

VRML 在分子对称性教学中的应用

孙宏伟*, 陈兰

南开大学化学学院, 天津 300071

摘要: 以椅式环己烷为例, 介绍了如何应用分子模拟软件制作含有分子对称元素的 VRML 模型的过程。利用 VRML 的交互性可以帮助学生直观地掌握分子的三维结构以及对称元素的分布, 切实提高了分子对称性的教学效果。

关键词: 分子对称性; VRML; 结构化学

中图分类号: G64; O641

Application of VRML in Teaching Molecular Symmetry

SUN Hongwei*, CHEN Lan

College of Chemistry, Nankai University, Tianjin 300071, P. R. China.

Abstract: Using molecular modeling software, the procedures for making VRML models of chair-cyclohexan with symmetry elements have been discussed. The interactivities of VRML can help students to grasp the 3D molecular structures and the distribution of symmetry elements intuitively, and substantially improve the teaching results of molecular symmetry.

Key Words: Molecular symmetry; VRML; Structural chemistry

分子对称性是结构化学课程中重要的部分, 在这个部分中, 学生需要掌握常见分子的 3D 结构、找出对称元素并判断分子的点群, 这无论对学生还是授课教师都是挑战。在南开大学的结构化学教学中, 早期课堂演示用的是实物分子结构模型, 虽直观, 但由于学生人数多, 后排学生无法看清楚, 课堂演示效果差。2002 年后教室安装了多媒体投影, 从那时起, 我们在课堂上尝试了多种分子对称性的演示方法(各种分子对称性的三维显示素材已于 2008 年在结构化学精品课程网站^[1]上发布), 但都存在着课堂应用上的不足, 如 SymApps (ChemWindow 6.0)^[2]软件的优点是可以显示分子对称元素, 但显示效果差; 更新后的 SymApps (KnowItAll^[3])不支持超链接, 使用不便; ViewerLite^[2]的显示效果与交互性好, 亦支持超链接, 但不能显示对称元素; 采用 POV-Ray^[4]制作的分子 3D 动画精美, 可以显示分子的结构和对称元素, 但文件体积大, 且无法实现交互。

VRML(虚拟现实)技术显示分子 3D 结构具有文件体积小(几 kB)、便于网络传输、支持交互和多种平台(除 PC 外, 目前已支持 Apple iOS 和 Android 系统)等优点, 是未来教学发展方向。通过比较各种分子结构表现的技术手段, 我们选用了 VRML 技术制作了近百个带有对称元素的分子结构模型, 基本覆盖了常见的分子点群, 经几年的教学实践检验, 应用效果良好。本文将具体介绍 VRML 分子结构模型的制作和使用。

收稿: 2017-09-08; 录用: 2017-11-08; 网络发表: 2017-11-13

*通讯作者, Email: sunhw@nankai.edu.cn

基金资助: 南开大学教学改革项目

1 VRML 简介

VRML (Virtual Reality Modeling Language) 是一种三维造型设计语言, 其本身自带脚本语言, 且支持 Java 和 Javascript, 其交互性强、动画文件小, 便于网络传输, 1997 年 12 月 VRML 作为国际标准正式发布。现已广泛应用于工程仿真、运动仿真、航空航天、建筑装潢和各种科学实践中。

基于 VRML 的分子结构显示虽早已见报道^[5], 但目前在高校化学教学中的应用仍然比较少, 其根本原因在于 VRML 为脚本语言, 直接人工书写分子结构文件不仅需要相关的脚本语言知识, 还存在数学上的坐标变换等困难。随着 VRML 应用的日益广泛, 支持 VRML 输出的分子 3D 显示软件也不断增加, 我们发现, 巧妙利用分子构造、显示、VRML 输出及编辑等各种软件, 采用统一、简单的流程就能够很容易地制作出分子结构的 VRML 文件。

2 VRML 分子结构模型的制作

结构化学教学中要求使用的分子的结构模型必须满足准确(分子结构正确)和精确(分子中各键长键角准确)的要求, 因此对制作相关模型的结构数据, 可应用量子化学和分子模拟软件(Gaussian, GaussView 和 HyperChem)等进行计算和构建。

2.1 采用 Hyperchem 软件制作初始结构

HyperChem 软件分子构建功能十分强大, 方便大批量构建有机分子, 且该软件嵌入了分子力学、量子化学等多种计算方法, 便于构建合理的分子 3D 结构。以椅式环己烷为例, 只需用 HyperChem 中画图(Draw)命令绘制一个六边形, 直接构建(Add H & Model Build)即可得到椅式环己烷(图 1)。为使构建的结构合理, 可进一步选用其中的半经验量子力学 AM1 方法或分子力学 MM+ 力场进行优化, 优化后结果保存为 MOL 格式(MDL MOL)。

2.2 采用 GaussView 将分子结构转换为标准坐标

HyperChem 构建的分子结构合理, 但其结构数据(直角坐标)不是标准坐标, 添加对称元素非常麻烦, 选用 GaussView 软件中点群对称性(Point Group)的功能可将其调整为标准坐标(重心为原点, 主轴为 z 轴), 调整后结构数据保存为 MOL2 格式(Sybyl mol2)。

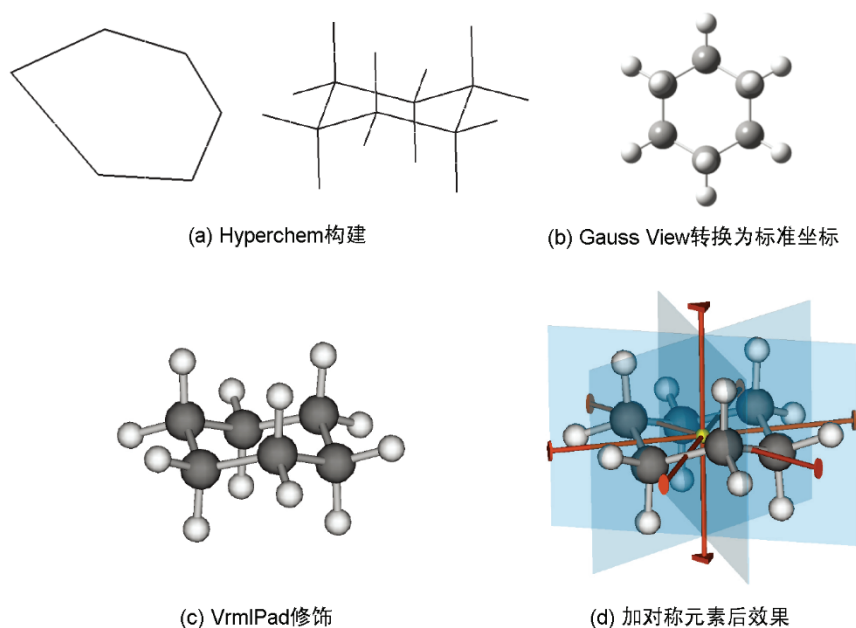


图1 构建步骤中显示效果示意图

电子版为彩图

2.3 采用 VMD 软件将结构数据转化为 VRML 文件

VMD 是一个免费开源的、大生物分子体系的分子显示程序^[6], VMD 支持的分子结构数据格式多, 且支持 VRML-2 格式输出。采用 VMD 可以将 MOL2 格式的结构数据渲染输出为 VRML-2(VRML97)格式, 文件扩展名为.wrl (默认保存在 VMD 的安装目录)。

为绘图方便, VMD 生成的 wrl 文件中用 PROTO 定义了两个原型节点, 一个为绘制键的 VMDCyl, 另一个是设置材质的 VMDMat, 在后续的 3D 分子构建中, 只要给定了键的长度和半径、原子半径、颜色、坐标等数据, 就可以直接构建分子。

```
Transform {  
  translation -0.38484 -0.208481 0.0630272  
  children [ Shape {  
    appearance VMDMat { Kd 0.1625 0.4875 0.4875 Ksx 40 Ks 0.5 0.5 0.5 }  
    geometry Sphere { radius 0.112079 }  
  }]  
}
```

上段脚本为绘制原子(球)的语句, 球位置为-0.38484 -0.208481 0.0630272, 颜色 RGB 为青色(0.1625 0.4875 0.4875, VMD 默认 C 原子的颜色), 半径为 0.112079; 下面一段脚本为绘制键(棍)的, 键长 0.229484, 半径 0.0224157, 颜色为青色(0.1625 0.4875 0.4875), 坐标位置-0.38484 -0.0937393 0.0630272, 旋转中心坐标为 0.0 -0.114742 0.0, 绕轴 0.99396 0 0.109747 旋转-0.283206(弧度), 了解了这些基本信息, 就可以对 VRML 脚本进行简单修改以达到更好的效果。

```
Transform {  
  translation -0.38484 -0.0937393 0.0630272  
  center 0.0 -0.114742 0.0  
  rotation 0.99396 0 0.109747 -0.283206  
  children [ Shape {  
    appearance VMDMat { Kd 0.1625 0.4875 0.4875 Ksx 40 Ks 0.5 0.5 0.5 }  
    geometry VMDCyl { h 0.229484 r 0.0224157 }  
  }]  
}
```

2.4 应用 VrmIPad 软件修饰分子模型

应用 VrmIPad^[7]可以重新调整原子和键的颜色和半径, 取得更好的显示效果。此外, 为保证观看效果, 可以进一步增加以下效果:

- 1) 加导航节点, 使分子不能移动, 只能放缩和围绕分子旋转;

```
NavigationInfo {type "EXAMINE"}
```

- 2) 加视点节点, 设置观察者的位置、视点视角等参数; 使显示分子在屏幕中大小、视角都适宜(为更好地表现分子对称性, 将视角设置较小, 相当于正视);

```
Viewpoint { position 0 0 150.000 fieldOfView 0.05 }
```

- 3) 经 GaussView 将坐标标准化后, 其分子位置为标准坐标(如 D_{3d} 点群分子, C_3 轴方向为 z), 由 VMD 生成的 VRML 文件中, 默认显示为 z 向视图(屏幕为 xy 平面, D_{3d} 分子为俯视图), 如需要改为其它视图, 可用 rotation 语句将分子旋转;

- 4) 可用 scale 调整分子大小, 如 scale 4 4 4 表示将分子放大 4 倍(x, y, z 放大比例相同);

- 5) 将默认的背景 Background { skyColor [0 0 0] } 换成其它颜色, 也可删除在显示时采用默认设置。

2.5 添加相应对称元素

可充分利用 VMD 设计好的 VMDMat 和 VMDCyl 原型, 构建相应的旋转轴和镜面等, 构建后只须简单地用旋转语句即可将其安放在合适的位置。 D_{3d} 分子中需要加 C_3 轴、3 个 C_2 轴、3 个 σ 和对称中心 i 。如下为 C_3 轴脚本:

```
# C3
Group { children [
  Transform { translation 0 0 0 children [ Shape { appearance VMDMat { Kd 1.000000 0.300000 0.0000 Ksx 40.000000 Ks 0.500000 0.500000 0.500000 } geometry VMDCyl { h 5.00 r 0.05000 } } ] }
  Transform { translation 0 -2.5 0 children [ Shape { appearance VMDMat { Kd 1.000000 0.300000 0.0000 Ksx 40.000000 Ks 0.500000 0.500000 0.500000 } geometry Extrusion { crossSection [ 0.000 0.250 -0.2165 -0.125 0.2165 -0.125 0.000 0.250 ] spine [0 0 0 , 0 0.1 0] solid FALSE } } ] }
  Transform { translation 0 2.5 0 children [ Shape { appearance VMDMat { Kd 1.000000 0.300000 0.0000 Ksx 40.000000 Ks 0.500000 0.500000 0.500000 } geometry Extrusion { crossSection [ 0.000 0.250 -0.2165 -0.125 0.2165 -0.125 0.000 0.250 ] spine [0 0 0 , 0 0.1 0] solid FALSE } } ] }
]
```

2.6 压缩文件(该步骤可省略)

VRML 支持压缩的*.wrz 文件, 可用 gzip 软件将纯文本的*.wrl 压缩为*.gz 格式, 再将扩展名更换为*.wrz。最终制作的模型效果见图 2。

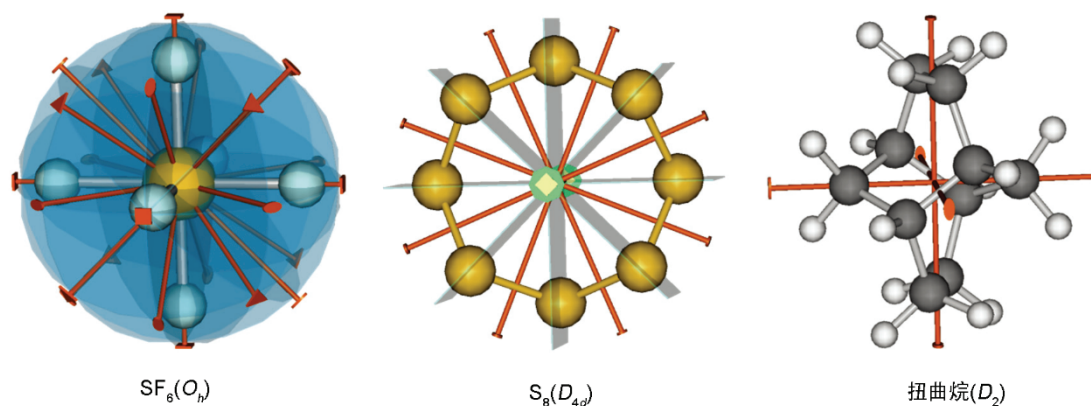


图 2 一些制作的模型效果

电子版为彩图

3 VRML 分子结构模型的使用

VRML 分子结构文件可以通过在计算机上安装 cortona3d-viewer^[8]浏览器插件来观看, 安装后, 鼠标双击 VRML 文件(*.wrl 或*.wrz), 默认选用 IE 或其它浏览器打开即可。显示效果如下: 单击鼠标右键可调整显示背景等, 单击后可调整分子的角度, 可从不同方向查看分子的结构和对称元素的位置, 单击可返回初始状态(图 3)。

如在 PPT 演示中调用 VRML 文件, 最简单的方法是设置链接, 演示时单击链接就可以使用浏览器打开相应的分子结构; 如希望在固定窗口显示, 也可采用嵌入的方法, 但操作比较复杂。

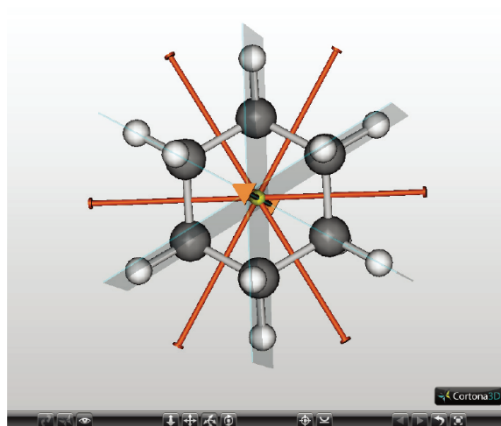


图3 Cortona3d 显示椅式环己烷对称性

电子版为彩图

4 结语

通过比较各种分子结构构建、显示和输出的功能,我们找到了一种方便的构建 VRML 分子模型的方法,并根据教学需求添加了分子的各种对称元素,利用 VRML 的交互性解决了分子对称性的教学问题。目前南开结构化学精品课程网站上提供了上百个不同点群分子的 VRML 模型,既可满足课堂教学需要,又可供学生自主学习。网站上基于 VRML 的虚拟模型实习和实物模型实习的结合,极大提高了分子对称性的教学效果。

参 考 文 献

- [1] [2017-09-01]. 南开大学结构化学精品课程网站. <http://struchem.nankai.edu.cn>.
- [2] 刘平, 张儒祥, 陈远道. 化学通报, **2003**, 66 (9), 636.
- [3] [2017-09-01]. <http://www.bio-rad.com/en-us/product/knowitall-academic-edition-free-chemistry-software>.
- [4] [2017-09-01]. <http://www.povray.org/>.
- [5] 何敏, 陈红明, 周家驹. 化学通报, **1989**, 52 (9), 55.
- [6] [2017-09-01]. <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>.
- [7] [2017-09-01]. <http://www.parallelgraphics.com/products/vrmlpad>.
- [8] [2017-09-01]. <http://www.cortona3d.com/cortona3dviewer>.