

УДК 373.167.1:54

СОЗДАНИЕ 3D-КОНТЕНТА ДЛЯ ДОПОЛНЕННОЙ РЕАЛЬНОСТИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ МОЛЕКУЛЯРНОГО СТРОЕНИЯ ВЕЩЕСТВА

Рахимов Тохир Хакимович

Д.х.н., доцент drtohir@gmail.com

Алимова Нозима Мураджановна

студент магистратуры

Национальный университет Узбекистана имени Мирзо Улугбека

Ташкент, Узбекистан

ANNOTATSIYA

Avogadro dasturi asosida moddalarning 3D modellarini yaratish va yaratilgan modellarni molecularweb dasturiga joylashtirish usuli taklif etiladi. Asosiy g'oya: moddalarning (monomerlarning) 3D modellarni yaratish orqali o'quvchilarning fazoviy tasavvurini shakllantirish va yaratilgan modellar asosida umumiy ma'lumotlar bazasini yaratish.

Tayanch so'zlar: 3D model, ogmental reallik, PISA, Avogadro, MoleculARweb, Protein Data Bank(PdB),

АННОТАЦИЯ

Предложен способ создания 3D-моделей веществ на основе программы Avogadro и размещения созданных моделей в программе molecularweb. Основная идея: формирование пространственного воображения учащихся путем создания 3D-моделей веществ (мономеров) и создание общей базы данных на основе созданных моделей.

Ключевые слова: 3D модель, пигментная реальность, PISA, Avogadro, MoleculARweb, Банк данных белка(PdB)

ABSTRACT

A method for creating 3D models of substances based on the Avogadro program and placing the created models in the molecularweb program is proposed. The main idea is to form the spatial imagination of students by creating 3D models of substances (monomers) and creating a common database based on the created models

Keywords: *3D model, Pigment Reality, PISA, Avogadro, Molecularweb, Protein Data Bank(PdB).*

Одним из важнейших направлений деятельности PISA является развитие естественнонаучной грамотности. В этом ключе несомненным преимуществом представляется единообразных для жителей любых регионов мира подходов в изучении химических наук, в частности, строения вещества и строения молекул.

Создание единой базы данных для молекулярных моделей в целях обучения в школах и некоторых направлениях высшего образования способно не только повысить грамотность в естественных науках, но и освоить навыки компьютерных коммуникаций в международном масштабе и аккумулировать усилия преподавателей и обучающихся различных стран и регионов. Создаваемая база данных молекулярных моделей должна быть общедоступной и бесплатной.

В результате ознакомления с различными подходами к обучению строения молекул, с упором на визуализацию и создание образа у обучаемых, был сделан вывод о наибольшей перспективности применения принципа дополненной реальности ^[1]. Это обусловлено рядом причин, в том числе:

- a) не теряется ментальная связь между преподавателем и обучаемыми, в отличие от VR;
- b) доступность метода, для применения которого достаточно смартфона или планшета, коими обеспечены подавляющее большинство обучаемых;
- c) высокая степень интерактивности;

d) тактильный эффект – удерживая в руках и поворачивая кубик, учащиеся находятся под впечатлением управления реальной моделью молекулы.

Однако имеющиеся в доступных базах модели молекул не покрывают потребности обучения многим разделам химии, в частности, органической химии и химии полимеров. Представляется целесообразным разъяснить преподавателям и студентам простые решения для создания своих собственных моделей. В пределе, возможно создание общей базы данных молекул, с накоплением творчества всех участников по определенным принципам классификации.

Поэтому в данной работе предлагается один из самых доступных способов создания собственных моделей для дополненной реальности. Для создания собственного контента мы воспользовались опцией «Build your own webAR views» на сайте <https://molecularweb.epfl.ch/pages/pdb2ar.html>. В представленной работе модели создавались из расчетных файлов PDB, для чего выбрали соответствующую ссылку (рис. 1).

Для создания соответствующего файла базы данных PDB можно

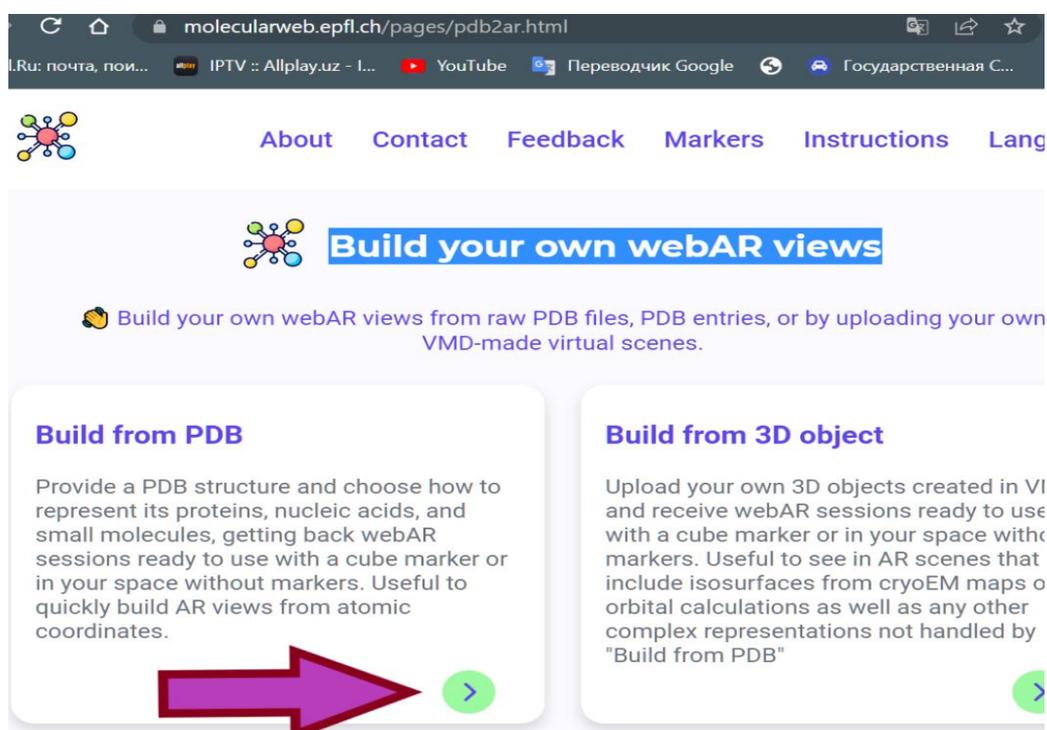


Рис. 1. Выбор опции построения модели из файла в формате международной организации Protein Data Bank

использовать различные программные продукты, в том числе Avogadro,

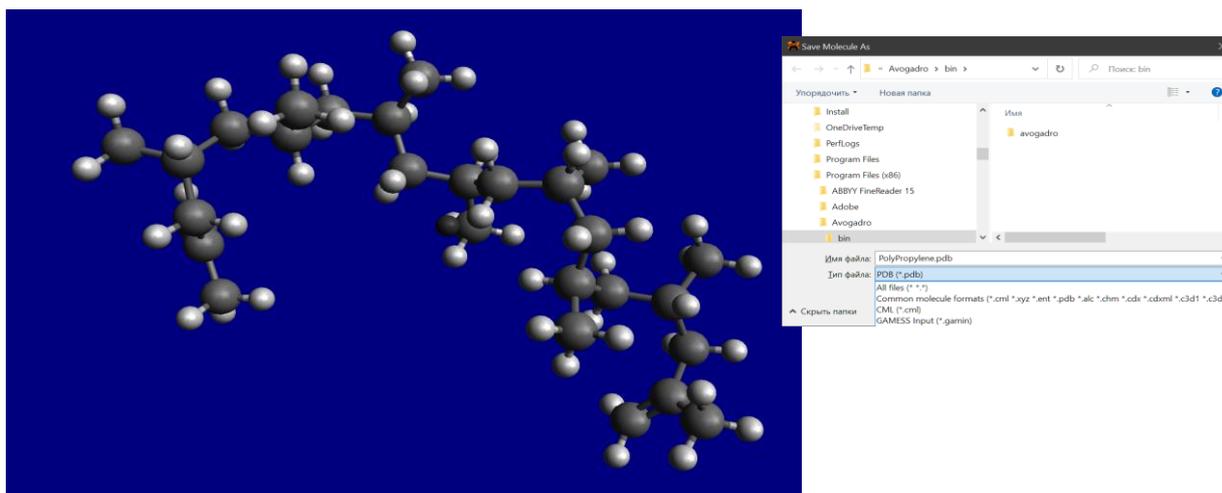


Рис. 2. Построение фрагмента полимерной молекулы с помощью программы Avogadro

Jmol, RasMol, Agile Molecule Abalone, Agile Molecule Ascalaph. Мы использовали хорошо знакомую студентам и преподавателям химии программу Avogadro [2].

Строим в этой программе модель молекулы, в соответствии с учебной программой. Для примера построим фрагмент (олигомер) молекулы полипропилена (рис. 2). Сохраняем файл формате PDB, например, PolyPropylene.pdb.

Затем на сайте выбираем опцию “Upload PDB” (рис. 3). Выбираем “Detect Molecules” и в открывающемся меню выбираем подходящие опции, затем выбираем построение. Даем название проекту.

COMPND	UNNAMED								
AUTHOR	GENERATED BY OPEN BABEL 2.3.90								
HETATM	1 C UNL	1	-7.541	9.332	-0.448	1.00	0.00		C
HETATM	2 C UNL	1	-7.267	7.909	-0.903	1.00	0.00		C
HETATM	3 C UNL	1	-6.708	6.922	-0.184	1.00	0.00		C
HETATM	4 H UNL	1	-6.549	5.936	-0.611	1.00	0.00		H
HETATM	5 H UNL	1	-6.392	7.042	0.840	1.00	0.00		H
HETATM	6 C UNL	1	-7.681	7.639	-2.330	1.00	0.00		C
HETATM	7 H UNL	1	-7.193	8.347	-3.009	1.00	0.00		H
HETATM	8 H UNL	1	-8.765	7.744	-2.435	1.00	0.00		H

Рис. 3. Выбор загружаемого файла базы данных.

После этого высвечивается сообщение, что необходимые данные загружены, и после создания и размещения проекта в общей базе данных соответствующее сообщение будет направлено через электронную почту (Perfect! We have received your data. Your project is being created, once it's done we'll send you an email :). Через небольшое время ожидания на почте можно найти сообщёние, например, такого содержания:

Your AR project is ready!

Molecularweb 

Hi!

Here's the url for your AR project:

<https://molecularweb.epfl.ch/pdb2ar/polypropene>

Here's the url for your project in markerless AR mode:

<https://molecularweb.epfl.ch/pdb2ar/polypropene/index-3d.html>

Here's the url for your project in VR:

<https://molecularweb.epfl.ch/pdb2ar/polypropene/vr>

Here's the 3D model if you want to download it:

<https://molecularweb.epfl.ch/pdb2ar/polypropene/model.zip>

When creating this project you agreed that the AR and VR scenes produced by Molecularweb can be used by its developers for education and promotion of the tool, thanks!

Enjoy!



Рис. 4. Куб для управления дополненной реальностью.

После получения письма проект готов и общедоступен по соответствующей ссылке.

3D-модели молекул мономеров можно создавать с помощью программы MolecuARweb. Приведены последовательности выполнения с использованием программы молекулярный ARweb[3].

Создаются одновременно также данные для виртуальной реальности VR и как трехмерный объект компьютерной графики.

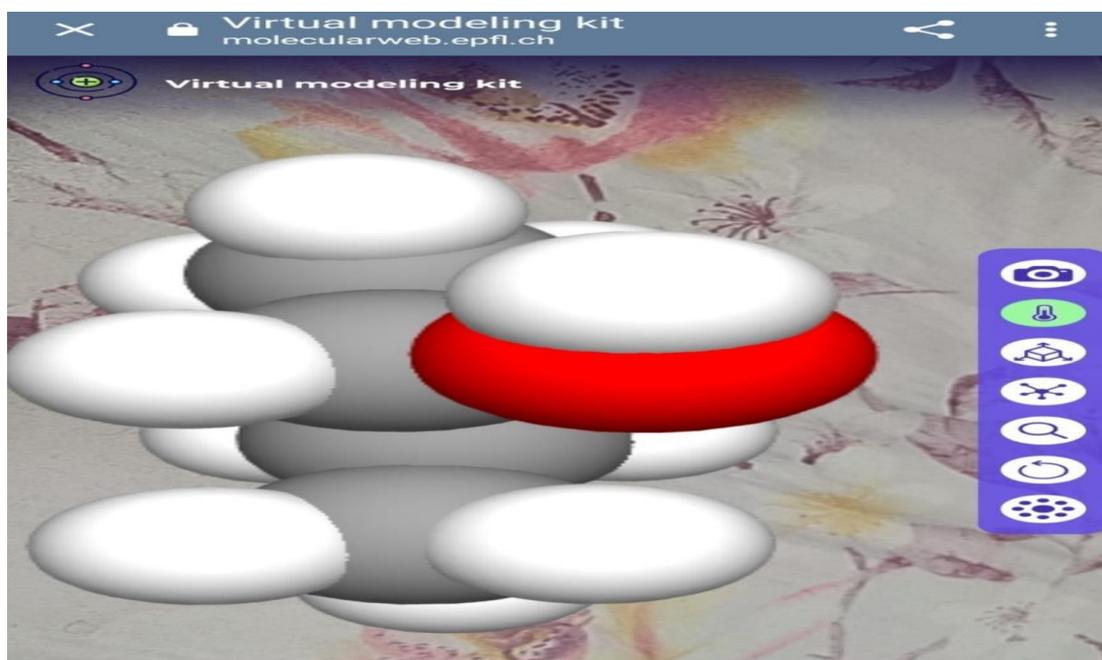


Рис. 5. Пример структуры дополненной реальности.

Таким образом, имеется простая и общедоступная возможность создавать собственные интерактивные молекулярные модели для 3D-дополненной реальности, а также для VR и трехмерной компьютерной графики.

ЛИТЕРАТУРА

1. Рахимов Т.Х. Алимova Н.М. “Создание 3D-контента для дополненной реальности при освоении молекулярного строения вещества” 2022 г.
2. Source Forge. Open Source Software “Avogadro”.
<https://sourceforge.net/projects/avogadro/>.
<https://sourceforge.net/projects/avogadro/>. *The Complete Open-Source and Business Software Platform.*
3. Fabio Cortes Rodriguez, Gianfranco Frattini, Lucien F. Krapp va h.k “MoleculARweb: a website for chemistry and structural biology education through interactive augmented reality out box in commodity devices” 2020. New York 11530, U.S.A