

Construtor de Objetos Moleculares

Jackson Gois¹, Marcelo Giordan¹

¹LAPEQ – Faculdade de Educação – Universidade de São Paulo (USP)

CEP 05508-900 – São Paulo – SP – Brasil

{jacksong,giordan}@fe.usp.br

Abstract. *We describe in this abstract a constructor of molecular objects and the results of its utilization by high-school students. With this program it is possible to build virtual three-dimensional molecular objects that can be generated and manipulated by the students in a computer with internet access.*

Resumo. *Descrevemos neste resumo um construtor de objetos moleculares e os resultados obtidos na utilização deste por alunos de ensino médio. Através deste programa é possível construir objetos moleculares tridimensionais virtuais que podem ser gerados e manipulados pelos estudantes em um computador com acesso a internet.*

1. Introdução

Construtor é um software de construção e visualização molecular, utilizável através do protocolo de comunicação via hipertexto disponível na internet (<http://einstein.fe.usp.br>). Este software foi escrito por nosso grupo para ser executado em servidor com ambiente GNU/Linux, nas distribuições RedHat 9.0 ou Fedora de qualquer versão. Outras distribuições ainda não foram testadas. A interface gráfica com o usuário pode ser acessada pela internet a partir de sistemas operacionais Windows®, a qual oferece uma área onde o usuário pode enviar a fórmula estrutural condensada de hidrocarbonetos, compostos halogenados, álcoois, aldeídos, cetonas e éteres (exemplos: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COCH}_3$ ou $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}_3$) para o computador servidor. Até o momento o programa Construtor é capaz de construir moléculas de cadeia simples ou ramificadas, de cadeia principal aberta ou cíclica com até 30 átomos, e ramificações com até 4 átomos, bem como também moléculas com insaturações correspondentes a ligações duplas e triplas. O servidor devolve automaticamente, como resposta ao usuário, um arquivo correspondente à fórmula estrutural tridimensional geometricamente otimizada da molécula em questão, com a opção de o arquivo conter informações correspondentes ao movimento relativo entre os átomos da molécula. Através deste programa estudantes de ensino médio podem visualizar a fórmula tridimensional de uma molécula a partir de sua fórmula estrutural condensada de maneira simplificada, sem a necessidade de conhecimentos sobre a utilização de programas de mecânica e dinâmica molecular, que apresentam dificuldades de uso até mesmo para estudantes do ensino superior e pós-graduação.

2. Metodologia

Descreveremos a seguir o funcionamento do programa no servidor. A página tipo hipertexto disponível na internet disponibiliza um campo (figura 1) onde o usuário

escreve a fórmula estrutural condensada de uma das estruturas reconhecidas pelo programa até o momento.

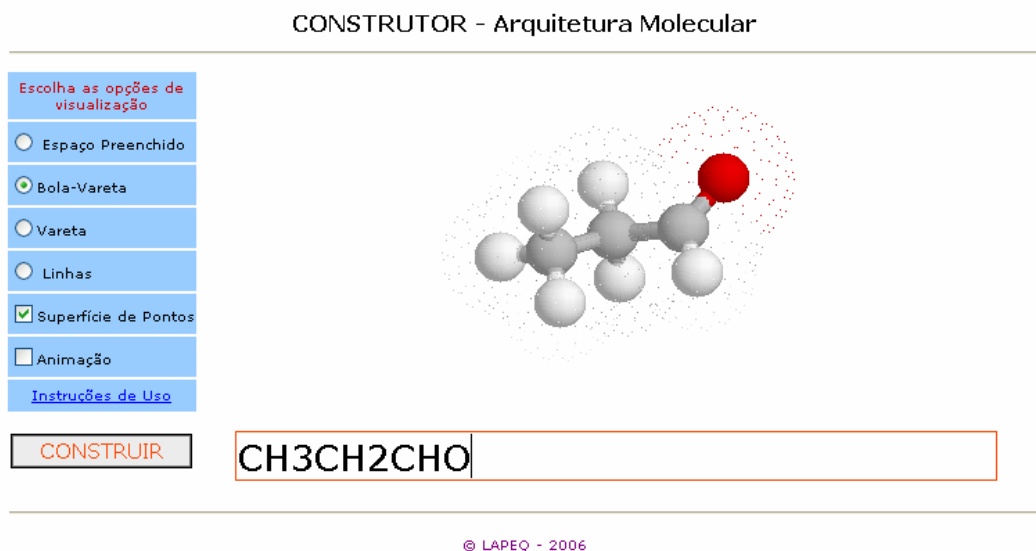


Figura 1. A figura representa um objeto molecular construído com o auxílio do programa Construtor.

Ao lado do campo onde o usuário escreve a fórmula existe um botão (construir) que, ao ser acionado, envia a seqüência de letras e números, a que chamaremos de *string*, escrita pelo usuário para o servidor. A página hipertexto, através do método POST, envia a *string* para um *script*, chamado MOLECULA, escrito em linguagem PHP, presente no servidor. Este *script*, MOLECULA, é executado no servidor, o qual envia a *string* recebida para um programa escrito em linguagem C padrão ANSI [Kernighan, 1988] para ambientes GNU/Linux, chamado Construtor. O programa Construtor, a partir da *string* recebida, constrói um arquivo com coordenadas tridimensionais e matriz de conectividade, a qual indica quais átomos estão conectados entre si. Este arquivo tem formato XYZ, próprio para utilização dos programas do pacote Tinker [Ponder, 1987] de Mecânica e Dinâmica Molecular, livre para uso acadêmico e disponível na internet (<http://dasher.wustl.edu/tinker>). O programa Construtor, após a construção do arquivo correspondente a *string*, executa uma otimização de geometria a partir do arquivo recém-construído, através do pacote de programas Tinker. Em seguida, o programa Construtor executa uma dinâmica molecular suficiente para gerar 200 quadros de movimentação molecular (simulação de 200 femtosegundos salvando 1 quadro a cada femtosegundo), também com o uso do pacote de programas Tinker, o qual retorna um arquivo em coordenadas tipo PDB referente à molécula em questão. O *script* MOLECULA retorna este último arquivo em formato PDB, geometricamente otimizado e com passos de dinâmica molecular, de volta para o usuário, que pode visualizá-lo automaticamente se instalar um *plug-in* disponibilizado na mesma página. O sistema se encontra completamente automatizado, de forma que o usuário necessita apenas digitar uma fórmula estrutural condensada no campo apropriado e clicar no botão “construir”.

3. Resultados

Adaptamos o software descrito neste trabalho em uma sequência de ensino para alunos do ensino médio sobre o tema petróleo, com o objetivo de estudo da estrutura tridimensional dos hidrocarbonetos. Esta sequência de ensino foi escrita em formato hipertexto com um total de 9 páginas para ser acessada pelos estudantes através da internet. Trouxemos um grupo de estudantes de ensino médio da E.E. “Jornalista David Nasser” (Governo do Estado de São Paulo) para uma sala com 20 computadores e acompanhamos os mesmos na realização das atividades propostas na sequência de ensino desenvolvida para este fim. Os estudantes trabalharam em duplas na realização das atividades, num total de 35 alunos. Após a realização das atividades da sequência de ensino distribuímos um questionário de avaliação com 11 questões, onde os estudantes opinaram anonimamente, entre outros assuntos, sobre a usabilidade do Construtor. Relatamos abaixo os resultados da questão número cinco, de um total de 34 questionários respondidos, que se refere especificamente sobre a dificuldade ou facilidade de uso do programa Construtor na opinião dos estudantes.

Questão 5 – Especificamente sobre a operação do construtor, ou seja, a forma de utilizá-lo, você o considera: (1 = muito difícil; 5 = muito fácil)

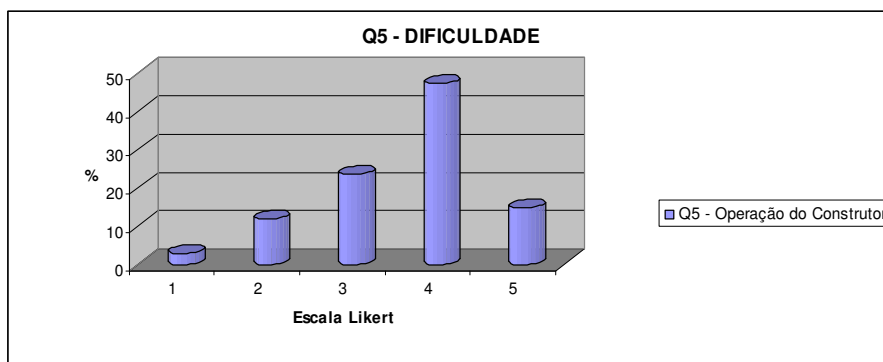


Figura 2. Gráfico demonstrativo do resultado da questão 5.

Nesta questão requisitamos dos estudantes uma resposta em escala tipo Likert de 5 pontos (figura 2), onde os estudantes atribuíram 1 para muito difícil e 5 para muito fácil. Como resultado 85,3% (29 respostas) dos estudantes opinou que o grau de dificuldade de operação do Construtor foi de normal (4) a muito fácil (5).

A partir do resultado da questão cinco podemos inferir que o programa Construtor não apresenta dificuldade de uso para estudantes de ensino médio. Como próximo passo de desenvolvimento, pretendemos introduzir neste programa a possibilidade de visualização do nome IUPAC (International Union of Pure And Applied Chemistry) da molécula requerida pelo usuário.

4. Referências Bibliográficas

- Kernighan, B., Ritchie, D. (1988). The C programming language, Prentice Hall, New Jersey.
- Ponder, J. W. and Richards, F. M. (1987). Tinker Molecular Modeling Package. *Journal of Computerized Chemistry*, 8, 1016-1024.