

# Incorporación de TICs de modelado molecular en la enseñanza universitaria de la Química

Victorio Marzocchi <sup>1</sup>, Alicia Vilchez <sup>2</sup>, Miguel D'Amato <sup>3</sup>,  
Luis Marino <sup>4</sup>, Nicolás Vanzetti <sup>5</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Tecnología Celulósica / PI:56-273, FIQ - UNL, Santa Fe, Argentina

<sup>2</sup> Programa de Informática Académica / PI:56-273, FIQ - UNL, Santa Fe, Argentina

<sup>3</sup> Instituto de Catálisis y Petroquímica / PI:56-273, FIQ - UNL, Santa Fe, Argentina

<sup>4</sup> Departamento de Ciencias Naturales / PI:53-256, FHUC - UNL, Santa Fe, Argentina

<sup>5</sup> Estudiante de Ingeniería Química / PI:56-273, FIQ - UNL, Santa Fe, Argentina

## Resumen

Se informan logros alcanzados en la incorporación de TICs de visualización y modelado molecular en el inicio de carreras de grado de la Facultad de Ingeniería Química, UNL. A partir de 2008 desarrollamos una serie de actividades: promovimos la instalación de doble booteo en los gabinetes informáticos, seleccionamos e instalamos software libre de visualización y modelado molecular, dictamos un ciclo de charlas y realizamos talleres para estudiantes y docentes. Estas actividades iniciales lograron despertar un imprescindible interés y generar el involucramiento y compromiso de docentes que permitieron proponer y respaldar actualizaciones curriculares que incluyen estas TICs tanto en asignaturas optativas como del tercio inicial. La modificación curricular más importante es la realizada en la asignatura Informática que se dicta para los ingresantes de todas las carreras de la FIQ. En el primer cuatrimestre de 2011 se incluyó el Gabedit, interfaz gráfica con un avanzado constructor de moléculas, y en el primer cuatrimestre de 2012 se amplió al Jmol que permite animación con visión estereoscópica usando lentes 3D anaglifo. Estos logros configuran un hecho de alto impacto en todas las actividades de docencia, que potenciará diversas iniciativas de actualización, perfeccionamiento, aplicación y desarrollo con estas herramientas.

*Palabras clave:* TICs, software libre, visualización molecular, educación en Química, Gabedit, Jmol.

## Abstrat

Achievements are reported in incorporating ICT molecular modeling and visualization at the beginning of undergraduate courses at Chemical Engineering

Faculty, UNL. Since 2008, we have developed a series of activities: promoted dual boot installation in computer cabinets; select and install visualization and molecular modeling free software; issued a series of talks and conducted workshops for students and teachers. Through these initial activities it was possible to generate interest as well as the essential involvement and commitment of teachers that made it possible to propose and support curriculum updates that include these ICT both, in elective and in the initial core subjects. The most important curricular change has been made to the Informatics subject, which is dictated for entrants of all courses. During the first quarter of 2011, Gabedit, a graphic interface with advanced builder molecules, was introduced. Then, during the first quarter of 2012, it was extended to Jmol, which allows stereoscopic animation using 3D anaglyph glasses. These achievements constitute an event of high impact in all teaching activities, which will enhance updating, improvement, implementation, and development with these tools.

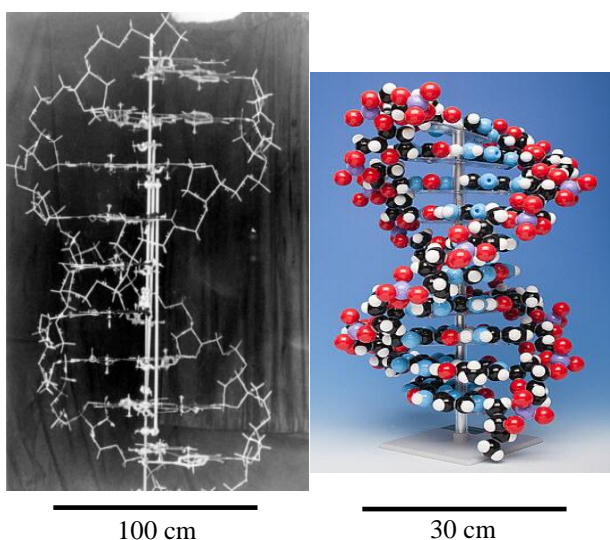
*Keywords:* ICT, free software, molecular visualization, Chemistry education, Gabedit, Jmol.

## 1. Introducción

La visualización en 3D permite una clara comprensión de la estructura tridimensional de las moléculas y de muchas propiedades físicas y químicas derivadas de ella. El modelo más sencillo representa cada elemento químico por átomos esféricos de tamaño y color característicos y a los enlaces atómicos mediante barras cilíndricas; estos modelos son comúnmente denominados de "bolas y palitos". Manteniendo las distancias entre centros atómicos se pueden disminuir

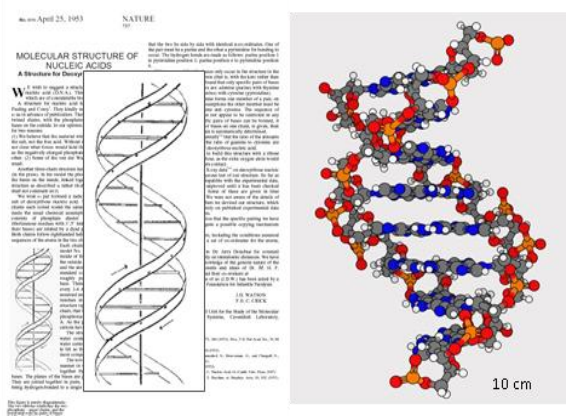
los radios de las esferas de modo de obtener una estructura abierta en la que se visualiza fácilmente la red tridimensional de enlaces atómicos; o bien se pueden aumentar los radios atómicos de modo que las superficies esféricas se toquen o intercepten obteniendo un modelo que simula la superficie exterior de una molécula. Conceptos tales como escala, accesibilidad, reactividad, impedimento estérico y topoquímica, son fácilmente asequibles con la ayuda de estos sencillos modelos digitales tridimensionales.

En 1953, Watson y Crick publicaron un artículo proponiendo la estructura helicoidal del ADN que incluía una figura esquemática (**Fig. 2a**) y para visualizar la compleja estructura construyeron un modelo mecánico de unos dos metros de altura (**Fig. 1a**) [1, 2]. ¿Cuál ha sido la evolución de estos modelos - croquis 2D y modelo mecánico 3D - en más de medio siglo transcurrido?



**Figura 1:** Modelos moleculares mecánicos de ADN. (a) Watson y Crick [2]; (b) Comercial actual [3].

En cuanto al modelado molecular mecánico 3D, actualmente hay una variada oferta de kits comerciales del tipo esferas (átomos) y varillas (enlaces) construidos generalmente en plástico (**Fig. 1b**), pero el extraordinario desarrollo se ha producido en los modelos en 2D que simulan 3D, que ha permitido pasar de aquella figura esquemática del ADN (**Fig. 2a**) a un modelo molecular digitalizado 3D con múltiples opciones de renderización (**Fig. 2b**), incluso visión estereoscópica sin grandes requerimientos de hardware y software.



**Figura 2:** Modelos moleculares de ADN. (a) Croquis 2D de Watson y Crick [1]; (b) Modelo digital 3D obtenido con el “Build” del Gabedit.

En las últimas dos décadas, la aparición y el acelerado desarrollo de nuevas TICs ha originado una gran cantidad de software de Química Computacional [4,5] y desde hace más de 15 años hay disponibles en internet repositorios de modelos moleculares [6]. El carácter propietario de la licencia de uso de algunos software establece serias restricciones legales y económicas para su instalación masiva en gabinetes informáticos con fines educativos. En 2003 la UNL adoptó como política institucional la utilización del software libre en su ámbito, estableciendo un marco para la necesaria actualización en la incorporación y uso de TICs con esta filosofía [7]. La posterior organización de varios gabinetes informáticos compartidos por algunas unidades académicas, provistos de computadoras con plataforma Linux, dio un importante impulso a la concreción de esta decisión; por ejemplo, en el dictado de asignaturas optativas del tercio final de algunas carreras se comenzó a usar solamente software libre sobre plataforma Linux [8].

El uso de software de modelado molecular en la enseñanza de la Química, era incipiente en la FIQ, falencia debida entre otras razones, al alto costo de la licencia del software propietario. Este diagnóstico nos llevó a aceptar el desafío de incorporar TICs de visualización y modelado molecular en todas las actividades académicas, aprovechando las oportunidades del software libre, y fijando como objetivo prioritario y de alto impacto, su incorporación en el inicio de las carreras de grado.

## 2. Tareas desarrolladas

La **Tabla 1** resume las tareas desarrolladas y discriminadas por año. Se observa que las mismas se escalonaron de modo que la realización de algunas de ellas sirviera de base a otras posteriores. Esto fue planificado y ejecutado de este modo ya que era

imprescindible lograr el involucramiento de los docentes responsables de asignaturas de distintos tramos de las carreras.

La FIQ cuenta con cuatro gabinetes informáticos, distribuidos en dos edificios, con un total de sesenta computadoras. Desde 2008 promovimos la instalación de doble booteo en los gabinetes; iniciamos la búsqueda e instalación de software libre de modelado molecular; y además organizamos un ciclo de charlas y el primer taller para docentes, con la participación de especialistas en el tema y usando programas libres de visualización y modelado molecular (Gabedit, Tinker, VMD, Gamess).

Durante 2009 comenzamos la realización de talleres para estudiantes con modalidad teórico-práctica en gabinete informático; presentamos una modificación curricular en la planificación de la cátedra Química Inorgánica incluyendo el uso de software de modelado molecular y logramos la instalación de doble booteo en todos los gabinetes. Además, iniciamos la ejecución de un proyecto cuyo objetivo es promover la incorporación de TICs de modelado molecular, con líneas de trabajo en docencia, investigación y servicios, usando software libre y recogiendo la experiencia acumulada en las actividades previas [9-13].

Actividades		2008	2009	2010	2011	2012
1	Instalación de plataforma Linux (Distribuciones Debian y Ubuntu)					
2	Selección e instalación de software libre de modelado molecular					
3	Ciclo de charlas					
4	Taller para docentes					
5	Talleres para estudiantes					
6	Modificaciones curriculares (Materia optativas y Químicas básicas)					
7	Material de apoyo docente					
8	Expo Carreras UNL 2010					
9	Seminario interno docentes Informática					
10	Modificación curricular (Gabedit en Informática)					
12	Modificación curricular (Jmol en Informática)					

**Tabla 1:** Detalle de las actividades desarrolladas por año.

En el primer cuatrimestre de 2010 se aprobó la modificación curricular propuesta, dictándose por primera vez el TP: “Visualización y Modelado Molecular” en la asignatura Química Inorgánica de la carrera Licenciatura en Química, usando el software Gabedit instalado sobre ambas plataformas. También se realizó un taller con alumnos de Química Orgánica de la misma carrera, siendo ambas asignaturas del tercio inicial. Posteriormente, se desarrolló material de apoyo docente para la asignatura optativa “Residuos Contaminantes de Alimentos” de la carrera de Licenciatura en Química, obteniéndose modelos mecánicos y digitales de los 209 congéneres de la familia de bifenilos policlorados [14].

Desde mediados de 2010 a la fecha hemos continuado en el desarrollo de varias actividades: mantenimiento y

actualización del software instalado en los gabinetes, particularmente de las distribuciones Debian y Ubuntu, y los software Gabedit y Jmol; dictado de las actualizaciones curriculares en las asignaturas optativas y las químicas básicas; y colaboraciones para generación de material de apoyo docente, tal es el caso de los modelos de macropolímeros lignocelulósicos para las asignaturas optativas que se dictan en el Instituto de Tecnología Celulósica; colaboración con la FIQ en la preparación de material para presentar en la Expo Carreras 2010, instalando software de visualización molecular en una notebook con acceso a base de datos de modelos moleculares disponibles en internet, para realizar demostraciones a los aspirantes al ingreso a la UNL.

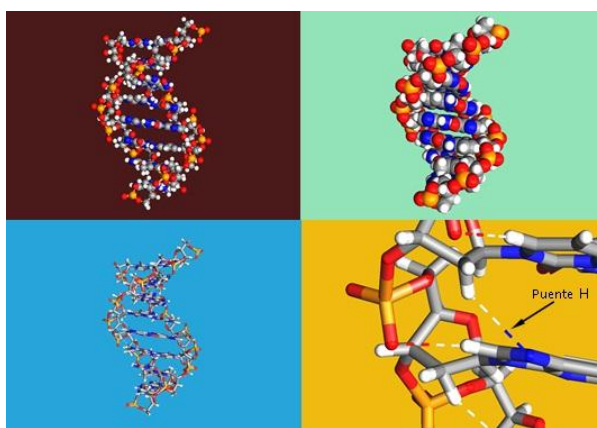
Destacamos que siempre sostuvimos la opinión favorable a una rápida incorporación de TICs de modelado molecular en el pregrado y el inicio de las carreras de grado, con el respaldo de planes institucionales y aprovechando las oportunidades del software libre.

Con esta convicción en 2011 propusimos y logramos la inclusión del software Gabedit [15] en la asignatura Informática que se dicta a ingresantes de todas las carreras de la FIQ, organizando previamente para los docentes de la cátedra, el seminario interno "Gabedit: un editor libre de moléculas en 3D", exitosamente desarrollado.

Por razones de disponibilidad en infraestructura, la asignatura Informática se dicta para la mitad de las carreras en el primer cuatrimestre y la otra mitad lo hace en el segundo cuatrimestre; inicialmente el Gabedit se dictó a mediados del cuatrimestre, pero en el segundo cuatrimestre se adelantó su dictado a la segunda semana de clases del cuatrimestre, de modo que los alumnos accedan más tempranamente a estas herramientas.

## 2.1. El software libre Gabedit

La experiencia durante 2010 nos condujo a concentrar el interés en el software Gabedit, interfaz gráfica de código abierto que puede realizar una variedad de cálculos incluyendo soporte a la mayoría de los formatos de archivos de moléculas. Su avanzado "Constructor de Moléculas" permite un rápido bosquejo de moléculas, examinarlas en 3D y guardarlas en varios formatos. Dispone de herramientas para editar, visualizar, renderizar, analizar, convertir y animar variados tipos de moléculas [16].



**Figura 3:** Modelo de ADN obtenido con el "Build" del Gabedit, renderizado con distintas opciones

Algunas de las herramientas disponibles en el Gabedit útiles para su uso como editor de moléculas son:

- Posee una librería interna con unas 400 moléculas

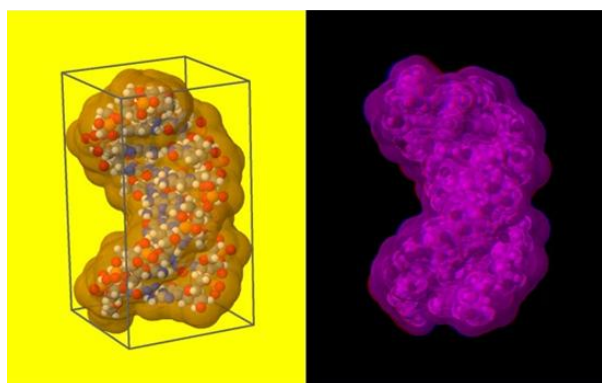
clasificadas en 10 categorías: grupos funcionales, anillos, heterocíclicos, hidrocarburos, drogas, fullerenos, aminoácidos (L), aminoácidos (D), agentes antivirales, y misceláneas.

- Crea librerías de moléculas de usuario agregadas a la librería interna.
- Lee y graba archivos en formato propio y en varios formatos de software de Química Computacional: Gamess-US, Gaussian, HyperChem, Molcas, Molpro, MPQC, Open Mopac, Orca, PC Gamess, Q-Chem y otros.
- Lee y graba archivos con formato pdb (Protein Data Bank) lo que permite visualizar gran cantidad de archivos alojados en repositorios en internet.
- Asistente Build para construir rápida y fácilmente moléculas lineales, en anillo, con un eje de simetría, polipéptidos, ácidos polinucleicos, polisacáridos y nanotubos.
- Ventana de dibujo con sencillas y potentes herramientas para construir moléculas, con distintas opciones de visualización y renderización.
- Panel de mediciones de parámetros conformacionales: distancias de enlaces, ángulos y ángulos diedros. Admite la modificación de los parámetros conformacionales y devuelve la nueva conformación en la ventana de dibujo.
- Editor XYZ que muestra la cantidad y tipo de átomos y las coordenadas de sus centros atómicos y al igual que el panel de mediciones admite el ingreso o la modificación directa de valores.
- Genera archivos pdf y jpg de las moléculas visualizadas en la ventana de dibujo.

Además de todas estas herramientas útiles para la visualización en 3D, el Gabedit puede calcular la energía de moléculas, optimizar estructuras químicas y realizar muchos otros cálculos de Química Computacional.

## 2.2. El software libre Jmol

Para construir y animar modelos moleculares 3D se ha desarrollado el Jmol, que incluye un visor Java de código abierto para estructuras químicas en tres dimensiones con prestaciones para compuestos químicos, cristales, materiales y biomoléculas. La miniaplicación interactiva para el navegador web, es libre, gratis y disponible en castellano, que se propaga como "el futuro de la visualización molecular está aquí" para "docencia primaria, secundaria, terciaria" [17].



**Figura 4:** Modelo de ADN visualizado con el Jmol; la imagen de la derecha está preparada para visión estereoscópica con lentes 3D anaglifo

El Jmol ofrece la opción de visión estereoscópica con lentes 3D anaglifo; dos elocuentes ejemplos de aplicación son: el Biomodel 3 y el repositorio RCSB. El Biomodel 3 contiene modelos animados con Jmol de glúcidos, lípidos, vitaminas, proteínas y ácidos nucleicos, y se considera como material de uso en la educación secundaria [18]. Por otra parte, el repositorio RCSB, probablemente el portal de macromoléculas biológicas más importante que nuclea a organizaciones de EEUU, Europa y Japón, tiene incluido en su página el Jmol para visualizar las macromoléculas [19].

### 3. Resultados

Introducida la modificación curricular en la asignatura Informática con la inclusión del Gabedit, en el primer cuatrimestre de 2012 diseñamos y ejecutamos una encuesta en las seis comisiones para tener una primera evaluación del impacto [12]. Los resultados de esa encuesta se pueden sintetizar en los siguientes puntos:

- Es conveniente buscar software alternativo en idioma castellano, asegurar la estabilidad de software y hardware, y aumentar el tiempo de clase dedicado a la enseñanza del editor molecular.
- Los alumnos llevan casi la mitad de su vida empleando diferentes software, lo que indica que poseen experiencia general suficiente para emplear las simulaciones y visualizaciones moleculares digitales.
- Si bien dichas actividades deberían comenzar en el nivel medio, deben ser incorporadas sin demoras en el inicio del grado universitario.
- A pesar de sus escasos conocimientos químicos, los alumnos pueden reconocer los parámetros estructurales de las moléculas, lo que obviamente facilitará la comprensión de las explicaciones a nivel molecular de fenómenos químicos macroscópicos.
- El uso de estas TIC permite adicionalmente adiestrar a los futuros egresados en el uso de herramientas que

utilizarán en su vida profesional.

Durante el segundo cuatrimestre de 2012, la inclusión del Jmol en los contenidos de la asignatura Informática ha producido resultados altamente satisfactorios. Los alumnos han podido percibir una excelente sensación de tridimensionalidad al visualizar modelos moleculares digitales 3D con opción activada de giro y visión estereoscópica con lentes de 3D anaglifo. Estos anteojos son de cartulina y su reducido costo permite su uso masivo en clases desarrolladas en gabinetes informáticos [20].

### 4. Discusión

La incorporación de TICs en todas las actividades humanas se ha transformado en una necesidad permanente y alcanza niveles de desafío impostergable en ámbitos privados y públicos, en particular en las universidades nacionales y otras instituciones científicas y técnicas [21].

Los recursos humanos que se desempeñan en estos ámbitos presentan la fortaleza de ser altamente calificados, pero a la vez subsiste en un segmento importante las debilidades derivadas del hecho de que estas TICs no son herramientas adquiridas durante su formación de grado o posgrado, lo que induce en muchos casos a actitudes reticentes frente a la incorporación de TICs.

Esto contrasta con la actitud de los estudiantes, que son el estamento más dinámico, muchas veces con expectativas no satisfechas y que cuando se los convoca a participar activamente, se transforman en la fuerza impulsora necesaria para hacer posible los cambios necesarios.

La incorporación de TICs en el ámbito estatal requiere la aplicación de políticas tendientes a lograr el involucramiento y el compromiso del personal, y su conjugación con la formación y promoción de jóvenes recursos humanos, configuran una estrategia con altas posibilidades de éxito.

### 5. Conclusiones

Los resultados alcanzados y las acciones planificadas y en desarrollo, respaldan nuestra opinión de que es posible la rápida incorporación de TICs de Visualización y Modelado Molecular en el inicio de las carreras de grado, e incluso en el pregrado de las escuelas técnicas dependientes de la UNL, aprovechando las oportunidades que ofrece el software libre.

Estas posibilidades deberían ser potenciadas con planes institucionales a nivel de la UNL que promuevan decidida y efectivamente el uso de software libre, y a



nivel de la FIQ para la incorporación y uso de software de visualización y modelado molecular, sentando las condiciones para afrontar desafíos de mayor envergadura en el área de la docencia relacionada a la Química Computacional.

## Agradecimientos

Los autores agradecen a la UNL por el financiamiento a través de la Convocatoria CAI+D 2009; al Dr. Pedro Mancini, Director del Programa en el que se halla incluido el PI:56-273 "Visualización y modelado molecular de macropolímeros orgánicos de interés industrial"; al Dr. Silvano Sferco y al Dr. Sergio Garay por el apoyo y estímulo; al Ing. Horacio Beldoménico, Director del Laboratorio Central de la FIQ, por su predisposición y colaboración; a Javier Bértoli, Guillermo Hang y Germán Romani por el soporte técnico en gabinete informático; y a los estudiantes Diego Marzocchi y Rodolfo Leonarduzzi por su colaboración.

## Referencias

- [1] Watson J. and Crick F. (1953). Molecular structure of nucleic acids. A structure for deoxyribose nucleic acid. *Nature*, 171(4356):737-738.
- [2] Watson J. and Crick F. (1953). Original DNA demonstrations model. Cold Spring Harbor Laboratory Archives. <http://hmaloy.wikispaces.com/DNA>
- [3] Tecnología Educativa S.A. Modelo de ADN. <http://www.tecnoedu.com/Modelos/>
- [4] RELAQ: Red Latinoamericana de Química. Software Química. <http://www.relaq.mx/RLQ/software.html>
- [5] CMM: Center for Molecular Modelling. Universal Molecular Modeling Software List. (2012). [http://cmm.info.nih.gov/modeling/universal\\_software.html](http://cmm.info.nih.gov/modeling/universal_software.html)
- [6] Woodcock D. (1996). Molecules from Chemistry at Okanagan University College. <http://elchem.kaist.ac.kr/jhkwak/okanaganpdb97/molecule/molecule.html>
- [7] Universidad Nacional del Litoral. Resolución Consejo Superior UNL "C.S." 8-27/3/2003. "Artículo 1º: Adoptar como política institucional la utilización del Software Libre en el ámbito de la Universidad Nacional del Litoral".
- [8] Sferco S. y Garay S. (2012). Curso Modelado Molecular. Departamento de Física, FBCB, UNL. <http://www.fbcb.unl.edu.ar/dfbioq/index.php/materias-y-cursos/modelado-molecular>
- [9] Marzocchi V. (2009). Visualización y Modelado Molecular de Macropolímeros Orgánicos de Interés Industrial. Proyecto de Investigación PI:56-273. Convocatoria CAI+D 2009, UNL. [http://www.unl.edu.ar/eje/8/Convocatoria\\_2009\\_h.html](http://www.unl.edu.ar/eje/8/Convocatoria_2009_h.html)
- [10] Marzocchi V., Cagnola E., D'Amato M., Vanzetti N. y Leonarduzzi R. (2010). Las TICs en la enseñanza de la Química: Una experiencia con software libre de visualización y Modelado Molecular. FABICIB, Volumen 14, Suplemento 1, Santa Fe, Argentina.
- [11] Marzocchi V., D'Amato M.; Leonarduzzi R.; Vanzetti N. Avances en la aplicación de TICs en la enseñanza de la Química en el inicio de carreras de grado. TE&ET 2011, Salta, Argentina
- [12] Marzocchi V., Marino L., D'Amato M. y Vanzetti N. Evaluación preliminar del impacto del uso de software de visualización y modelado molecular en el inicio de carreras de grado. TE&ET 2012, Pergamino, Argentina.
- [13] Visualización y Modelado Molecular: Sitio oficial del PI: 56-273, CAI+D 2009, UNL. <http://www.fiq.unl.edu.ar/modeladomolecular/>
- [14] Marzocchi A., Beldoménico H. y Vanzetti N. (2011). Bifenilos Policlorados: Relación entre estructura química, parámetros conformacionales y toxicidad efecto-dioxina. *ACI*, Chile, 2(4):109-118.
- [15] Allouche, A.R. What is Gabedit? (2012) <http://gabedit.sourceforge.net/>
- [16] Allouche A. (2011). Gabedit - A graphical user interface for computational chemistry softwares. *Journal of Computational Chemistry*, 32(1): 174-182.
- [17] Jmol: un visor Java de código abierto para estructuras químicas en tres dimensiones. (2012). <http://jmol.sourceforge.net/index.es.html>
- [18] Ángel Herráez. (2012). Biomodel-3: Bioquímica estructural para enseñanza secundaria. <http://biomodel.uah.es>
- [19] RCSB-PDB Protein Data Bank. (2012). An Information Portal to Biological Macromolecular Structures. <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
- [20] Marzocchi V., Vilchez A. y Vanzetti N. (2012). Los modelos moleculares digitales 3D y la Química. Vº ECIImag, Santa Fe, Argentina
- [21] Libro Blanco de la Prospectiva TIC: Proyecto 2020. (2009). Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva. Buenos Aires, Argentina.

*Dirección de Contacto del Autor/es:*

**Victorio Marzocchi**

*Instituto de Tecnología Celulósica*

*PI:56-273*

*FIQ - UNL, Santa Fe, Argentina*

*e-mail: vmarzocc@fiqus.unl.edu.ar*

**Alicia Vilchez**

*Programa de Informática Académica*

*PI:56-273*

*FIQ - UNL, Santa Fe, Argentina*

**Miguel D'Amato**

*Instituto de Catálisis y Petroquímica*

*PI:56-273*

*FIQ - UNL, Santa Fe, Argentina*

*e-mail: mdamato@fiq.unl.edu.ar*

**Luis Marino**

*Departamento de Ciencias Naturales*

*PI:53-256*

*FHUC - UNL, Santa Fe, Argentina*

*e-mail: lmarino@frsf.utn.edu.ar*

**Nicolás Vanzetti**

*Estudiante de Ingeniería Química*

*PI:56-273*

*FIQ - UNL, Santa Fe, Argentina*

*e-mail: nvanzetti@gmail.com*