

# MODELOS MOLECULARES INTERACTIVOS USANDO J MOL

---

Ángel Herráez Sánchez\*, M.<sup>a</sup> Jesús Miró Obradors\*\*, Evangelina Palacios Aláiz\*\*

angel.herraez@uah.es; mjmiro@farmc.ucm.es; palacios@farmc.ucm.es

\*Departamento de Bioquímica y Biología Molecular. Universidad de Alcalá.

\*\*Departamento de Bioquímica y Biología Molecular II. Facultad de Farmacia.  
Universidad Complutense de Madrid

## INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

Los autores forman parte de un grupo de innovación y mejora de la calidad docente desde el año 2005 y han desarrollado varios PIMCD subvencionados por esta Universidad Complutense. Además, son miembros del grupo BioROM, constituido por profesores de varias universidades iberoamericanas que cada año publican un CD-ROM (BioROM) con los materiales didácticos elaborados para facilitar la docencia y el estudio de la Bioquímica, la Biotecnología y la Biología Molecular. Una parte importante de su contenido se refiere al manejo de modelos moleculares tridimensionales informatizados que permiten comprender más fácilmente la estructura de las biomoléculas, y en este contexto consideramos que sería muy interesante y útil desarrollar un taller que permitiera mostrar el uso y la aplicación de esta herramienta didáctica en el CV-UCM.

El empleo de medios informáticos para examinar de forma interactiva modelos moleculares tridimensionales presenta ventajas bien conocidas para el estudio y la enseñanza de Química, Bioquímica, Biología Molecular y otras ciencias afines (Cristalografía, Ciencia de Materiales, etc.). Jmol (<http://jmol.org>) es un programa escrito en Java que es compatible con todos los sistemas operativos y navegadores de Internet, así como con otros programas de visualización molecular anteriores (Rasmol

y Chime). Además de su aplicabilidad interdisciplinar, Jmol destaca por ofrecer numerosas funcionalidades nuevas en la representación y análisis de estructuras, reconocer numerosos formatos moleculares y en particular, por su carácter de software libre y de código abierto que asegura su futura evolución y compatibilidad. Incluye asimismo una miniaplicación que puede integrarse dentro de una página web, lo que permite fácil acceso y consulta al público usuario, tanto en entornos abiertos (Internet) como restringidos (Campus Virtuales), sin necesidad de instalación de *software* específico (sólo requiere la máquina virtual Java).

Este taller se propuso y se ha realizado como curso práctico, dentro del Área Temática: «Herramientas de generación de contenidos para el Campus Virtual», con dos objetivos generales:

1. Introducir al asistente en el uso del programa Jmol como herramienta de preparación de materiales de apoyo docente y de estudio que contengan modelos moleculares interactivos dentro de páginas web:
  - 1.1. Comunicar y demostrar las posibilidades del programa Jmol.
  - 1.2. Enseñar los fundamentos básicos para preparar modelos y para su inclusión en páginas web.

2. Mostrar el procedimiento que permite introducir estos materiales didácticos en un entorno de aula virtual como WebCT.

Nos propusimos que cada participante en este taller tomara parte activa en el mismo, no sólo formulando las cuestiones que se le fueran planteando con la exposición teórica de la materia, sino también desarrollando un trabajo práctico que le condujera finalmente a incluir su página web con los modelos moleculares seleccionados, en un seminario propio del CV-UCM. En definitiva, con este taller hemos enseñado a combinar diferentes tecnologías de la información y la comunicación, para crear y/o utilizar materiales didácticos: diseño y desarrollo de páginas web, programa Jmol e instrucciones JavaScript necesarias y plataforma WebCT del CV-UCM.

## MATERIAL Y MÉTODOS

Se dispuso del Aula de Informática n.º 219 del edificio de ampliación de la Facultad de Farmacia de la UCM con 45 puestos de ordenador. Sin embargo, con objeto de prestar una atención personalizada a cada uno de los asistentes, el número de inscripciones se limitó a 20. Se comprobó que todos los ordenadores tuvieran instalado Java y conexión a Internet; además, se creó una carpeta en el escritorio a la que se denominó «alumno» y en la que se deberían grabar todos los ficheros o carpetas con los que practicara cada persona. Por otra parte, la presentación multimedia de la exposición teórica por parte del profesor se realizó a través de cañón de proyección.

Se creó un seminario de trabajo en el Campus-Virtual-UCM: «Taller modelos moleculares Jmol». Una vez inscritos en el taller, los participantes se incluyeron en el espacio virtual para permitirles el acceso, como «alumnos», a los diferentes materiales y herramientas didácticas que se introdujeron en el mismo:

1. *Programa del curso*: objetivos, descripción, contenidos y plan de trabajo, fecha, hora y ubicación del taller.
2. *Apuntes del taller*: un fichero pdf descargable que incluye todos los contenidos expuestos por los profesores, un guión que permite a los participantes seguir la parte práctica del curso y además diferentes vínculos e informaciones adicionales que completan el tema tratado.
3. *Ejemplo de demostración*: una página web que contiene diferentes modelos moleculares y las instrucciones JavaScript necesarias para la visualización de los mismos con la aplicación Jmol. Esta página ha sido ya utilizada previamente en el curso de doctorado «Mensajeros lipídicos en la transducción de señales» que los profesores imparten en el «Programa de Bioquímica y Biología Molecular» de esta Universidad.
4. *Descarga de archivos*: página que contiene diferentes archivos que el usuario puede abrir y guardar: paquete Jmol, modelos moleculares (pdb, xyz, mol) y páginas htm preparadas como ejemplo para practicar. Estas últimas se presentaron en formato zip porque como ficheros htm no se pueden abrir ni descargar en esta plataforma Web-CT.
5. *Correo y foro*: para posibles mensajes antes y después del desarrollo del taller.

Con la finalidad de obtener una evaluación del taller, aplicable a su mejora en nuevas ediciones del mismo y/o en proyectos futuros relacionados, se preparó un cuestionario-encuesta que se distribuyó entre los asistentes para su contestación anónima, una vez finalizada la actividad.

## RESULTADOS: DESARROLLO DEL TALLER

El taller se desarrolló en una parte teórica expositiva y una parte práctica que cada participante pudo realizar de forma individual en su ordenador. Ambas se llevaron a cabo de forma paralela y de acuerdo con el desarrollo de los contenidos recogidos en el programa.

### ASISTENTES AL TALLER

El origen de los asistentes al taller, considerando el área de conocimiento y la facultad a la que pertenecen, se refleja en la figura 1(a,b).

Como indican los gráficos y como cabía esperar para este taller que trata el manejo de estructuras moleculares, el perfil de los profesionales de la enseñanza interesados en esta herramienta didáctica pertenecen en su mayoría al campo de la Bioquímica y Biología Molecular y en general a los diversos campos de la Química.

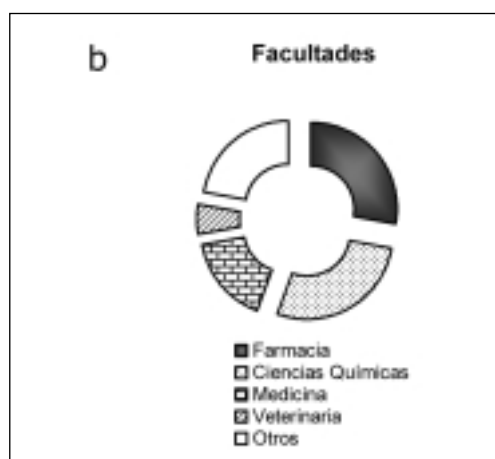
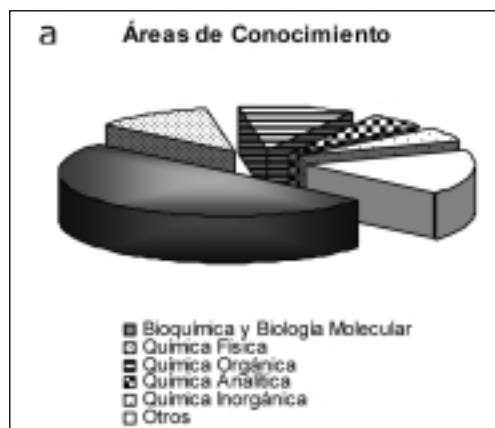


Figura 1. Perfil profesional de los asistentes al taller

### PROGRAMA TEÓRICO Y PRÁCTICO

A continuación se recoge un guión de los temas tratados y de la experiencia práctica que han llevado a cabo los asistentes al taller:

#### 1) Introducción

- a) Ventajas e inconvenientes que presentan los modelos en ordenador. Aplicación de los mismos al estudio, enseñanza e investigación en diferentes campos de la ciencia.
- b) Virtudes de Jmol y análisis comparativo de este programa frente a otros, como RasMol y Chime. Prestaciones de Jmol: acabado, moléculas, objetos, percepción espacial, efectos, manejo, formatos de archivo.

#### 2) Obtención del programa, instalación y uso

- a) Obtención del programa Jmol y de la miniaplicación JmolApplet (<http://jmol.org>).

#### Trabajo práctico:

- i) descargar el paquete comprimido (zip o tar.gz) en el disco duro (escritorio/alumno/jmol-11.2.12-binary.zip)
- ii) descomprimir el paquete comprimido en el disco duro (escritorio/alumno/jmol-11.2.12-binary.zip/jmol-11.2.12/)

- b) Instalación de Java.
- c) Preparación para usar el programa autónomo o «aplicación» Jmol.
- d) Preparación para construir páginas web con modelos moleculares mediante la miniaplicación Jmol Applet.

#### 3) Obtención y modificación de archivos de modelos moleculares

- a) Obtención de archivos a partir de:
  - 1) diversas bases de datos accesibles por Internet;
  - 2) modelos moleculares

generados por ti mismo; 3) modelos moleculares (en Chime o en Jmol) presentes en la red.

*Trabajo práctico:*

- i) buscar algunos modelos a través de la opción a) o c).
- ii) visualizar las estructuras moleculares colocadas en el aula virtual del taller abriendo los correspondientes ficheros en la sección «descarga de archivos».
- iii) descargar alguno de los ficheros de moléculas localizados según se indica en los apartados anteriores y situarlos en la carpeta raíz de lo que será el sitio web: *escritorio/alumno/Jmol-para-web/* (figura 2).

- b) Modificación de modelos moleculares con un editor de texto.

4) *Procedimiento para la inclusión de modelos moleculares en páginas web sencillas*

- a) Recomendaciones para los nombres de los archivos y rutas de acceso a los mismos.
- b) Archivos necesarios y su ubicación en una carpeta destinada al desarrollo del sitio web:
  - i) Jmol.js y los 16 archivos cuyo nombre empieza por JmolApplet0 y termina por .jar.
  - ii) algún archivo de modelo molecular que se quiera incluir en la página web.
  - iii) archivo de la página web donde van a figurar los modelos moleculares. Este taller no se centra en el diseño y desarrollo de páginas web, pero sí se describe y muestra qué código JavaScript deben incluir dichas páginas, y en particular la ruta de archivo correcta que apunte a los archivos de Jmol.

*Trabajo práctico:*

- (1) *Descargar del aula virtual (opción «descarga de archivos») alguno de los ficheros de plantilla suministrados como: «Ejemplo 1 de página con modelos (zip para descargar): ejemplo1.zip» grabándolo en la carpeta raíz del sitio web: escritorio/alumno/Jmol-para-web/. Descomprimir el fichero y cambiar su nombre por el del que va a ser la página particular de cada asistente al taller («ejemplo1 alumno.htm») (figura 2).*
- (2) *Abrir la página con un editor de páginas web o un editor de texto (usamos el Bloc de Notas de Windows).*
- (3) *Buscar dentro del código fuente: jmolApplet(300,»load ejemplo-molecula.mol«) y sustituir «ejemplo-molecula.mol» por el nombre de un archivo de modelo que cada alumno ha situado previamente en su carpeta (apartado 3a). Grabar.*
- (4) *Abrir la página en el navegador y comprobar que el modelo se visualice correctamente.*

- c) Mejorar la edición de la página web con más controles sobre el modelo: botones, enlaces, casillas de verificación, botones de tipo radio, menús... y todo tipo de representaciones del modelo.

5) *Procedimiento para la incorporación de esas páginas en el entorno de aula virtual de WebCT*

- a) Abrir una asignatura o seminario en el CV.
- b) Cargar en dicho seminario los ficheros necesarios indicados en el apartado 4.
- c) Añadir una «página única» en el seminario que será la página web de modelos.
- d) Mostrar opciones de trabajo más avanzadas para quienes tengan práctica en la edición y gestión de páginas web, así como en el manejo de la plataforma WebCT.

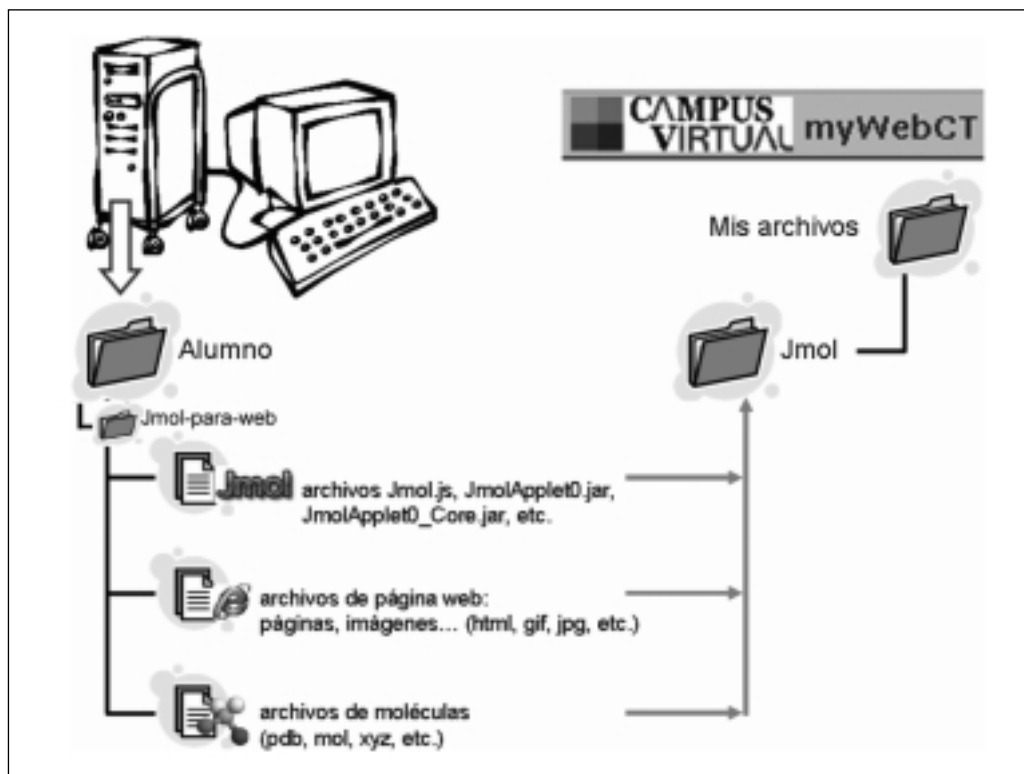


Figura 2. Archivos necesarios para la inclusión y correcta visualización de páginas web con modelos moleculares en el CV-UCM

#### ENTREGA DEL CD «BIOROM 2008» Y DEL CUESTIONARIO A TODOS LOS ASISTENTES AL TALLER

Al finalizar este curso se repartió a todos los participantes un original de la última versión del CD-ROM «Ayudas al aprendizaje de la Bioquímica, Biotecnología y Biología Molecular»: «BioROM 2008» (D.L. MA-1056-2007, Licencia de Creative Commons), del que son coautores los responsables del taller. Se animó a todos los interesados a participar en la ampliación de los contenidos de estudio/aprendizaje que se incluirán en la próxima edición de dicho CD-ROM.

Los resultados de la encuesta realizada se expresan de forma porcentual en las gráficas de la figura 3 (a,b,c):

#### CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS FUTURAS

La valoración de este taller, según la opinión subjetiva de los responsables del mismo y la obtenida a través del cuestionario a los asistentes, indica: a) grado de cumplimiento de los objetivos marcados muy satisfactorio; b) elevado interés por los contenidos teóricos y prácticos; c) que la metodología empleada ha sido adecuada para desarrollar la materia del programa; d) que es de gran utilidad para la preparación de material de apoyo docente. Sin embargo, la gran mayoría de los asistentes considera que la duración del taller ha sido insuficiente y aunque el grado de aprendizaje conseguido en el 90% de los mismos es como mínimo aceptable, habría sido necesario más tiempo para poder practicar con más deteni-



Figura 3. Evaluación del taller según contestación al cuestionario/encuesta

miento cada uno de los apartados descritos en el programa. Por todo ello, y como refleja la encuesta realizada, así como la opinión verbalmente expresada por los participantes en este taller, hay un interés general en realizar otro curso sobre Jmol con mayor extensión de sus contenidos y que profundice en aspectos concretos de este programa.

La creación de un seminario propio para cada asistente dentro de su CV-UCM se propuso, no sólo para desarrollar la parte práctica de este taller, sino también para que de cara al futuro cada profesor pudiera sacar más prove-

cho de su trabajo en el mismo: practicando, ampliando los contenidos recogidos en dicho seminario y aplicando esta herramienta didáctica en su actividad docente y/o de investigación.

Por otra parte, el seminario creado por los responsables del taller «Taller modelos moleculares Jmol» se ha dejado abierto para que los alumnos puedan seguir utilizando los contenidos expuestos en él y al mismo tiempo puedan seguir comunicándose entre ellos y/o con los profesores implicados a través del foro y/o correo, respectivamente. En definitiva, quisimos abrir la posibilidad de seguir trabajando y practicando de forma continuada con posterioridad al desarrollo de esta actividad.

Los alumnos mostraron su satisfacción por el taller en su conjunto, incidiendo especialmente en la utilidad del material didáctico «apuntes del taller» que se les proporcionó (de forma impresa y como fichero descargable en el seminario) con todos los contenidos teóricos y prácticos que se desarrollaron; esta guía les permitiría no sólo un mejor seguimiento del taller, sino también poder revisar todo lo tratado con posterioridad al mismo. Fue también valorada muy positivamente la disponibilidad de los profesores para atender de forma personalizada a cada uno de los participantes.

En conclusión, este taller de tipo práctico, de muy distendido ambiente entre alumnos y profesores, ha tenido muy buena acogida. Por ello la propuesta de desarrollar otro curso de mayor extensión y duración ha sido firmemente respaldada por los asistentes, y constituye uno de los proyectos futuros que los responsables de este taller, miembros del mismo grupo de innovación educativa y mejora de la calidad docente, consideran de gran interés.

## BIBLIOGRAFÍA

GARCÍA ZAPICO, A.; MORCILLO ORTEGA, J. G.; REYERO GARCÍA, D. Y RODRÍGUEZ QUINTANA, E.: «WebCT 4.1. para profesores de la UCM Abril 2005». <https://www.ucm.es/info/uatd/CVUCM/documentos/manYTut/manualCV.pdf>

GUÍA JMOL disponible en BioROM2008 (CD-ROM D.L. MA-1056-2007, Licencia de Creative Commons y [www.biorom.uma.es](http://www.biorom.uma.es))

HERRÁEZ, A. (2007). *Cómo utilizar Jmol para estudiar y presentar estructuras moleculares*. ISBN 978-1-84753-710-2. Lulu.com

MIRÓ, M. J.; MÉNDEZ, M. T.; RAPOSO, R.; HERRÁEZ, A.; BARRERO, B. y PALACIOS, E.: «De-

sarrollo de una asignatura virtual de tercer ciclo como un espacio de enseñanza-aprendizaje que permite la participación activa del alumno», en *Campus Virtual UCM3: Innovación en el Campus Virtual metodologías y Herramientas*, pp. 304-306. Editorial Complutense SA. ISBN: 978-84-7491-811-3; D.L. M-8.922-2007.