

Lo invitamos a ver las Moléculas

2004-04-01

Lo invitamos a ver las Moléculas

Artículo sobre RasMol y Chime , un par de programas gratuitos para Química que ayudan a visualizar tridimensionalmente las moléculas. Con ellas, los docentes pueden facilitar y enriquecer el aprendizaje de su materia utilizando el computador en forma interactiva, práctica y divertida. Se logra además, mejorar la comprensión de los estudiantes en conceptos que son imposibles de observar a simple vista.

Artículo sobre RasMol y Chime , un par de programas gratuitos para Química que ayudan a visualizar tridimensionalmente las moléculas. Con ellas, los docentes pueden facilitar y enriquecer el aprendizaje de su materia utilizando el computador en forma interactiva, práctica y divertida. Se logra además, mejorar la comprensión de los estudiantes en conceptos que son imposibles de observar a simple vista.

LO INVITAMOS A VER LAS MOLÉCULAS

****EL USO DE PROGRAMAS DE MODELOS TRIDIMENSIONALES**

EN EL APRENDIZAJE DE QUÍMICA**

La animación, el color y la interactividad hacen que las moléculas adquieran vida para los estudiantes desde los primeros años escolares hasta la universidad.

Aprender los nombres químicos de sustancias simples que se encuentran en la casa, como sal, vinagre, sirope de maíz y polvo de hornear, siempre ha sido un reto para los alumnos de Kathryn Bremner en el grado sexto del Colegio de Secundaria Básica (6º a

9º) Thomas Harrison.

Ellos cuentan ahora con una nueva herramienta que les ayuda a visualizar en el computador estas moléculas en tres dimensiones. Esta profesora de Harrisonburg, Virginia (USA), no renunció a ninguno de sus planes de clase para que esto pudiera ocurrir; por el contrario, para lograrlo utilizó RasMol, un programa gratuito de visualización molecular. ¿Por qué lo hizo? Porque le permitió, sin incurrir en costos adicionales, utilizar la tecnología en su materia, de manera interactiva, práctica y divertida para que sus estudiantes aprendieran sobre moléculas. Por ejemplo, el sirope de maíz está conformado por moléculas de glucosa y éstas se pueden dibujar en el tablero en dos dimensiones (Imagen A en la Ilustración 1) o se puede mostrar y manipular con RasMol en tres dimensiones (Imagen B en la ilustración 1). Vea usted mismo la diferencia (**Nota del Autor:** Hay un nuevo software disponible en la página principal de RasMol: Explorador de Proteínas. Todavía no lo he utilizado, pero parece que resultará un recurso útil [1]. / **Nota del Editor:** Podrá encontrar las direcciones de los sitios que hemos mencionado en la sección de recursos al final de este artículo [2]).

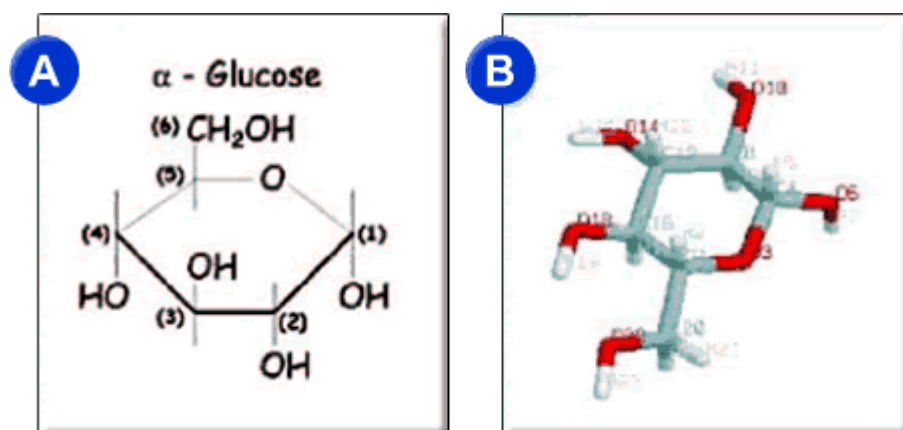


Ilustración 1: Las imágenes A y B son representaciones diferentes de una molécula de glucosa.

Visualizar las moléculas en tres dimensiones juega un papel importante, desde los primeros años de bachillerato hasta la universidad, no solo en la enseñanza de la bioquímica sino en cómo las moléculas interactúan entre sí. Los programas de visualización molecular permiten a los estudiantes examinar las moléculas en forma interactiva. Por ejemplo, el Dr. William McClure del Departamento de Ciencias

Biológicas en la Universidad Carnegie Mellon afirma: "La estructura molecular es fundamental para la comprensión pero las estructuras químicas también son esenciales. El aspecto tridimensional es especialmente importante en la bioquímica, donde el tamaño, la forma y la polaridad de las [macro] moléculas determinan su función". En vez de utilizar programas completos de modelos moleculares, que pueden ser difíciles e incómodos de manejar (especialmente con moléculas grandes) los programas de visualización molecular permiten a los usuarios:

- rotar toda la imagen en tres dimensiones para ver las partes que no se pueden visualizar en una representación bidimensional y ver así la forma de la molécula (lo que a su vez determina su función);
- activar o desactivar la rotación de ciertas partes de la representación visual para ver distintas cadenas, sub-unidades y tipos de sub-moléculas; y
- medir ángulos dentro de la estructura. Las medidas de ángulos indican la forma de la molécula y si ella tiene en su interior enlaces sencillos, dobles o triples.

"La mayoría de nosotros nos orientamos visualmente. Una gráfica con explicaciones textuales congruentes, enriquece mucho el aprendizaje y/o la comprensión. Me interesan y entusiasman estas formas de 'ver' el mundo invisible de las moléculas, y los estudiantes captan este entusiasmo", explica Dr. McClure.

LA VISUALIZACIÓN COMO HERRAMIENTA

El uso de herramientas de visualización molecular es muy conveniente en las clases de biología, química y geología y en todos aquellos cursos en los que puedan ser útiles los modelos moleculares. La visualización de las moléculas en tres dimensiones es muy conveniente cuando los alumnos están estudiando las estructuras y funciones de las proteínas y los aminoácidos. Este método tridimensional les ofrece ventajas sobre los métodos de enseñanza convencionales. En especial, en la mayoría de los cursos de bioquímica en los cuales se requiere que los estudiantes se aprendan la estructura de cada uno de los 20 aminoácidos. Este proceso de aprendizaje se puede enriquecer al

ver estas moléculas tridimensionalmente.

La visualización molecular utiliza un enfoque práctico que complementa el método convencional del tablero y el libro de texto, y ofrece así una imagen más rica, llamativa e interactiva, que se puede recordar más fácilmente.

RasMol es un programa para representación gráfica de moléculas que busca visualizar las proteínas, los ácidos nucleicos y las moléculas pequeñas. Es una herramienta educativa poderosa para mostrar la estructura del ADN y de las proteínas. El programa se diseñó para presentar, enseñar y generar imágenes que se pudieran publicar. Con este programa se pueden ver, rotar y animar tanto moléculas pequeñas como moléculas y cristales grandes. Cada una de las perspectivas del modelo se puede guardar como una imagen diferente. (Véase la Sección: El Uso de Programas de Modelos Moleculares)

“Chemscape Chime” es un “plug in” (módulo de programa) gratuito, basado en “RasMol”, que se instala y permite que Internet Explorer pueda visualizar moléculas en tres dimensiones. (Nota: “Chime” no funciona en la última versión de Internet Explorer, funciona mejor con el Navegador Netscape 4.7x.) Las características esenciales de “RasMol” y “Chemscape Chime” son las mismas. Los dos programas muestran archivos guardados en el formato Banco de Datos de Proteínas (Protein Data Bank, PDB); el modelo Quake (MDL, por su sigla en inglés) y otros formatos menos comunes disponibles en la Red.

MODELOS EN EL AULA

“RasMol” ofrece un método único para enseñar sobre aminoácidos [3] y es una herramienta muy útil que los estudiantes pueden utilizar para aprender la estructura y composición de los 20 aminoácidos. Los profesores pueden crear páginas Web con enlaces “Chime” insertados que sirvan como tutoriales para estudiantes tanto de bachillerato como universitarios; uno de estos ejemplos es "Aminoácidos Combinados", creado por el Dr. McClure. Los profesores pueden también alentar a sus estudiantes para que creen sus propias páginas Web sobre una proteína específica o un tutorial sobre los 20 aminoácidos. Los profesores podrían pedir a los estudiantes que bajaran un archivo PDB específico para redactar luego un ensayo en el que

incluyeran sus versiones modificadas de la molécula. Por ejemplo, una tarea podría ser que los estudiantes descargaran el archivo 4hhb (en formato PDB), que aparece en la Figura 2, de la página del PDB, para luego llevar a cabo una investigación sobre la hemoglobina, reuniendo información suficiente para redactar un informe corto centrado en la estructura y la función. Los estudiantes pueden enfocarse en un aspecto específico de la hemoglobina, como el cambio de la estructura y de la función en presencia o ausencia de oxígeno o, como difiere la hemoglobina fetal de la hemoglobina del adulto. Los estudiantes pueden añadir ilustraciones con leyendas detalladas, incluyendo una descripción de la figura y de las referencias citadas. Al completar esta tarea, los estudiantes habrán aprendido a manipular y guardar una imagen en “RasMol”, ingresar una figura en un documento de Microsoft Word y, lo más importante, la bioquímica en la que se apoya la hemoglobina.

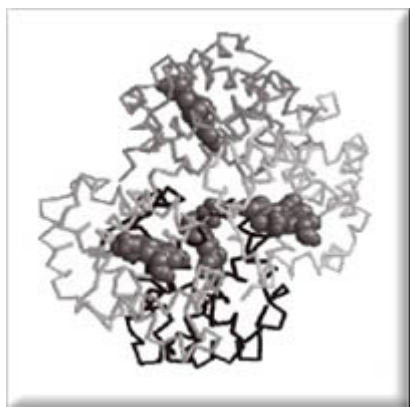


Figura 2 - Ilustración de una molécula de desoxihemoglobina.

Esta imagen se realizó como parte de una tarea sobre la hemoglobina.

El Cuadro fue creado por Cindy Klevickis en “RasMol”

utilizando el archivo PDB 4hhb creado a su vez por G. Fermi y M. C. Perutz, 07-Mar-1984.

Los estudiantes de primaria pueden aprender sobre las propiedades del agua. ¿Qué es el hielo? ¿Cómo interactúan entre sí las moléculas del agua? ¿Qué le ocurre a las moléculas cuando la temperatura se incrementa o se baja? Utilice “RasMol” para dirigir el interés a las formas de los átomos que crean la molécula.

Para estudiantes de Secundaria Media, utilice las moléculas que se pueden encontrar en la Página Web "[Visualización en Ciencia y Matemática](#)" (Visualization in Science y Mathematics; VISM, por su sigla en inglés) para enseñarles sobre la calidad ambiental del aire. ¿Qué es la contaminación y qué moléculas actúan como contaminantes? ¿Qué es la capa de ozono? Utilice los archivos PDB para mostrar estas moléculas y permítale a cada estudiante manipular sus propias moléculas.

"RasMol" y "Chime" se pueden incorporar a las aulas de clase de química y biología de bachillerato, para que los estudiantes los utilicen y manipulen. Ensaye, utilizando archivos PDB para hacer una presentación de la estructura de los 20 aminoácidos. Utilice "RasMol" para resaltar el alpha carbón, grupo de los aminos, grupo de los carboxílicos y las cadenas laterales o secundarias. Solicite a sus estudiantes que descarguen un archivo PDB de la Página Web "VISM" y redacten un ensayo sobre su estructura, utilizando gráficas creadas por ellos mismos.

El uso de herramientas de visualización molecular para complementar otras formas de aprendizaje en el aula realmente ayuda a los estudiantes a dominar el material. Cuando se le pidió evidencia al Dr. McClure de que este método de enseñanza realmente funciona, el respondió: "Cuando se utilizan las páginas con la estructura 'Chime' en clase, como parte de las tareas y, además, aparecen como problemas en los exámenes, la respuesta de los estudiantes es muy positiva. Realizamos encuestas de retroalimentación en la clase de Bioquímica 1, dos veces por semestre. Las preguntas indagan sobre el nivel de utilidad que tienen en el aprendizaje los diversos materiales del curso; los temas de 'Chime' obtienen puntajes entre 3,5 y 4.0, sobre un máximo de 5.0."

UN EJEMPLO DE LA VIDA REAL

La primera vez que la Dra. Cindy Klevickis pudo entender la función de las proteínas fue hace más de 30 años, cuando su profesor de bioquímica le mostró diapositivas tridimensionales y le suministró lentes tridimensionales para verlas. "Desde que tuve esa experiencia, siempre he pensado que la bioquímica debe enseñarse utilizando gráficas tridimensionales," afirma la Dra. Klevickis, quien enseña Aplicaciones para Computador en Biotecnología, un curso orientado a estudiantes universitarios de nivel

superior. Este curso práctico se basa en proyectos y los estudiantes crean sus propios tutoriales basados en la estructura y las funciones de las proteínas. Klevickis afirma que el uso de computadores en el aula hace que los estudiantes se centren en el contenido del curso porque ellos tienen que aprender cómo funcionan las proteínas antes de poder planificar un tutorial sobre estas.

Klevickis también considera que la biología es una materia inherentemente visual. La biología ocurre en tres dimensiones, pero es muy difícil visualizarla en forma tridimensional, y es aquí dónde entran a jugar un papel importante los programas de visualización molecular. Estos programas permiten a los usuarios observar una estructura tridimensional y un proceso de cambio animado, paso a paso.

Klevickis ha recibido sobre su clase retroalimentación muy positiva por parte de los estudiantes y, hasta ha tenido casos en los que ellos han podido utilizar lo aprendido directamente en su trabajo. Por ejemplo, uno de ellos actualmente trabaja con el Recurso de Información sobre Proteínas (PIR, por su sigla en inglés) en tanto que otro ha enseñado aplicaciones para computadores en instituciones de secundaria básica y, ha utilizado "RasMol" como parte de su currículo.

Los modelos moleculares son importantes para la Dra. Klevickis porque sus estudiantes ya no solamente memorizan datos, sino que comprenden la forma en que funcionan las cosas con sólo ver el proceso animado. "Es interesante, divertido y compromete a los estudiantes con el aprendizaje activo", dice ella, "¡Los estudiantes están llevando a cabo programación de computadores sin siquiera saberlo!" Y "a medida que el Proyecto del Genoma Humano evoluciona de la localización de genes hacia la comprensión de sus productos proteínicos, los modelos moleculares llegarán a ser una parte aún más importante de la bioinformática".

LA BIOQUÍMICA EN NUESTRO MUNDO

Los 20 aminoácidos tienen un amplio rango de propiedades químicas y, por lo tanto, la posibilidad de una gran diversidad de secuencias proteínicas. Las cadenas lineales primarias de aminoácidos se doblan o pliegan, para configurar formaciones tridimensionales específicas, que se pueden ver y estudiar en "RasMol". La biología

estructural es de gran importancia porque la estructura de una proteína se relaciona de manera fundamental con su función. Cuando se determina la estructura de una proteína, la función también se puede establecer. Esto significa que se pueden desarrollar medicamentos para que interactúen en formas específicas con la proteína. Investigadores de todo el mundo esperan que esta línea de investigación logre curar muchas de las enfermedades que perturban actualmente la sociedad. Por lo tanto, el estudio de la estructura de las proteínas es importante para la comprensión de la bioquímica y también para la producción de beneficios prácticos, tanto para los científicos como para los que no lo son.

EL USO DE PROGRAMAS DE MODELOS MOLECULARES

La mejor forma de entender las ventajas de usar estos programas de modelos en el aula es descargarlos y examinarlos personalmente [2].

RasMol Descargue la versión adecuada de “RasMol” que sea acorde al sistema operativo de su computador (“RasWin” para PC, “RasMac” para Macintosh, etc), instálela y luego descargue un Archivo PDB (Banco de Datos de Proteínas) de la Página Web “[Visualización en Ciencia y Matemáticas](#)” (Visualization in Science y Mathematics - VISM, por su sigla en inglés) “[Klotho](#)” : Base de Datos Relacionales de Compuestos Bioquímicos o, del Banco de Datos de Proteínas (Protein Data Bank – PDB, por su sigla en inglés).

PDB <http://www.rcsb.org/pdb/> es un sitio internacional de intercambio para datos sobre estructuras macromoleculares tridimensionales. Ha sido diseñada para que los investigadores depositen y procesen en él, las estructuras macromoleculares que estén estudiando. Cada archivo cita tanto el autor como la publicación periódica en la que fue publicada la imagen.

Comencemos en la página de la “[VISM](#)”. Seleccione, “Colecciones de Archivos Personalizadas” (Customized Molecular File Collections); luego, “Estructuras de Amino Ácidos” (Amino Acid Structures). A continuación haga clic en el botón derecho del ratón (en los PC) o haga clic y mantenga pulsado el botón (en los MAC) en cualquiera de los archivos del PDB para guardarlo en su disco duro. Ejecute “RasMol” y abra el archivo que acaba de descargar.

Las imágenes aparecen primero en la caja de visualización RasMol (Figura 3) en forma de estructuras del tipo alambre. Utilice el menú de Visualización para cambiar el tipo de efecto visual a barras y esferas, lazos u otros. Haga clic y sostenga el botón del ratón mientras mueve el cursor para rotar la molécula. Haga clic derecho en el ratón y manténgalo (en los PC) o mantenga pulsada la tecla de comando; luego coloque el cursor del ratón en la ventana de visualización (en los Mac) para mover la molécula de un lado al otro sin rotarla. Pulse y sostenga en esta posición la tecla de Mayúscula (shift) más clic y, mueva el cursor del ratón para acercar y alejar la figura. Use el menú de Colores para colorear la molécula con base en las distintas propiedades de sus componentes (por ejemplo, temperatura o estructura).

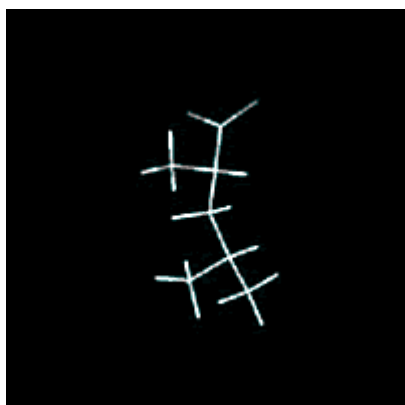


Figura 3. La estructura de L-leucina de “Klotho”: Base de Datos Relacionales de Compuestos Químicos

(Biochemical Compounds Declarative Database).

También puede utilizar los colores para resaltar los distintos átomos que conforman la molécula. Vaya a la pantalla de comando [en la barra de tareas en un PC o detrás de la ventana de visualización en un Mac- (Figura 4)], seleccione un átomo, hidrógeno por ejemplo, digitando “seleccione hidrógeno” y finalmente cambie el color a azul digitando “color azul”.

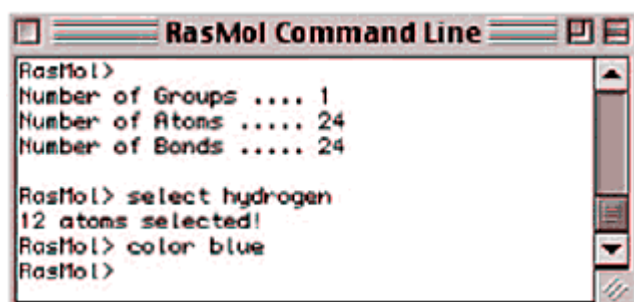


Figura 4. Pantalla de Comandos de “RasMol”

Existen varias guías en la Red para ayudarles, a usted y a sus estudiantes, a dominar “RasMol” [2].

CHIME “Chime” funciona en forma muy similar a “RasMol”, pero es un módulo de programa (plug-in) del Navegador Netscape (también funciona con Explorer), con el que usted podrá trabajar en Internet con el navegador de su elección. Descargue el “plug-in”, instálelo y abra el Navegador. (Nota: En un Mac, es posible que tenga que aumentar la memoria al Navegador).

Es necesario acceder a un menú emergente (pop up) para hacer cambios a las moléculas que se muestren. Haga clic derecho en la imagen (PC) o para Mac, haga clic en el logo de MDL ubicado en la parte inferior derecha de la pantalla (Figura 5) En el menú de propiedades podrá cambiar la forma de visualización de la molécula, cambiar el color, activar o desactivar la rotación, rotular los átomos y guardar el archivo en su disco duro.



Figura 5. Los usuarios de computadores Mac deberán hacer clic en el logotipoMDL para tener acceso en Chime, al menú de propiedades.

Recuerde que en Internet podrá encontrar guías didácticas sobre “Chime”.

RECURSOS

Software (Ver “Reseña de Software para Química”

<https://eduteka.icesi.edu.co/SoftQuimica.php>

Chemscape Chime: <http://www.mdlchime.com/downloads/downloadable/index.jsp>

RasMol: <http://www.umass.edu/microbio/rasmol/index2.htm>

Bernstein + Sons: <http://www.bernstein-plus-sons.com/>

Archivos PDB

Klotho: Base de Datos Declarativa de Compuestos Bioquímicos:

http://www.biocheminfo.org/klotho/compound_list.html

El Banco de Datos sobre Proteínas (Protein Data Bank PDB):

<http://www.rcsb.org/pdb/>

Moléculas R Us: http://molbio.info.nih.gov/doc/mrus/mol_r_us.html

Actividades en el Aula

Bioquímica en 3 Dimensiones -Principios Lehninger de Bioquímica (nivel de bachillerato o universitario):

La Página Web acerca de la Visualización en Ciencias y Matemáticas (VISM) (para principiantes): <http://www.isat.jmu.edu/users/klevicca/VISM/vism.htm>

Tutorías RasMol

RasMol en Español: <http://www.ugr.es/~gebqmed/esrasmol.html>

Manual de RasMol Version 2.6-beta-2 (Español):

<http://www.ugr.es/~gebqmed/rasmanual.html>

Manual RasMol 2.7.2.1 (Español): <http://www.bernstein-plus-sons.com/software/rasmol/doc/esrasmol27.html>

Manual para producir Archivos “sript” (Español):

<http://www.ugr.es/~gebqmed/rasscrip.html>

Manual de Chime (Español):

<http://www.biorom.uma.es/contenido/ManualChime/index.html>

Introducción al Modelado Molecular: <http://www.usm.maine.edu/~rhodes/RasTut/>

Manual de Referencia RasMol :

<http://www.umass.edu/microbio/rasmol/getras.htm#rasmanual>

Tutoría RasMol:

http://web.chemistry.gatech.edu/~williams/bCourse_Information/4581/labs/tbp/rasmol/rasmol_tbp

NOTAS DEL EDITOR:

[1] Protein Explorer en español: Protein Explorer es un programa derivado de RasMol que permite, en forma simple pero potente, investigar la estructura de macromoléculas y su relación con la función.

[2] Ver “Reseña de Software para Química”

<https://eduteka.icesi.edu.co/SoftQuimica.php>

[3] RasMol también incluye los tipos de enlace amino carbónicos.

CRÉDITOS:

Traducción realizada por EDUTEKA del Artículo original “Come See the Molecules” escrito por Rachel Malinowski, Cindy Klevickis y Robert Kolvoord y publicado en el Número 4 del Volumen 29 de la revista Learning & Leading with Technology.

Rachel Malinowski (rachelhelene@hotmail.com) se graduó en Mayo de 2001 en la Universidad James Madison con especialización en ciencias integradas y tecnología. Estudió con la Dra. Klevickis un curso sobre Aplicaciones Informáticas en Biotecnología. Le interesa la enseñanza de ciencia y tecnología y actualmente trabaja en la Compañía Farmacéutica Novartis en Gaithersburg, Maryland.

Cindy Klevickis, PhD (klevicca@jmu.edu), colaboró en la redacción este artículo. Es profesora asociada en ciencias integradas y tecnología en la Universidad James Madison. Obtuvo un PhD en biofísica en la Universidad de Virginia y se especializa en modelado de proteínas y espectroscopia de resonancia magnética. La Dra. Klevickis

utiliza RasMol y Chime para enseñar Aplicaciones Informáticas en Biotecnología. Si desea ponerse en contacto con ella la Dra. Klevickis puede escribirle escríbale a James Madison University. MSC 4102, Harrisonburg, VA 2280; www.isat.jmu.edu/klevickis.htm.

Robert Kolvoord, PhD (kolvoora@jmu.edu), también colaboró en la redacción este artículo. Es profesor asociado en el programa de ciencias integradas y tecnología y en la Facultad de educación en la James Madison University. Obtuvo su PhD en mecánica teórica y aplicada en la Universidad de Cornell. Sus intereses incluyen hipermedios, la hipermedia, la visualización científica, la tecnología educativa, el modelado y la simulación numérica. El Dr. Kolvoord organiza el taller de Visualización en Ciencias y Matemáticas (VISM, por su sigla en inglés) en la citada Universidad James Madison, financiado por la Fundación Nacional de la Ciencia, que incluye temas sobre las técnicas y la aplicación de la visualización de datos para profesores de matemáticas y ciencias. Si desea ponerse en contacto con el Dr. Kolvoord escríbale a: James Madison University. MSC 4102, Harrisonburg. VA 22807. EDUTEKA agradece muy especialmente a Guillermo Gutiérrez, profesor de Química del Instituto Nuestra Señora de la Asunción (INSA), por la revisión y comentarios realizados a esta traducción .

*Publicación de este documento en EDUTEKA: Abril 03 de 2004.

Última modificación de este documento: Abril 03 de 2004.*