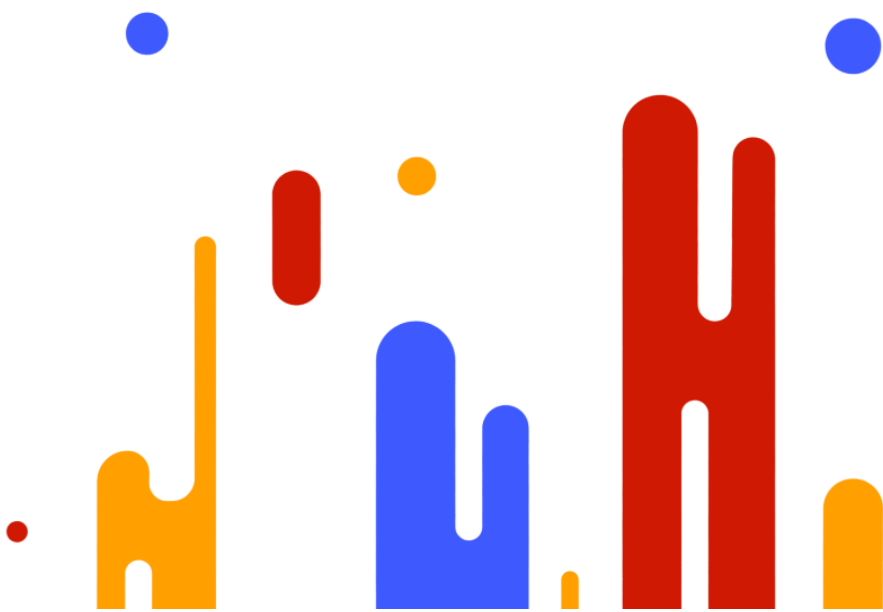


Jardim de Moléculas: um catálogo virtual para
ensino reprodutível de modelos atômicos ao ensino
básico

José Maurício Schneedorf Ferreira da Silva,
Marília Gabriela Freire Nogueira,
Luiz Antonio Staub Mafra e
Luiz Eduardo da Silva



10.47247/LSCC/6063.145.8.8



V&V Editora

Santo André, São Paulo – Brasil

Tel./Whatsapp: (11) 94019-0635

E-mail: contato@vveditora.com

vveditora.com

@vveditora

**Expediente**

Coordenação Editorial: Marilena Rosalen

Coordenação de Área: Everton Viesba

Revisão: Letícia Moreira Viesba

Edição: Everton Viesba

Equipe editorial: Marco André, Larisse Maia Rodrigues, Juliana Bastos, Andressa Souza.

Conselho Editorial

Profa. Dra. Marilena Rosalen

Profa. Dra. Angela Martins Baeder

Profa. Dra. Eunice Nunes

Profa. Dra. Luciana A. Farias

Profa. Dra. Maria Célia S. Gonçalves

Profa. Dra. Rita C. Borges M. Amaral

Profa. Dra. Silvana Pasetto

Profa. Ma. Beatriz Milz

Profa. Ma. Marta Angela Marcondes

Prof. Dr. José Guilherme Franchi

Prof. Dr. Luiz Afonso V. Figueiredo

Prof. Dr. Flávio José M. Gonçalves

Prof. Dr. Giovano Candiani

Prof. Me. Arnaldo Silva Junior

Prof. Me. Pedro L. Castrillo Yagüe

Prof. Me. Everton Viesba-Garcia

Profa. Ma. Letícia Moreira Viesba

Profa. Ma. Erika Brunelli

Organização

Organização: Lara Santana Correia Costa e Claudinei Zagui Pareschi

Parecer e revisão por pares

Os textos que compõem esta obra foram submetidos para avaliação da Coordenação e/ou Conselho Editorial da V&V Editora, sendo aprovados na revisão por pares para publicação.

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

x Aprendizagem Ativa: caminhos para o protagonismo, a inovação e a construção do conhecimento. Lara Santana Correia Costa e Claudinei Zagui Pareschi (organizadores) – Santo André: V&V Editora, 2026.
198 p. : 16 x 23 cm

Inclui bibliografia

ISBN 978-65-6063-145-8

DOI 10.47247/LSCC/6063.145.8

1. Um. 2. Dois. I. Três. II. Título.

CDD x

Elaborado por Maurício Amormino Júnior – CRB6/2422

Ensino reprodutível

O ensino reprodutível (ER) busca envolver práticas pedagógicas alternativas ao ensino tradicional, prevendo a possibilidade de reprodução, modificação, e criação de novos objetos didáticos junto a algoritmos computacionais (Bacich e Moran, 2017). Baseado na *programação letrada* de Donald Knuth (Knuth, 1984) e com tonalidades da *pesquisa reprodutível* (Hayden et al., 2023), o ER utiliza linguagem de programação comentada e combinada a textos formatados para a produção de um largo espectro de *documentos dinâmicos* contendo texto, cálculos, análises, e elementos visuais gerados pela linguagem. Em síntese, tais objetos são elaborados junto a 3 pilares fundamentais do ER: reprodutibilidade computacional, documentação e acesso amplos a códigos e seus produtos (Dogucu e Çetinkaya-Rundel, 2022).

Não obstante seu potencial, o ER encontra-se em fase embrionária, com tímida representação na literatura pertinente, predominantemente de estatística e matemática (Ball et al., 2022), e ainda não estabelecido como vertente metodológica reconhecida no campo educacional. Ainda assim, é possível identificar na metodologia algum respaldo teórico ao construcionismo de Seymour Papert para artefatos tangíveis, por criação e compartilhamento de materiais de ensino digitais sob o protagonismo de professores e estudantes. Nessa linha, o ER também coaduna com a aprendizagem significativa de David Ausubel, pela possibilidade de uso de *scripts* versionados e comentados a operar como organizadores lógicos, facilitando a ancoragem de novos conceitos ao aprendiz (Lima, 2019). Em complementação, também flerta com a abordagem sociocultural de Lev Vygotsky e com a educação progressiva de John Dewey, ao primeiro pela modelagem de conduta frente à práticas educacionais transparentes do docente (códigos comentados e abertos à finalidade didática), ao mesmo tempo em que permite uma ação investigativa baseada na experimentação pelo segundo, modificação e reaplicação de códigos para novos contextos.

Modelos atômicos e literacia visual em ensino-aprendizagem

Em paralelo aos documentos, também é possível aplicar o ER para produção de diversos objetos de aprendizagem digitais interativos, tais como gráficos, mapas, tabelas, e modelos atômicos (Schneedorf, 2025). Nesse sentido, programas de computador que atuam renderizando modelos atômicos em 3D utilizam um conjunto de comandos sequenciais a partir de uma sintaxe própria de linguagem de programação. Tendo isso em mente, a proposta contida neste texto foi aplicar o ER para a elaboração de um catálogo de modelos atômicos para o ensino básico, tanto pela criação de um documento dinâmico como para a visualização dos modelos na

web, e contendo instruções para reprodutibilidade/modificação de ações sobre suas estruturas.

Entre diversas definições, a *literacia visual* consiste na habilidade de interpretação, criação e comunicação de informações visuais (Brill e Branch, 2007). Nas áreas de Química e correlatas, como a *Bioquímica* (Offerdahl, Arneson e Byrne, 2017), essa habilidade assume significância particular face às representações visuais de reações químicas e de estruturas atômicas (Popova e Jones, 2021). Numa rara e feliz coincidência entre as necessidades de mercado (indústria farmacêutica e de biotecnologia (Wang e Durrant, 2022) e a melhoria de processos de ensino e aprendizagem, vários programas de visualização tridimensional de modelos atômicos, desde átomos isolados até associações poliméricas, foram desenvolvidos ao longo dos últimos 50 anos.

Nesta seara elenca-se *FRODO* (Palmer, Tickle, e Tickle, 1983), um pioneiro na visualização molecular em 3D, criado em 1978 no Laboratório de Biologia Molecular da Universidade de Cambridge (Reino Unido). Anos mais tarde, no Departamento de Química da Universidade de Edimburgo (Reino Unido), foi desenvolvido o [Rasmol](#), programa utilizado por *big pharmas* como Pfizer, Merck e Glaxo, para estudos de ancoragem molecular, inibidores enzimáticos e ligantes proteicos. Seu sucesso mercadológico propiciou outras iniciativas comerciais à indústria farmacêutica e de biotecnologia, entre as quais [Pymol](#), largamente utilizado hoje por universidades e empresas.

E na contramão da indústria (embora já utilizado por esta para treinamentos), a criação do [Jmol](#), um programa desenvolvido no ano 2000 como um *applet Java* a partir do *Rasmol*, pela Universidade de Notre Dame (Estados Unidos). O *Jmol* é um aplicativo multiplataforma de acesso livre, código de fonte aberto (*open-source*), e grande comunidade de contribuidores. Foi criado para pesquisa científica e educação, tendo se tornado fortemente associado a esta no estudo de biopolímeros (proteínas e ácidos nucleicos, principalmente). O *Jmol* destacou-se de ferramentas correntes a ponto de tornar-se uma alternativa para visualização 3D junto ao principal banco de dados utilizados em biotecnologia e pesquisa de novos fármacos, [PDB- Protein Data Bank](#), hoje com mais de 230 mil estruturas identificadas pro raios-X e NMR, e mais de 1 milhão de estruturas por predição computacional.

Jmol

O *Jmol* permite uma diversidade de renderizações cromáticas, movimentos de translação e rotação das moléculas, ampliação visual, cálculos de distância, ângulos, estruturas e superfícies, otimizações moleculares, cálculos e visualização de orbitais moleculares, e animações, dentre outros. Pode ser executado tanto em versão fechada (*standalone*), como integrado a outras aplicações em *Java*. Quando instalado, o programa pode “rodar” a partir de uma pasta de diretório contendo seus arquivos, num disco rígido ou mídia removível (*pendrive*). O *Jmol* possui uma versão

de acesso *online* por applet de *JavaScript*, denominado *JSmol*, e que possui as mesmas características do programa em mídia física.

Um dos principais contribuidores do *Jmol* à sua disseminação como ferramenta de ensino foi Angel Herráez, da Universidade de Alcalá (Espanha). Além de fomentar a discussão de seu uso com livros, tutoriais, e guias detalhados, aprimorou o *software* para melhoria de *scripting* e integração com recursos *online* interativos (Herráez, 2008), como [Proteopedia](#) (Hanson et al., 2013) e [ChemApps](#) (Herráez e Hanson, 2017). O segundo, mantido pelo Departamento de Química do St. Olaf College (EUA), é um dos principais portais de acesso remoto ao applet *JSmol*, necessário para “rodar” o [Jmol em nuvem](#), e tal como proposto neste trabalho.

Características do Jmol ao ensino e aprendizagem

Uma vez acessado um modelo atômico pelo *Jmol*, o aprendiz pode optar desde uma observação estática simples, como também pelo uso de mouse para movimentos de rotação, translação, ampliação/redução, identificação de átomos e partes da estrutura, e a construção de animações por códigos comentados (*scripts*) e reprodutíveis. Como um todo, portanto, oportunizando uma apropriação de características moleculares para o modelo, de forma mais abrangente e certamente lúdica, quando comparada aos mesmos modelos estáticos apresentados em folhas de papel ou *ebooks*. Esta “vivificação” para modelos atômicos (Schneedorf, 2025) permite o desenvolvimento/aprimoramento de habilidades espaciais à compreensão de conceitos por vezes abstratos de átomos e moléculas (Silva, Júnior, e Pires, 2017). A instrução multimidiática é bem conhecida prover atitudes positivas para aprendizagem cognitiva mediante uma 1) imagem em 2) movimento para uma 3) simulação da realidade, quando comparada à “palavras e figuras” (Mayer e Moreno, 2002). Além disso, o potencial de visualização dinâmica reduz a *carga cognitiva* à compreensão de fenômenos por vezes representados por sequências de imagens em livros didáticos (Chandler e Sweller, 1991). Pela funcionalidade do *Jmol* em permitir uma ampla gama de ações interativas diretamente ao modelo, agrega valor adicional ímpar, e não correspondido em situações não interativas, como simples animações ou intervenções limitadas à iniciação/pausa/interrupção (Höffler e Leutner, 2007).

Funcionalidades do programa

O *Jmol* possui um conjunto extenso de qualidades para lubrificar o caminho de aprendizagem de moléculas, tais como:

1. Programa didático e intuitivo;
2. Não requer *plugins* ou instalação de *Java* no sistema operacional;
3. Não requer instalação, apenas inicialização de arquivo executável em *Java*;

4. Portabilidade ampla; basta copiar o diretório do programa pra uso em mídias removíveis;
5. Permite salvar a imagem como um PNG interativo, e cujo arquivo pode ser aberto num visualizador de imagens, ou de forma integrada, diretamente no Jmol. Para imagens interativas, basta clique-e-arraste da mesma à janela do Jmol;
6. Permite inserção de modelos tridimensionais em páginas da internete por *JavaScript*;
7. É bastante empregado na produção de imagens e modelos dinâmicos em diversos sites e livros;
8. Possui um número elevado de guias e tutoriais disponíveis *online*;
9. Adota linhas de comando simples para efeitos visuais (cores, representações, ligações, simetria (Cass *et al.*, 2005));
10. Facilita a identificação de erro de digitação, destacando em vermelho a linha de comando;
11. Permite *scripts* salvos como animações por um conjunto sequencial de comandos;
12. Permite uso de mais de uma seção simultaneamente;
13. Permite uso de kit de ferramentas de desenvolvimento para outros aplicativos em *Java*;
14. Permite *Menu* customizável pelo usuário;
15. Possui vasto grupo de usuários bastante ativo na internet;
16. Inclui análise de simetria cristalográfica;
17. Apresenta diversos formatos para superfícies moleculares (van der Waals, superfície molecular, área acessível ao solvente - SAS, potencial eletrostático);
18. Permite carregamento de arquivos acima de 60 formatos, incluindo Protein Data Bank (PDB), Crystallographic Information File (CIF), MDL Molfile (mol), e Chemical Markup Language (CML), bem como sessões do Pymol (PSE);
19. Permite carregamento da molécula a partir da internet, pela introdução de código PDB, SMILES ou PubChem, além de linguagem SMART;
20. Permite o carregamento simultâneo de vários modelos;
21. Possibilita a renderização também em 2D, o que facilita a identificação estrutural para moléculas pequenas;

22. Exporta para GIF, JPG, PNG, PDF, WRL, POV-Ray, e OBJ;
23. Possui biblioteca genérica *JavaScript* para Swing;
24. Permite leitura de formatos espectroscópicos de JCAMP-DX, CML, AnIML por JSpecView;
25. Permite simulação de espectrogramas de ^1H e ^{13}C de NMR;
26. Produz espectros interativos em formato PDF de IR, Raman, NMR, GC/MS, e UV/VIS;
27. Suporta cálculos de energia e minimização estrutural no modelo (MMFF94/UFF);
28. Permite um esboço de modelagem molecular por linhas de comando (*docking*);
29. Permite otimização de estrutura secundária de proteínas;
30. Permite alinhamento de estrutura 3D para comparação ou mutações dirigidas (embora significativamente mais limitado que alguns concorrentes para pesquisa científica)
31. Possui alguns *plugins* para agregar funções aos modelos;
32. Renderiza imagens vetoriais com alta qualidade para publicação, embora de forma indireta (POV-ray);
33. Programa completo de distribuição e código-fonte livres, e não restrito à versões demonstrativas ou educacionais;
34. Possui linguagem de programação própria, *JSmol*, baseada em *JavaScript*;
35. Permite ações sobre o modelo por meio de comandos de texto (*Console*) ou por um editor de *scripts* para criação, edição, execução, e armazenamento de linhas de comandos (*Script Editor*);
36. Permite rodar independentemente da linguagem *Java* em *HTML5* (por incorporar *JavaScript*). Isso permite seu uso por qualquer navegador de internet, como (Chrome, Firefox, Edge, Safari), o que o diferencia de seus concorrentes;
37. Como renderiza as imagens 3D em *HTML5*, permite independência de dispositivo (móvel ou não) e de sistema operacional, ampliando seu acesso ao ensino-aprendizagem.

Essas características do *Jmol* como um programa para uso educacional, aliada a sua plausível inserção como ferramenta ao ensino reprodutível, possibilitaram a elaboração de alguns objetos didáticos interativos e tutoriais guiados

presentes no *site* educacional [Bioquanti](#). O *site* foi concebido para aprendizado autoinstrucional em *Bioquímica* e áreas afins (Schneedorf, 2023), embora conte hoje com diversos objetos de aprendizagem, livros e tutoriais dirigidos, tanto ao ensino superior como ao ensino básico. Tangente ao escopo deste capítulo, o [Bioquanti](#) apresenta conteúdos abertos para uso do Jmol, como um *ebook* e guias tutorados, para o *ensino superior*, e para o *ensino básico*.

Complementarmente, o [Bioquanti](#) também apresenta um catálogo *online* para visualização e estudo de diversas moléculas em 3D com Jmol, muitas das quais observadas em livros-texto do ensino básico, e intitulado *Jardim de Moléculas*.

O Jardim de Moléculas

O *Jardim de Moléculas* constitui um recurso educacional aberto na forma de um catálogo *online* para moléculas em 3D. Foi elaborado como um *documento dinâmico* utilizando-se a linguagem `R` e seu ambiente `RStudio`. Para o desenvolvimento de texto estilizado combinado a conteúdos de compilação, *alma* do ensino reprodutível, foi empregado o pacote `quarto`, uma ferramenta para a criação e publicação de documentos interativos. Esses documentos gerados em *R Markdown* apresentam conteúdos interativos em função do potencial da linguagem *HTML5* para a internet.

Modelos atômicos do “Jardim”

O *Jardim de Moléculas* apresenta alguns modelos atômicos classificados arbitrariamente em função de um equilíbrio entre as peculiaridades da função química a que pertencem, e sua aplicação no cotidiano. Como um todo, foram selecionadas as classes descritas na [Figura 1](#) abaixo.

Figura 1: Alguns modelos atômicos para acesso *online* presentes no *Jardim de Moléculas*.

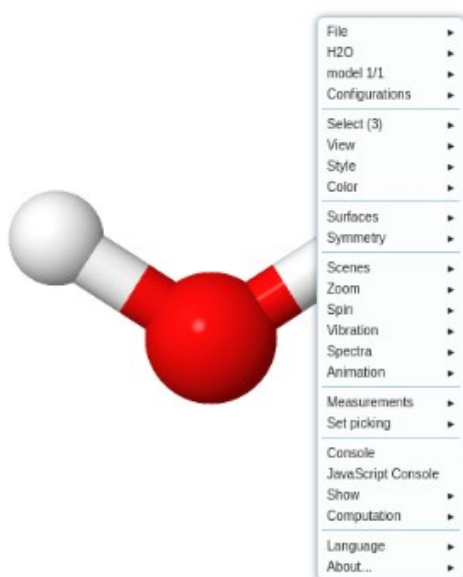
Classes	Exemplos
Orgânicas	hidrocarbonetos (alcano, alceno, alcino), areno, álcool, fenol, éter, aldeído, cetona, ác. carboxílico
Inorgânicas	ácidos, bases, sais, óxidos
Biomoléculas	aminoácido, glicose, lecitina, insulina
Farmacológicas	paracetamol, ibuprofeno, amoxicilina, metformina
Medicinais	penicilina, morfina, warfarina, atorvastatina
Toxicológicas	cianeto, mercúrio, chumbo, dioxina
Nutricionais	curcumina, betacaroteno, licopeno, clorofila
Sabores	glutamato, cafeína, capsaicina, ácido cítrico
Ambientais	dióxido de carbono, dióxido de enxofre, ácido nítrico, ozônio
Peçonhas	bungarotoxina, hialuronidase, conotoxina, fosfolipase A2
Aromas	limoneno, vanilina, geraniol, eugenol
Industriais	amoníaco, metanol, polietileno, cloreto de vinila
Plantas tóxicas	atropina, oleandrina, aconitina
Supramoleculares	nylon, vírus

O acesso ao *Jardim de Moléculas* dá-se pela barra lateral homônima do site *Bioquanti*. Seleciona-se uma classe de moléculas seguido de um modelo atômico entre essas. A molécula aparecerá com uma imagem contendo uma legenda simples. A imagem é clicável e redireciona ao [site do JSmol mantido pela St. Olaf College](#), favorecendo uma interface baseada na *web* para explorar as funcionalidades do Jmol. Essa funcionalidade do *Jardim* permite ao aprendiz uma observação e estudo da molécula, sem a necessidade de instalação de programa ou aplicativo, habilitando o uso do recurso digital em desktop, notebook ou dispositivos móveis. A página que se abre apresenta a molécula em 3D, e renderizada para observações e estudos, esse por operações de menu acessado por um *Console* (o *Script Editor* não é apresentado no *applet* remoto), conforme descrito a seguir.

Alguns comandos para uso do Console

Uma vez apresentado o modelo atômico em 3D, pode-se acessar o Menu principal clicando-se em qualquer área do ecrã ao lado da molécula, conforme apresentado na [Figura 2](#). Para reproduzir o modelo de modo interativo, clique neste [link](#).

Figura 2: Menu de ações para o *Jmol* para uma molécula de água, tal como acessado com o botão direito no canvas da página mantida pela St. Olaf College.



A partir do Menu acessa-se diversas funcionalidades do Jmol, uma das quais o *Console*. Como mencionado anteriormente, o *Console* permite um conjunto extenso de operações pelo *Jmol* (representações, coloração, programação, cálculos, superfícies, e animações). A [Figura 3](#) ilustra alguns comandos para utilização do *Console* para modelo atômico qualquer.

Figura 3: Uma lista de comandos e sua descrição para uso em *scripts* reprodutíveis com *Jmol*.

Comandos e Representações no *Jmol*

Categoria	Comandos
Manipulação Básica	rotate on – Ativa a rotação automática da molécula. rotate x 90 – Roda a molécula 90 graus no eixo X. zoom 150 – Ajusta o zoom para 150%. translate x 50 – Translada a molécula no eixo X. center atomno=1 – Centraliza a visão no átomo número 1.
Representações	wireframe on – Exibe a molécula no formato de bastões. spacefill on – Exibe os átomos como esferas completas (modelo de Van der Waals). ballandstick – Usa o modelo bola e bastão. cartoons – Exibe estruturas secundárias (pouco útil aqui, mas possível em contextos híbridos). dots on – Mostra a superfície acessível ao solvente.
Estilos e Coloração	color cpk – Aplica a coloração CPK (padrão químico). color green – Altera a molécula inteira para verde. color atomno=6 red – Altera a cor de todos os átomos de carbono para vermelho. select hydrogens; color white – Seleciona e colore todos os hidrogênios de branco. isosurface translucent – Torna uma superfície translúcida.
Superfícies	isosurface molecular – Gera a superfície molecular. isosurface vdw – Cria uma superfície baseada nos raios de Van der Waals. isosurface solvent – Calcula a superfície acessível ao solvente. isosurface charge – Mostra uma superfície com base na carga molecular. isosurface delete – Remove a superfície gerada.
Ligações Químicas	calculate hbonds – Calcula ligações de hidrogênio. set bondradius 0.2 – Ajusta a espessura das ligações. bond single – Mostra todas as ligações como simples. bond double – Representa ligações duplas. label hbonds – Adiciona rótulos às ligações de hidrogênio.
Geometria	measure distance atomno=1 atomno=2 – Mede a distância entre dois átomos. measure angle atomno=1 atomno=2 atomno=3 – Mede o ângulo entre três átomos. measure torsion atomno=1 atomno=2 atomno=3 atomno=4 – Mede o ângulo de torção entre quatro átomos. show axes – Mostra os eixos principais. hide axes – Oculta os eixos.
Propriedades Físicas	show charges – Mostra as cargas parciais nos átomos. select carbon; label charge – Mostra as cargas apenas nos carbonos. calculate dipole – Calcula e exibe o momento dipolar. vectors on – Ativa vetores de forças ou dipolos. vectors scale 2 – Ajusta a escala dos vetores.
Animações	animation on – Ativa a animação da molécula. vibration on – Mostra as vibrações moleculares. frame next – Avança um quadro na animação. frame 0 – Retorna ao primeiro quadro. animation stop – Interrompe a animação.
Renderização e Exportação	write state "mol.jmol" – Salva o estado atual do modelo. save pdb "mol.pdb" – Exporta a molécula no formato PDB. save xyz "mol.xyz" – Salva no formato XYZ. write png "image.png" – Exporta uma imagem da visualização. write isosurface "surf.jvxl" – Salva a superfície gerada.

Um *script* para reprodução e edição no *Console*

Apenas como ilustração do potencial de ensino reprodutível para o estudo de moléculas em 3D usando o *Jmol*, segue um *script* para cópia/cola no *Console* do programa, versão online ou instalada em memória física. O *script* fornece uma sequência de operações para carregamento, representação e animação de um modelo atômico de ciclohexanol. Outros *scripts*, assim como várias operações do *Jmol* por linhas de comando, podem ser acessadas junto ao site [Bioquanti](#), em tutorial guiado para ensino básico ao lado do *Jardim*, como também para o [ensino superior], [digitalmente](#) ou por [ebook](#).

```
load $cyclohexanol # carrega a molécula online
delay 2 # aguarda 2 segundos
spin Y 70 # gira no eixo Y em 70 graus
delay 2 # aguarda 2 segundos
spin off # para de girar
zoomTo 2 *2 # duplica progressivamente seu tamanho em 2 segundos
cpk # apresenta a estrutura como espaço preenchido
delay 2 # aguarda 2 segundos
color transparent # imprime uma coloração transparente ao modelo
zoomTo 3 *0.5 # reduz progressivamente à metade de seu tamanho ao longo de 3
segundos
spin 50 # rotaciona o modelo sobre seu eixo a determinada velocidade
```

Aplicação do Jardim e do Jmol em ambiente educacional

Além de projeto de Iniciação Científica para a modalidade Ensino Médio, e projeto de Extensão para um curso de Formação Básica em Educação Digital junto a professores(as) da região de Alfenas (MG), o *Jmol* foi também aplicado em curso do ensino superior. Neste caso, para ilustrar seu potencial à *aprendizagem baseada em projetos*. Ao longo do 2o. semestre de 2024 o programa foi empregado em sala de aula para a disciplina de Bioquímica da turma do 2o. período do bacharelado de Ciências Biológicas da UNIFAL-MG (n=45 estudantes). Além das demonstrações de uso para diversas classes de biomoléculas, foi solicitado aos estudantes que elaborassem uma animação de 20-30 segundos envolvendo um conjunto de ações predeterminadas, e a partir do roteiro pré-estabelecido na [Figura 4](#).

Figura 4: Roteiro para elaboração de uma animação de proteína em trabalho de graduação na UNIFAL-MG.

Trabalho de Bioquímica & Jmol

Objetivo

Produzir um **script** para animação de um modelo atômico com Jmol a partir do código PDB fornecido à equipe (em *dupla*, ou *individual*).

Título

Um título que identifique a molécula, *por nome e por código PDB*, e o que se deseja ressaltar no modelo (ex: sítios-ativo ou de ligação, hierarquia estrutural, domínios, resíduos específicos, características estruturais, etc).

Equipe

Identificação da dupla ou do(a) discente (se individual)

Duração

10 a 20 segundos

Descrição

O **script** de animação deverá conter um **mínimo de elementos** capazes de identificar o que se deseja apresentar no modelo, a saber:

1. carregamento do modelo (*load*),
2. ampliação/redução simples (*zoom*),
3. ampliação/redução programada (*zoomTo*),
4. rotação simples (*spin*),
5. rotação programada (nos eixos; ex: *spin X 40*),
6. alteração de representações (ex: *cpk*, *wireframe*, etc),
7. alteração de espessura nas representações (ex: *wireframe 1.5*, *trace 0.5*, etc)
8. alteração de coloração (ex: por estrutura 2a, por cadeia, por grupos, etc)
9. apresentação de uma superfície (ex: *van der Waals*, *molecular*, etc),
10. representação destacada de uma parte revelante ao estudo do modelo (ex: sítio ativo, sítio para ligante, ligações dissulfeto, ligações de hidrogênio, domínio específico, etc),
11. um comando do Jmol não explicitado acima (ex: *slab*, *restrict*, *hide*, etc).

Os alunos foram distribuídos em duplas, seguindo-se o compartilhamento no *Google Docs* de uma tabela contendo diversos códigos [PDB - RCSB Protein Data Bank](#) para seleção voluntária de modelos moleculares de proteínas e enzimas. Seguiu-se então as instruções para o trabalho, aulas no laboratório de Informática para aprendizado da ferramenta, compartilhamento do tutorial presentes na página do site [Bioquanti](#) sobre o software e sua aplicação na área, e acompanhamento dos trabalhos.

Ilustrando o resultado desses, o *script* que segue apresenta uma animação reprodutível e executável no *Console* do *Jmol*, para o complexo opressor-repressor lambda (PDB 1LMB), um sistema molecular que controla a reprodução do *Lambdavirus*. O complexo possui em torno de 67 Å de comprimento, apresenta estrutura quaternária e é formado por uma dupla hélice, em roxo, e pelas proteínas repressor lambda (*cl*) e opressor lambda (*cro*), em verde. Essas proteínas se ligam ao DNA do vírus, iniciando ou inibindo os ciclos lítico e lisogênico. Os resíduos de aminoácidos Arg, Tyr e Lys (em azul, vermelho e amarelo, respectivamente) auxiliam na estabilidade das proteínas e na sua ligação ao DNA.

```

# 1. Apresenta o modelo
load =1lmb # carrega o complexo opressor-repressor lambda
cartoon only # representa como desenho
select dna; color purple; # seleciona e colore DNA
select protein; color green # seleciona e colore proteína
rotate y 60; rotate x -50; delay 2 # alinha a molécula para melhor observação

# 2. Realiza medidas e rotaciona
measure 10 411; delay 3; measure off # mede o comprimento da molécula
spin 50; delay 7; spin off # rotaciona a molécula

# 3. Apresenta a dupla hélice de DNA e proteína
select protein; wireframe only 10; delay 3; cartoon only; select dna; wireframe only
10;delay 3; cartoon only; delay 1

# 4. Seleciona e identifica resíduos e aminoácidos importantes na ligação DNA-
proteína (Arg, Tyr e Lys)
select arg; color blue; select tyr; color red; select lys; color yellow; delay 2
rotate y -80 1; delay 0.5; zoomto 2.5 150; delay 4; zoom 100; rotate y 80 20; delay 1

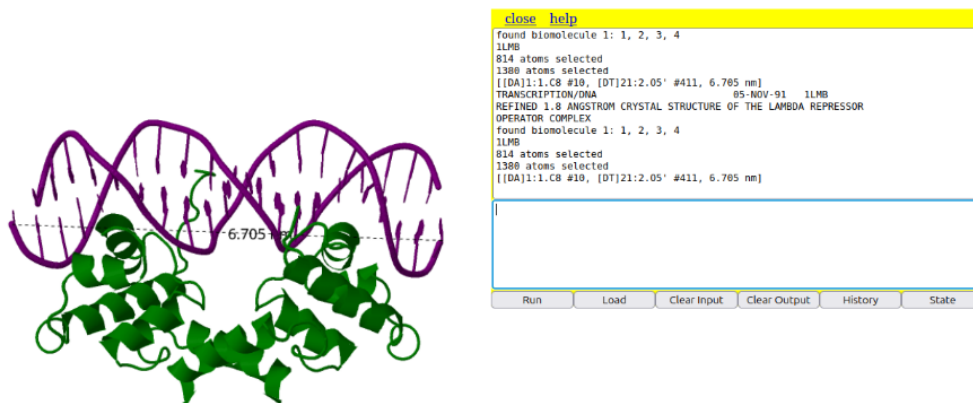
# 5. Apresenta as ligações de hidrogênio para a ligação
select all; cpk only; cpk 100; delay 1; zoomto 1 150; delay 1; calculate hbonds; hbonds
25; delay 3; zoomto 3 100; hbonds off

# 6. Finaliza a apresentação
spin 50; delay 7; spin off
select all; color grey; delay 1.5
zap

```

Uma tela da versão online para o *Jmol* contendo o modelo acima, é representada na [Figura 5](#).

Figura 5: Imagem congelada do *JSmol* apresentando o complexo opressor-repressor lambda (PDB 1LMB), bem como a medida de seu tamanho, conforme *script* sugerido no texto.



Conclusão

O *Jmol* e sua versão online *JSmol* constituem excelentes recursos abertos digitais para ensino-aprendizagem em modelos atômicos e moleculares, incluindo sua gratuidade, facilidade de uso, oferta em mídia ou em nuvem, extensa biblioteca de comandos para ações diversas dos modelos, bem como capacidade para produção de trechos de códigos à execução de tarefas e aprendizagem por projeto para os modelos, compartilháveis para ambientes educacionais. Dessa forma, o *Jmol* pode contribuir como um atrativo para reduzir a abstração visual ao aprendizado de moléculas em química, biologia, e áreas afins.

Plataforma para elaboração do capítulo

A formatação de texto (*Markdown*), inserção de trechos de códigos (*RMarkdown*), imagens, gerenciamento bibliográfico, e compilação para documento dinâmico como arquivo *DOCX*, foram conduzidos com *R* (versão 4.3.3, fev/2024) em ambiente *RStudio* (versão 2024.09.1 Build 394), e pacote *quarto* (versão 1.4.4).

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

Referências

BACICH, L.; MORAN, J. Metodologias ativas para uma educação inovadora: uma abordagem teórico-prática. [S. l.]: Penso Editora, 2017.

BALL, R. *et al.* An invitation to teaching reproducible research: lessons from a symposium. *Journal of statistics and data science education*, [s. l.], vol. 30, n.º 3, p. 209–218, 2022.

BRILL, J. M.; MARIBE BRANCH, R. Visual literacy defined—the results of a Delphi study: can IVLA (operationally) define visual literacy? *Journal of visual literacy*, [s. l.], vol. 27, n.º 1, p. 47–60, 2007.X

CASS, M. E. *et al.* The use of the free, open-source program *Jmol* to generate an interactive web site to teach molecular symmetry. *Journal of chemical education*, [s. l.], vol. 82, n.º 11, p. 1736, 2005.

CHANDLER, P.; SWELLER, J. Cognitive load theory and the format of instruction. *Cognition and instruction*, [s. l.], vol. 8, n.º 4, p. 293–332, 1991.

DOGUCU, M.; ÇETINKAYA-RUNDEL, M. Tools and recommendations for reproducible teaching. *Journal of Statistics and Data Science Education*, [s. l.], vol. 30, n.º 3, p. 251–260, 2022.

HANSON, R. M. *et al.* JSmol and the next-generation web-based representation of 3D molecular structure as applied to proteopedia. *Israel Journal of Chemistry*, [s. l.], vol. 53, n.º 3-4, p. 207–216, 2013.

HAYDEN, G. *et al.* Supporting reproducible research. *Scholarly communication librarianship and open knowledge* Association of College; Research Libraries, 2023.

HERRÁEZ, A. How to use Jmol to study and present molecular structures. [S. l.]: Lulu. com, 2008. vol. 1

HERRÁEZ, A.; HANSON, R. M. Jmol para enseñar y aprender química. *Educación química*, [s. l.], n.º 22, p. 13–21, 2017.

HÖFFLER, T. N.; LEUTNER, D. Instructional animation versus static pictures: A meta-analysis. *Learning and instruction*, [s. l.], vol. 17, n.º 6, p. 722–738, 2007.

KNUTH, D. E. Literate programming. *The computer journal*, [s. l.], vol. 27, n.º 2, p. 97–111, 1984.

LIMA, V. V. Espiral construtivista: uma metodologia ativa de ensino-aprendizagem. *Interface - Comunicação, Saúde, Educação*, [s. l.], vol. 23, n.º e180731, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/1807-57622016.0316.X>

MAYER, R. E.; MORENO, R. Animation as an aid to multimedia learning. *Educational psychology review*, [s. l.], vol. 14, p. 87–99, 2002.

OFFERDAHL, E. G.; ARNESON, J. B.; BYRNE, N. Lighten the load: Scaffolding visual literacy in biochemistry and molecular biology. *CBE—Life Sciences Education*, [s. l.], vol. 16, n.º 1, p. es1, 2017.

PALMER, R. A.; TICKLE, J. H.; TICKLE, I. J. Acetylcholine receptor site: a proposed model. *Journal of Molecular Graphics*, [s. l.], vol. 1, n.º 4, p. 94–106, 1983.

POPOVA, M.; JONES, T. Chemistry instructors' intentions toward developing, teaching, and assessing student representational competence skills. *Chemistry Education Research and Practice*, [s. l.], vol. 22, n.º 3, p. 733–748, 2021.

SCHNEEDORF, J. M. Bio quanti, um website interativo para ensino-aprendizagem em Bioquímica. *Revista de Ensino de Bioquímica*, [s. l.], vol. 21, n.º 1, p. 110–124, 2023.

SCHNEEDORF, J. M. Vivificando Conteúdos Para o Ensino Básico: Moléculas, Gráficos, e Mapas Interativos. [S. l.]: Pimenta Cultural, 2025. p. 84

SILVA, C. S. da; SOUZA JÚNIOR, E. V. de; PIRES, D. A. T. O uso de software de representação molecular em 3D como material didático interdisciplinar para o Ensino de Química. *Experiências em Ensino de Ciências*, [s. l.], vol. 12, n.º 2, p. 66–79, 2017.

WANG, A.; DURRANT, J. D. Open-source browser-based tools for structure-based computer-aided drug discovery. *Molecules*, [s. l.], vol. 27, n.º 14, p. 4623, 2022.