEZ, A. (2007). *Cómo utilizar Jmol para estudiar y presentar estructuras moleculares*. Vol. 1: *Aprendiendo a usar Jmol (niveles básico e intermedio)*. Morrisville: Lulu Enterprises.

LUCAS, A.; GIMÉNEZ, C. (2010). «Codificació de models moleculars amb SMILES™ i visualització tridimensional amb Jmol: Un exemple de pràctica reflexiva». *Educació Química EduQ*, 7: 15-22.

PÀGINES WEB

Advanced Chemistry Development [en línia]. Toronto: Advanced Chemistry Development, Inc. <<http://www.acdlabs.com/resources/freeware/>> [Consulta: 17 juny 2010]

Biomodel: Complementos de bioquímica y biología molecular [en línia]. Madrid: Universidad de Alcalá de Henares <<http://biomodel.uah.es/>> [Consulta: 17 juny 2010]

ChemSpider: Building community for chemists [en línia]. Londres: Royal Society of Chemistry <<http://www.chemspider.com/simplesearch.aspx>> [Consulta: 17 juny 2010]

Daylight Chemical Information Systems, Inc. [en línia]. Laguna Niguel: Daylight Chemical Information Systems, Inc. <<http://www.daylight.com/smiles/index.html>> [Consulta: 16 juny 2010]

Eroski [en línia]. Elorrio: Eroski. <<http://www.eroski.es/es/salud-y-bienestar/todo-lo-que-debes-saber-sobre-las-grasas-trans>> [Consulta: 21 juny 2010]

Jmol: Un visor Java de código abierto para estructuras químicas en tres dimensiones [en línia]. Mountain View: Geeknet, Inc. <<http://jmol.sourceforge.net/index.es.html>> [Consulta: 17 juny 2010]

Online SMILES™ translator and structure file generator [en línia]. Bethesda: National Cancer Institute. <<http://cactus.nci.nih.gov/translate/>> [Consulta: 17 juny 2010]

The Chemistry Development Kit [en línia]. Mountain View: Geeknet, Inc. <<http://cdk.sf.net/>> [Consulta: 20 juny 2010]

Wikipedia: The free encyclopedia [en línia]. San Francisco: Wikimedia Foundation. <http://en.wikipedia.org/wiki/main_page> [Consulta: 17 juny 2010]