

Visualização de Objetos Moleculares: interfaces de ensino, pesquisa e extensão entre a Educação em Química e a Engenharia de Software

Marcelo Giordan¹, Jackson Góis¹, Romero Tori², Roberto Bianchini², Taciana Montes², Yuri Correa² e João Bernardes².

¹Faculdade de Educação, ²Escola Politécnica, Universidade de São Paulo.

Palavras-chaves: objetos moleculares, linguagem química, representações, visualização tridimensional, WEB e educação a distância.

Introdução.

A Química é uma ciência alicerçada em um paradigma funcional-estruturalista que adota o princípio fundamental de que as propriedades e transformações dos materiais podem ser satisfatoriamente explicadas pela teoria atômico-molecular. No estágio atual, a representação de átomos, moléculas, adutos, agregados e outras partículas constituintes dos materiais são fatores determinantes para a elaboração do pensamento químico e esta é uma das razões para adotar a visualização de objetos moleculares como estratégia de ensino, especialmente quando já é possível levá-la à sala de aula por meio de computadores disponíveis em grande parte das escolas.

De acordo com Gabel (1998), três níveis de representação em Química são importantes: *macroscópico*, onde os processos químicos são observados; *microscópico*, onde os fenômenos são explicados pelo arranjo e movimentação de átomos, moléculas ou partículas subatômicas; *simbólico*, onde ocorre a representação dos fenômenos através de símbolos, números, fórmulas, equações e estruturas. É sabido também que os estudantes de ensino médio têm dificuldade em entender as representações nos níveis microscópico e simbólico porque estes são de natureza imaginada e abstrata, enquanto o pensamento desses estudantes geralmente se apóia em informações sensoriais.

De acordo com Wu e col. (2001), alunos, que utilizam objetos moleculares físicos e computacionais, obtêm melhor pontuação em testes de retenção de informações, em comparação com estudantes que utilizam apenas representações bidimensionais ou tridimensionais. Anjos (2004) observou um aumento significativo da compreensão e interpretação das relações 'nomenclatura-propriedade-estrutura' de substâncias orgânicas, quando os alunos utilizaram objetos moleculares para construir modelos e resolver problemas em sala de aula. Portanto, os objetos moleculares, enquanto representações das partículas submicroscópicas, cujo meio de veiculação pode variar desde o papel, conjuntos plásticos, isopor e madeira, tela do computador ou projeção holográfica, podem contribuir decisivamente para a construção de significados sobre fenômenos de transformação da matéria e para elaborar modelos explicativos acerca das propriedades e estrutura dos materiais.

Um dos fatores limitantes para o uso educacional de objetos moleculares no ambiente computacional é a ausência de aplicativos integráveis à interface Web, especialmente quando se trata de versões em português. Adicionalmente, as poucas versões disponíveis não permitem ao estudante produzir suas próprias representações, o que o impede de tratar os objetos moleculares como simulações computacionais.

Por outro lado, desenvolver aplicativos para visualização de objetos moleculares é uma ótima oportunidade para o aprimoramento das competências de grupos de pesquisa de Educação e Engenharia. Estas competências dizem respeito tanto às pesquisas, quanto à formação dos profissionais professores e engenheiros de software. Na medida em que o

ensino e a pesquisa estejam articulados com vistas ao desenvolvimento dos aplicativos, também a extensão universitária será contemplada, pois os aplicativos terão como usuários finais alunos e professores de escolas da educação básica. Neste sentido, a parceria de grupos de pesquisa de áreas como Educação e Engenharia da Computação afeta diretamente a formação de estudantes e pesquisadores da universidade e indiretamente a formação de alunos e professores da educação básica.

Sendo o motivo da parceria entre grupos de pesquisa desenvolver uma solução para um problema típico da sala de aula, o processo de produção de conhecimento na educação e na engenharia torna-se condicionado pelas formas como universidade e escola interagem, o que permite instaurar um diálogo construtivo entre essas instituições, caso haja condições para que as demandas das escolas, no que diz respeito à infraestrutura computacional e de comunicação em rede, sejam atendidas. Satisfeita esta exigência é possível prever que os aplicativos sejam criticamente utilizados por professores e alunos nas escolas e que essa utilização crítica subsidie o próprio desenvolvimento dos aplicativos. Assim, uma outra consequência direta da parceria entre grupos de pesquisa de Educação e Engenharia é desenvolver um processo de produção de aplicativos computacionais que contribua para a melhoria das condições de ensino na sala de aula, aportando com soluções referendadas pela própria escola.

Por estas razões, relatamos neste artigo um projeto em desenvolvimento sobre a produção de ferramentas computacionais que permitem construir representações de moléculas nos níveis microscópico e simbólico.

O desenvolvimento de aplicativos de visualização de objetos moleculares.

Inicialmente, analisamos o aplicativo *Java Molecular Viewer* (JMV, 2004). Desenvolvido na plataforma *Java 2* com o auxílio da API *Java3D*, o JMV é um aplicativo de código aberto capaz de gerar representações de moléculas de pequena e elevada massa molecular a partir de arquivos em formato PDB (*protein data bank*). É possível também obter arquivos de saída em formato PDB ou JPEG de objetos moleculares que tenham sido manipulados pelos usuários, conservando sua orientação e os estilos de representação. Estes estilos variam desde simples linhas que conectam centros atômicos, até esferas maciças que conferem uma percepção do volume ocupado pelo objeto molecular no espaço. Outros recursos do aplicativo, que pode rodar de maneira independente ou embutido em um *browser*, são as variações de cores, gradientes de cores, iluminação e profundidade. É possível ao usuário aumentar ou diminuir, rodar e transladar o objeto molecular utilizando os botões do mouse ou combinações com teclas.

Algumas deficiências do JMV são a mobilização excessiva de memória virtual, a ausência de estilos de representação de distribuição de carga, de formas vazadas de representação e de combinações de representações. Nossa intenção é resolver essas deficiências, criando um novo aplicativo baseado também na plataforma *Java 2*, mas usando a API JOGL (*Java bindings for OpenGL*), de modo que, além das funcionalidades já apresentadas pelo JMV, duas outras interfaces capazes de gerar representações de objetos moleculares estejam disponíveis. Em uma delas, estudamos a possibilidade de converter representações bidimensionais de objetos moleculares em objetos dotados das funcionalidades já descritas. A segunda interface, que está em estágio avançado de desenvolvimento, permite gerar arquivos PDB a partir de uma entrada com a fórmula estrutural estendida, ou simplificada.

Temos desenvolvido esta interface de arquitetura molecular em linguagem C padrão ANSI. Nela, o usuário, através de uma página do tipo formulário, envia uma *string* contendo uma seqüência de letras e números que caracterizam a fórmula estrutural

simplificada (CH₃CH₂CH₂CH₃). Esta entrada é lida por uma interface CGI (Perl ou PHP) que aciona o programa *Construtor*. Este último gera um arquivo em formato próprio para o programa *Tinker-Minimize*, contendo o posicionamento dos átomos e a matriz de conectividade da molécula equivalente a entrada recebida. O *Tinker-Minimize* é uma aplicação capaz de obter geometrias moleculares otimizadas, segundo processos de interações auto-consistentes baseadas na minimização de energia e em parâmetros de mecânica e dinâmica molecular.

O mesmo programa, *Construtor*, submete o arquivo recém gerado para o programa de otimização da geometria, o qual resulta em um arquivo tipo PDB equivalente à entrada recebida. A interface CGI devolve o arquivo em formato PDB para o usuário, que o visualizará através do aplicativo de visualização de objetos moleculares.

Perspectivas.

Nossa intenção com esse projeto é iniciar uma parceria entre laboratórios de pesquisa em Educação e Engenharia para resolver problemas de pesquisa já detectados na literatura da área de Educação em Ciências, como os efeitos da visualização de objetos moleculares na construção de significados (Giordan, 2003), bem como aperfeiçoar o desenvolvimento de interfaces de animação e simulação, utilizando a plataforma *Java 2* e *JavaScript* de forma a complementar a troca de informações entre os elementos do mundo virtual (Cardoso, Lamounier e Tori, 1999).

Referências.

- ANJOS, E. I. Modelos mentais e visualização molecular: uma estratégia para ensinar química orgânica. Dissertação de mestrado. Universidade de São Paulo, 130 pp., 2004.
- CARDOSO, A.; LAMOUNIER, E. e TORI, R. Sistema de Criação de Experiências de Física em Realidade Virtual para Educação a Distância. *II Workshop Brasileiro de Realidade Virtual - WRV'99*, Marília, SP, 1999.
- GABEL, D. The complexity of chemistry and implications for teaching. In B.J. Fraser e K.G. Tobin (Eds.), *International handbook of science education*, Boston, M.A: Kluwer Academic Publishers. p. 233-248, 1998.
- GIORDAN, M. O computador na escola: questões de pesquisa na educação em ciências. Conferência Plenária do *IV Encontro de Pesquisa em Educação em Ciências*. Bauru, SP., 17 pp., 2003.
- JMV (2004): Java Molecular Viewer. Documento eletrônico:
<http://www.ks.uiuc.edu/Research/jmv/> acessado em 14/07/04.
- Tinker Molecular Modeling Package. Ponder, J.W., Richards, F.M., *J. Comput. Chem.* 1987, **8**, 1016-1024.
- WU, H.; KRAKCIK, J. S. e SOLOWAY E. Promoting understanding of chemical representations: students' use of a visualization tool in the classroom. *Journal of Research in Science Teaching* v. 38, n. 7, p. 821-842, 2001.