

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ В ОБЛАСТИ ХИМИЧЕСКОЙ ИНЖЕНЕРИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ ВИРТУАЛЬНОЙ РЕАЛЬНОСТИ

Молчанова Г.Д. (Университет ИТМО), Меженин А.В. (Университет ИТМО)

Научный руководитель – к.т.н., доцент Меженин А.В.
(Университет ИТМО)

Введение. Средства 3D-визуализации в настоящее время активно используются в химических исследованиях. Предлагается визуализатор химических веществ, основанный на совмещении данных численного моделирования веществ.

Основная часть. Предлагаемый визуализатор используется в исследованиях цианурата меламина (МСа). Области применения МСа — огнестойкие полимеры и фармакология. Это вещество обладает перспективным свойством самосборки. В будущем оно поможет в создании капсул для адресной доставки лекарств [1]. Самосборка МСа симулируется в расчетах квантовой химии и в симуляциях молекулярной динамики. Эти расчеты описывают структуру, геометрию и параметры атомов и молекул. В результате анализа структур подбирается оптимальный вариант вещества для реализации “in vitro”. Визуальный анализ структуры позволяет выявить ее недостатки, такие как пробелы в цепках и неровные поверхности. Существующие визуализаторы квантовых вычислений — Avogadro, ChemCraft, и молекулярной динамики — VMD, PyMol, Chimera X, визуализируют 2-3 молекулы и расчеты атомов и тысячи молекул без подробностей об атомах соответственно [2].

Предлагается прототип визуализатора химических вычислений на базе ПО Unity. Прототип использует данные квантовых и молекулярно-динамических расчетов. Визуализация представляется в интерактивном 3D-виде с возможностью передвижения камеры, выбора молекул и атомов и анализа их параметров: энтальпии, энтропии, ИК-спектров, пространственных функций распределения и измерения расстояний и углов. Визуализатор разработан для ПК и для VR-гарнитур. Предусмотрена возможность переключения визуальных эффектов, окружения и типов визуализации молекул (stick-and-ball и ЭМО).

Заключение. Визуализация по объединенным данным позволяет ускорить анализ, чтобы получать более правильную структуру. Предлагаемое решение может быть использовано для разработки и анализа любых других химических веществ.

Список использованных источников

1. Imoro N., Shilovskikh V.V., Nesterov P.V., Timralieva A.A., Gets D., Nebalueva A., Lavrentev F.V., Novikov A.S., Kondratyuk N.D., Orekhov N.D., Skorb E.V. Biocompatible pH-Degradable Functional Capsules Based on Melamine Cyanurate Self-Assembly//ACS Omega, 2021, Vol. 6, No. 27, P. 17267-17275.
2. Kozlíková B., Krone M., Falk M., Lindow N., Baaden M., Baum D., Viola I., Parulek J., Hege H.-C. Visualization of Biomolecular Structures: State of the Art Revisited//Computer Graphics Forum, 2017, Vol. 36, Visualization of Biomolecular Structures, No. 8, P. 178-204.