

# Modelagem molecular computacional e kit de montagem com impressora 3D: Prêmio Nobel de Química de 2015 como um estudo de caso

Taicimara F. Bonora (IC)<sup>1</sup>, Luana Moreira (IC)<sup>2</sup>, Rafael D. Capistrano(IC)<sup>2</sup>, Fabiana Roberta G. S. Hussein<sup>2</sup> (PQ), David Kretschek<sup>3</sup> (PQ), Marcos B. Gonçalves\*(PQ)<sup>1</sup> marcosb@utfpr.edu.br

1 Departamento de Física - Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), Curitiba - PR, 80230-901

2 Departamento de Química - Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), Curitiba - PR, 80230-901

3 Engenharia Mecânica - Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), Curitiba - PR, 80230-901

Palavras-Chave: DNA, modelagem molecular computacional, impressão 3D

## Introdução

Muitos alunos não conseguem entender os conceitos gerais de química, biologia e física, pois as aulas lhes parecem muito complicadas, confusas e desestimulantes. O objetivo geral desse projeto é facilitar o aprendizado dos estudantes e tornar o ensino de química e biologia mais atraente e agradável, utilizando como recurso a modelagem computacional, representações gráficas, modelos virtuais tridimensionais e a confecção de modelos físicos modulares (análogos às peças de LEGO) de DNA, realizados em impressora 3D. Esses recursos podem ser utilizados como um complemento à atual metodologia predominante (quadro e livro texto), a qual, em muitos casos, é desinteressante aos olhos dos alunos.

Este projeto faz parte de um programa interno da UTFPR para a produção, utilização e disseminação de recursos educacionais abertos (REA) em diferentes áreas de conhecimento para disponibilização a professores e estudantes do Ensino Médio e Ensino Superior. O alvo do estudo é a preparação de um material didático de livre acesso para a divulgação científica do Prêmio Nobel de Química de 2015. Para tanto está em fase de confecção páginas de internet com a temática desde a descoberta e a estrutura do DNA até a origem molecular que pode originar no desenvolvimento de células cancerígenas.

## Resultados e Discussão

Os recursos educacionais abertos (REA) estão sendo desenvolvidos para a futura divulgação no repositório ROCA<sup>1</sup> sob a licença *creative commons*<sup>2</sup>. Os REA aqui produzidos são páginas html com recursos interativos apresentando de forma esquemática e sucinta os mecanismos de reparação do DNA (<http://romeo.if.usp.br/~brownngon>). Para tanto foi necessário criar uma série de páginas html introduzindo desde a estrutura do DNA, incluindo as bases nitrogenadas, as interações que o mantém estável, a informação genética contida no mesmo; a replicação, transcrição e tradução para a proteína; o estudo das mutações, as causas físicas, químicas e

biológicas, e as diferentes formas de alteração estrutural no DNA. E finalmente descrevendo os mecanismos moleculares de reparação do DNA que são o alvo do Prêmio Nobel de Química de 2015<sup>3</sup>. As páginas html incluem recursos interativos utilizando scripts jsmol<sup>4</sup>. Desta forma além do conteúdo formal da página html, estará disponível as instruções para a confecção de diversas estruturas com impressora 3D. A proposta da construção deste material didático se baseia na possibilidade dos estudantes interagirem virtualmente com as estruturas e também, quando disponível, com as peças produzidas em impressora 3D.

As atividades expostas acima têm como objetivo contribuir para o ensino e aprendizagem dos alunos de forma inovadora e lúdica. Uma metodologia expositiva, que conta com a participação ativa dos alunos.

## Conclusões

Neste trabalho estão sendo produzidos recursos educacionais abertos (REA) utilizando modelagem computacional e impressão 3D com o objetivo de auxiliar na divulgação das mais recentes descobertas científicas, em especial, esclarecer sobre o universo molecular dos mecanismos de reparação do DNA que estão diretamente relacionados ao desenvolvimento do câncer.

## Agradecimentos

Grupo de Impressão 3D (Gip3D) Universidade Tecnológica Federal do Paraná.  
Coordenação de Tecnologia na Educação- COTED Universidade Tecnológica Federal do Paraná.

1. UTFPR. Repositório de Outras Coleções Abertas (ROCA). Disponível em: <http://repositorio.roca.utfpr.edu.br/jspui/>. Acesso em 11/04/2016

2. Creative Commons. Disponível em: [https://creativecommons.org/licenses/?lang=pt\\_BR](https://creativecommons.org/licenses/?lang=pt_BR). Acesso em 11/04/2016

3 The Nobel Prize in Chemistry 2015 "for mechanistic studies of DNA repair". Disponível em: [www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/chemistry/laureates/2015/](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2015/) Acesso em 11/04/2016

4 Jmol: an open-source Java viewer for chemical structures in 3D Disponível em: <http://jmol.sourceforge.net/> Acesso em 11/04/2016