
Construtor de objetos moleculares virtuais e tridimensionais – uma ferramenta de modelagem molecular para iniciantes em química

Jackson Gois¹, Marcelo Giordan²

¹Universidade Federal do Paraná (UFPR) – Campus Litoral – Matinhos – PR – Brasil

²LAPEQ – Faculdade de Educação – Universidade de São Paulo (USP)
São Paulo – SP – Brasil

{jacksong, giordan}@fe.usp.br

Abstract. *We describe in this article the development of a computational program named Constructor of molecular objects, as well as its utilization by high-school students of a public school located in São Paulo State. 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. The program was written in C language and adapted with a PHP script program to be used through a hypertext browser.*

Resumo. *Descrevemos neste trabalho o desenvolvimento de um programa computacional denominado Construtor de objetos moleculares, bem como sua utilização por parte de uma turma de ensino médio de uma escola pública da rede estadual de São Paulo. 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. O programa foi escrito em linguagem C e adaptado a partir de um script PHP para utilização através de um navegador hipertexto.*

1. Introdução

O programa computacional descrito neste trabalho foi desenvolvido em linguagem C [KERNIGHAN e RITCHIE, 1988] para ser utilizado por estudantes iniciantes em química do ensino médio ou superior. Através deste programa é possível construir e visualizar objetos moleculares virtuais e tridimensionais em computadores com monitor de vídeo, *mouse* e teclado. A construção do objeto molecular ocorre em um computador servidor, acessível pela internet através do protocolo de comunicação hipertexto. A interface gráfica com o usuário foi desenvolvida para ser acessada através do navegador hipertexto Internet Explorer®. Este programa é utilizado de forma simplificada, onde o usuário submete a fórmula estrutural condensada de um composto orgânico através de um campo tipo formulário em uma página hipertexto acessada pela internet, e obtém como resultado o objeto molecular virtual e tridimensional na mesma página hipertexto.

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.

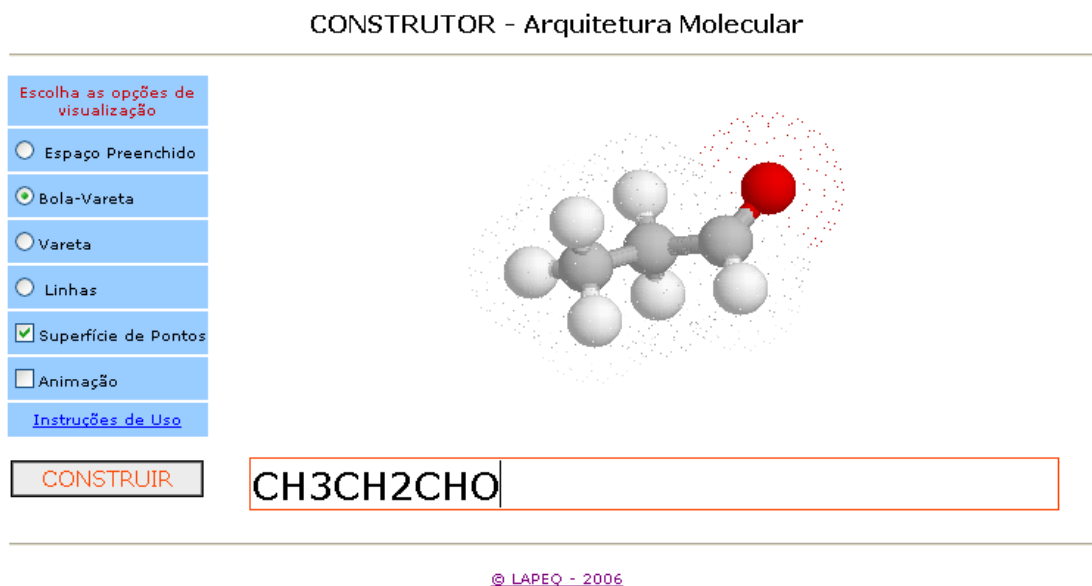


Figura 1. A figura representa um objeto molecular construído com o auxílio do programa Construtor.

Para o desenvolvimento da interface gráfica com o usuário, decidimos disponibilizar a utilização do programa através de uma página hipertexto na internet, ao invés de disponibilizar o mesmo para ser baixado e instalado. Esta decisão se baseia na atual tendência de convergência de utilização dos recursos disponibilizados na internet através de navegadores de páginas hipertexto. Atualmente grande parte dos recursos disponibilizados na internet é acessada através de navegadores hipertexto, desde correio eletrônico, passando por acesso a contas bancárias, até jogos eletrônicos disponibilizados em formatos diversos. A maior vantagem deste tipo de disponibilização está na facilidade de lançamento de versões atualizadas do programa, o que não requer que os usuários baixem e instalem novas versões, sendo necessário apenas a mudança no servidor. A Figura 1 representa a interface gráfica da atual versão do programa computacional Construtor, na qual acrescentamos opções de visualização do objeto molecular.

A principal filosofia presente no desenvolvimento do programa computacional Construtor é abrir mão da utilização de um banco de dados para a disponibilização de estruturas moleculares para os usuários. Ao invés disso, a idéia principal do programa é montar o arquivo de estrutura molecular, otimizar geometricamente a estrutura e gerar informações para 200 quadros de movimentação molecular simulada, sob a demanda do

usuário. O tempo necessário para que estas etapas sejam concluídas, na atual versão do programa construtor, é de apenas três segundos, para uma molécula com 20 átomos, em um computador servidor tipo PC com processador AMD 2.0 GHz e 256 MB de memória RAM. O tempo de resposta ao usuário, naturalmente, dependerá da velocidade de conexão com a internet.

O desenvolvimento do programa computacional Construtor envolve a utilização de um pacote de programas de modelagem molecular [PONDER e RICHARDS, 1987], utilizados na otimização da geometria molecular e na simulação por dinâmica molecular. Este tipo de programa computacional tem sido desenvolvido por vários grupos de pesquisa em muitos países, os quais são disponibilizados gratuitamente na internet na filosofia do *software* livre. A utilização deste tipo de programa geralmente se dá em ambientes de pesquisa e ensino no nível de pós-graduação, uma vez que exigem conhecimento aprofundado de teorias químicas, matemáticas e computacionais. Além disso, estes programas são geralmente utilizados em ambiente GNU/Linux, o que requer conhecimentos específicos sobre a utilização de programas computacionais a partir da linha de comando, o que acrescenta conhecimentos específicos e gera barreiras para a utilização de boa parte de usuários cursando o Ensino Médio ou Superior de áreas não específicas da computação. Dessa forma é necessário o desenvolvimento de um programa computacional que ofereça interface gráfica e simplificada para que possa ser utilizado por estudantes iniciantes em química.

3. Resultados

Obtivemos como resultado deste trabalho um programa computacional que é utilizado para construir objetos moleculares virtuais e tridimensionais a partir da fórmula estrutural condensada, utilizando apenas um navegador hipertexto e acesso a internet. O tempo de espera do usuário é de 2 segundos, descontando-se o tempo de transporte pela internet. Caso o usuário disponha de acesso tipo banda larga este tempo será mínimo. O programa foi escrito dentro da filosofia do *software* livre e está disponível para a comunidade acadêmica mediante comunicação direta com os autores.

Testamos a usabilidade do programa computacional desenvolvido neste trabalho. Adaptamos o programa computacional descrito neste trabalho em uma seqüência de ensino para alunos do Ensino Médio. A seqüência de ensino foi desenvolvida em linguagem HTML com um total de nove páginas, a qual foi acessada pelos estudantes através de navegadores hipertexto. Escolhemos como tema de estudo a estrutura tridimensional dos hidrocarbonetos do petróleo. 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 acesso a internet, e acompanhamos os mesmos na realização das atividades propostas na seqüência 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 seqüência 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 35 questionários respondidos, que se referem especificamente 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)

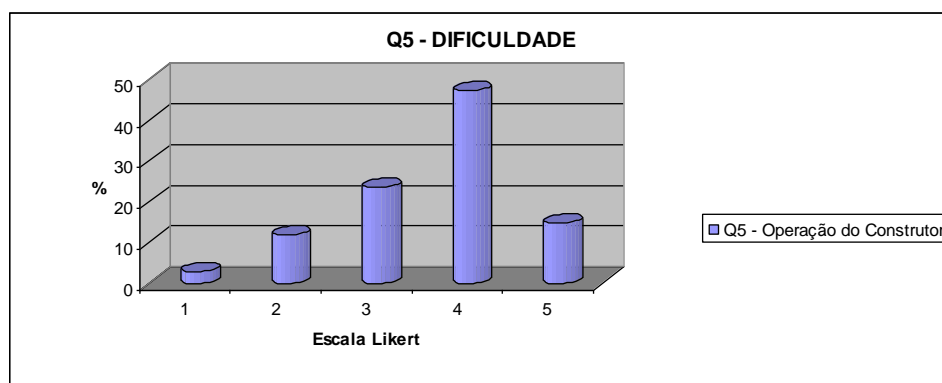


Figura 2. Gráfico demonstrativo do resultado da questão 5.

Nesta questão requisitamos dos estudantes uma resposta em escala tipo Likert de 5 pontos (Figura 2), onde os mesmos 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 Computational Chemistry*, 8, 1016-1024.