CAPÍTULO 3.

Tendencias en los Laboratorios de Realidad Virtual de Química

Adalberto Iriarte Solis
https://orcid.org/0000-0001-5409-0636
María Palmira González Villegas
https://orcid.org/0000-0001-9267-8799
Pablo Velarde Alvarado
https://orcid.org/0000-0002-1211-1061

Resumen

Los laboratorios virtuales se consideran como recursos muy importantes desde hace algunos años. Los laboratorios de realidad virtual de guímica (VRCL, Virtual Reality Chemistry Lab) son especialmente beneficiosos debido a que pueden ser usados en cualquier lugar y cualquier momento para simular experimentos químicos. Estos laboratorios brindan una solución eficiente para problemas cuando el espacio físico no está disponible, el costo de realizar el experimento químico real es alto o el procedimiento de la tarea es muy peligroso de realizar. En este capítulo se reporta el análisis de literatura sobre las ventajas y potenciales del uso de los VRCL en la educación, analizando artículos en revistas científicas durante el periodo 2017-2021 obtenidos en bases de datos digitales de prestigiosas instituciones. Se organizaron en dos categorías: laboratorios basados en software comercial y software libre. Dentro de la categoría de software comercial destacaron Labster y MEL Chemistry, siendo la orientación de sus productos en la parte de enseñanza-aprendizaje para los diferentes niveles educativos. Respecto al software libre se encontró que la mayoría se orienta en el desarrollo de simulaciones avanzadas y en la investigación científica, destacando a Narupa y UnityMol. Los resultados muestran que la tecnología de los laboratorios de realidad virtual fueron bien aceptados por los estudiantes como herramienta de aprendizaje. donde las habilidades y el conocimiento se adquirieron en un entorno totalmente inmersivo. Se concluye que los avances tecnológicos en el tema de la realidad virtual inmersiva tienen un enorme potencial como herramienta de enseñanza de la química, ya sea software comerciales o de código abierto.

Palabras clave: Laboratorio Virtual, Química, Oculus Quest, Realidad Virtual.

Abstract

Virtual laboratories have been considered as very important resources for some years. Virtual Reality Chemistry Labs (VRCL) are especially beneficial because they can be used anywhere and anytime to simulate chemical experiments. These labs provide an efficient solution to problems when physical space is not available, the cost of conducting the actual chemical experiment is high, or the task procedure is very dangerous to perform. This chapter reports the analysis of the literature on the advantages and potential of the use of VRCL in education, analyzing articles in scientific journals during the period 2017-2021 obtained in digital databases of prestigious institutions. They were organized into two categories, laboratories based on commercial software and free software. Within the commercial software category, Labster and MEL Chemistry stood out, guiding their products in the teaching-learning part at the different educational levels. Regarding free software, it was found that the majority are oriented towards the development of advanced simulations and scientific research. highlighting Narupa and UnityMol. The results show that the technology of the virtual reality laboratories was well accepted by the students as a learning tool, where skills and knowledge were acguired in a fully immersive environment. It is concluded that technological advances in the subject of immersive virtual reality have enormous potential as a chemistry teaching tool, whether commercial or open source software.

Key words: Virtual Laboratory, Chemistry, Oculus Quest, Virtual Reality.

Introducción

Desde hace algunos años se han desarrollado enfoques innovadores para la enseñanza utilizando nuevas tecnologías, en las que los laboratorios virtuales se consideran como recursos muy importantes. Los laboratorios de realidad virtual de química (VRCL por sus siglas en inglés) ofrecen entornos generados por computadora, como una sala o un laboratorio real de química, en los que los usua-

rios pueden navegar libremente de una posición a otra, verlo desde diferentes lados, tocar y manipular los productos químicos, los aparatos o la cristalería Agbonifo et al. (2020)

Los VRCL permiten a los usuarios cambiar el flujo de ocurrencias en la simulación de experimentos químicos y, por lo tanto, brindan interacción en tiempo real con químicos e instrumentos virtuales. Son especialmente beneficiosos en la educación a distancia debido a que pueden ser usados en cualquier lugar y cualquier momento para simular experimentos químicos. Los VRCL permiten a los estudiantes explorar desde objetos muy pequeños, grandes o peligrosos a los que no se puede acceder en situaciones normales en el mundo real, y eso les facilita la posibilidad de realizar los experimentos muchas veces sin costes ni accidentes (Jensen, 2004).

Beneficios generales de los laboratorios virtuales de química

El uso de tecnología avanzada con fines docentes y formativos aumenta día a día, y muchos campos, como la cirugía, el montaje aeronáutico, la arquitectura, los negocios, la educación... están utilizando aplicaciones de la tecnología digital para lograr la eficiencia en sus procesos de trabajo. Estas tecnologías son muy útiles para mejorar las habilidades y el aprendizaje independiente. Según Dalgarno et al. (2012), "Las tecnologías en sí mismas no provocan directamente que se produzca el aprendizaje, sino que pueden facilitar ciertas tareas que pueden resultar en aprendizaje". Entre estas tecnologías, en los VRCL que brindan una solución eficiente para problemas donde la alternativa física no está disponible, el costo de realizar el experimento químico real es alto o el procedimiento de la tarea es muy peligroso de realizar.

Los beneficios generales de los VRCL son los siguientes:

- Son seguros, ya que permiten realizar una tarea sin ningún riesgo, por lo que los estudiantes se sentirían más relajados y cómodos en el laboratorio.
- Se puede acceder de forma remota desde cualquier lugar.
- Proporcionan escenarios realistas, como laboratorios u objetos de guímica del mundo real.
- Se pueden utilizar para simplificar problemas complejos, lo que se traduce en ahorros de tiempo y dinero, y se perdería menos tiempo buscando aparatos.

- Proporcionan escenarios innovadores y agradables para simular experimentos guímicos.
- Permiten diferentes modos de aprendizaje en experimentos de química, haciendo que el aprendizaje sea divertido e interesante.
- Capacitan a muchos estudiantes a la vez para que realicen experimentos prácticos de química.
- Almacenan fácilmente los datos de ejecución de tareas de los alumnos, que se pueden utilizar para el análisis del rendimiento y mejoras adicionales.

Metodología

Para este capítulo se analizó la literatura publicada y relacionada con el uso de VRCL en la educación, que incluyeron artículos completos en revistas científicas y memorias de congresos, durante el periodo 2017-2021. Los artículos relevantes se encontraron buscando en las bases de datos digitales de varios foros de investigación, editores y organizaciones, incluidos Google Académico, IEEE, Springer Link, ACM, Wiley Online Library y Elsevier.

También se realizaron búsquedas en otras revistas de renombre, como Journal of Chemical Education Research and Practice. Además, se realizaron búsquedas en revistas relacionadas con la educación, como Journal of Science Education and Technology, Journal of Interactive Learning Research y Computer and Education. Como primera parte, se usó la siguiente combinación de palabras clave: virtual, reality, laboratory y chemistry, chemistry y oculus quest. Como segunda parte, se buscó en las citas de los artículos encontrados que estuvieran en el rango del año 2017 al 2021. Finalmente, se seleccionaron artículos de las fuentes antes mencionadas sobre VRCL en el campo de la educación química que siguen una metodología de investigación explícita y presentan resultados empíricos e ignoramos aquellos artículos que no estuvieran relacionados con la enseñanza de la química. También se ignoraron propuestas teóricas o artículos de opinión. Como resultado, la revisión de la literatura se organizó en las dos categorías siguientes:

- Basados en software comercial.
- Basados en software libre.

Laboratorios virtuales de química basados en software comercial Labster es una empresa danesa que inició siendo una startup de tecnología educativa y ha elaborado una colección de simulaciones de laboratorio para que las utilicen los estudiantes universitarios de ciencias (https://www.labster.com/simulations/). Su fundador y CEO Michael Jensen menciona que ante la pandemia de COVID lograron capacitar e incorporar a dos millones de estudiantes y cientos de maestros en sus laboratorios. Las simulaciones cubren temas que van desde ácidos y bases hasta terapia génica viral, incorporando representaciones realistas de instrumentos. técnicas y reactivos. Las simulaciones utilizan una historia y una misión para mantener a los estudiantes interesados e involucrados. Por ejemplo, en una actividad los estudiantes deben resolver un misterio de asesinato utilizando técnicas químicas forenses v equipos de laboratorio disponibles para ellos dentro de la simulación. Labster desarrolló una versión de realidad virtual (VR) de esta actividad de juego utilizando una interfaz móvil relativamente accesible para crear una experiencia de laboratorio inmersiva, como se muestra en la figura 1 (Stauffer, 2018).

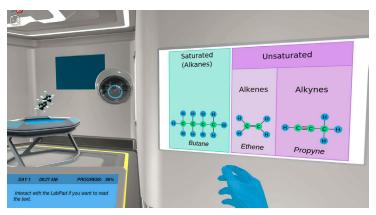


Figura 1. En la imagen se muestra la interacción usando el software Labster. Fuente https://www.youtube.com/watch?v=9fRB9mF1yPc

El equipo de Schell Games ha producido esta experiencia de aprendizaje lúdico de laboratorio para un sistema de realidad virtual totalmente inmersivo (https://www.schellgames.com/games/holo-lab-champions). La historia del juego es la de una estación espacial varada y el jugador debe realizar reacciones químicas específicas correctamente, por ejemplo, la síntesis de una sustancia fluores-

cente, para sobrevivir. Además de hacer que este juego esté disponible para escuelas y universidades, el equipo de Schell Games ha lanzado este juego de química en el mercado de juegos comerciales. Jugar con productos químicos utilizando HoloLAB Champions, es divertido y completamente seguro, asegura su creador Jesse Schell (Winter, 2018).

Por otra parte, Qin et al. (2020) implementaron un piloto de un laboratorio de guímica de realidad virtual en el contexto de una clase de bioquímica de pregrado, teniendo una matrícula de más de 200 estudiantes en ocho sesiones de laboratorio, y tuyo lugar en la Universidad de Harvard en la primavera de 2020. Cada estudiante fue equipado con un visor de realidad virtual Oculus Quest inalámbrico y dos controladores manuales. Con la ayuda del apoyo entre pares, los estudiantes participaron en esta actividad de aprendizaje activo. Se pidió a los estudiantes que completaran una lista de tareas en clase que incluían observar, manipular y construir biomoléculas en un entorno virtual inmersivo, tanto individualmente como en parejas. El objetivo era mejorar el reconocimiento espacial de los estudiantes de las estructuras de proteínas y fomentar la participación en la exploración de moléculas en 3D. Para la integración de este curso, se utilizó Nanome (https://nanome.ai/), que es una plataforma comercial de visualización de proteínas patentada con integración de archivos en formato PDB, compatible con Oculus Quest, cuenta con funcionalidad multiusuario y la función de simulación de dinámica molecular. Dispone de una versión demo descargable, y tres opciones de pago. A diferencia de los videos pregrabados o el contenido narrativo elaborado, el tipo de experiencia de realidad virtual que ofrece Nanome se puede adaptar a los programas de estudios existentes. Al mismo tiempo, Ramírez y Bueno (2020) mencionan que implementaron Nanome como herramienta de aprendizaje para crear moléculas de compuestos químicos utilizando visores Oculus Rift, y como resultado tuvieron una buena aceptación por parte de los estudiantes.

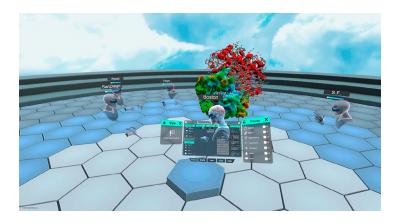


Figura 2. En la imagen se muestra la interacción usando el software nanome. Fuente https://docs.nanome.ai/assets/original/features-page/collaboration.gif

MEL VR Science (https://melscience.com/US-en/vr/) es una empresa inglesa fundada en 2015. Ofrece un servicio de suscripción que entrega de manera mensual experimentos químicos seguros para niños. Permite experimentar un nuevo nivel de comprensión de la ciencia en realidad virtual o 3D, con más de 70 lecciones y pruebas de realidad virtual que cubren los planes de estudios de física y química de la escuela (Dai et al., 2020).



Figura 3. Lección de MEL Chemistry sobre átomos en sólidos. Fuente https://www.youtube.com/watch?v=hhutq27TTfc

Laboratorios virtuales de química basados en software libre

vLUME (https://github.com/lumevr/vLume/releases) es un paquete de software de realidad virtual diseñado para generar grandes coniuntos de datos de microscopía de localización tridimensionales de una sola molécula. Las funciones de vLUME incluyen visualización, segmentación, análisis personalizado de geometrías locales complejas y funciones de exportación. vLUME puede realizar análisis complejos en muestras biológicas tridimensionales reales que de otro modo serían imposibles mediante el uso de programas requlares de visualización de pantalla plana. La microscopía de súper resolución basada en la localización tridimensional de una sola molécula (3D-SMLM) está ahora bien establecida, y su adopción generalizada ha llevado al desarrollo de más de 36 paquetes de software dedicados a la evaluación cuantitativa de la detección espacial v temporal de fotoconmutación de fluoróforos. Si bien el énfasis inicial en el campo 3D-SMLM ha estado claramente en mejorar la resolución y la calidad de los datos, ahora hay una marcada ausencia de enfogues de visualización 3D que permitan la exploración directa y de alta fidelidad de este tipo de datos (Spark et al., 2020).

Por otra parte, Dai et al. (2020) mencionan que utilizaron el software libre llamado UnityMol (http://www.baaden.ibpc.fr/umol/) y el programa ChimeraX (https://www.cgl.ucsf.edu/chimerax/docs/ user/vr.html) como herramientas de visualización de datos, para realizar una sesión de VR en una clase de química inorgánica avanzada, una clase disponible para estudiantes de pregrado junior y senior en la Universidad de California, Los Ángeles. La sesión de realidad virtual ayudó a los estudiantes a aprender aspectos complicados de la química de coordinación de metales y los orbitales moleculares a través de una experiencia tridimensional inmersiva. Los archivos compatibles con VR se generaron previamente de forma computacional. La estructura de la hemoglobina se descargó de un artículo publicado, y la estructura cristalina. El orbital molecular que observaron los estudiantes fue el orbital molecular desocupado más bajo. UnityMol resultó ser una gran plataforma de realidad virtual para enseñar orbitales moleculares, porque ofrece una experiencia de inmersión mejorada, donde todo se puede hacer sin quitarse los auriculares. Sin embargo, el tiempo ideal para cada sesión de UnityMol VR debe ser de al menos 30 minutos, ya que los alumnos necesitan tiempo para acostumbrarse a la interfaz. Por otro lado, ChimeraX es adecuado para sesiones rápidas de realidad virtual, en las que el asistente de enseñanza escribe los comandos y los estudiantes solo se enfocan en los orbitales moleculares, por lo tanto, cada sesión pudo ser más corta.





Estudiantes usando la herramienta UnityMol con apoyo en la configuración del sistema.

Fuente https://dx.doi.org/10.1021/acs.jchemed.0c00469

Como primer caso de aplicación de la tecnología de realidad virtual en química inorgánica, la clase de química inorgánica avanzada proporcionó a cada estudiante una sesión de visualización de realidad virtual de 30 minutos. Los estudiantes pasaron por la estructura 3D de la hemoglobina y los orbitales moleculares de (salfen)Zr(Oi-Pr)2. Todos los estudiantes dieron comentarios positivos, lo que les aseguro que este método de enseñanza es valioso. Sobre la base de los comentarios de los estudiantes y las observaciones del asistente de enseñanza, se dieron cuenta de que sería mejor actualizar la plataforma de software de realidad virtual.

Dinámica molecular interactiva con Realidad Virtual

A medida que los científicos cuentan con tecnologías con capacidad para diseñar estructuras moleculares a nanoescala, se encuentran con desafíos para diseñar la dinámica molecular (MD) y la flexibilidad. A diferencia de la dinámica que conocemos de manera normal, la dinámica molecular implica una alta correlación entre cuerpos, que a menudo no es intuitiva, incluso para investigadores altamente capacitados. Por esto, la dinámica molecular interactiva en realidad virtual (iMD-VR) permite a los investigadores manipular simulaciones de MD en tiempo real usando estructuras flexibles en 3D. Tecnologías como iMD-VR permiten transformar abstracciones matemáticas intangibles como los campos de fuerza molecular en realidades más tangibles, que en consecuencia involucran una gama más amplia de nuestras modalidades sensoriales. Al hacerlo, podemos hacer que problemas complicados sean más accesibles a un espectro más amplio de inteligencias, quizás facilitando soluciones creativas que hasta ahora han sido inaccesibles (O'Connor et al., 2018).

Bajo este contexto, O'Connor et al. (2019) presentaron un software de iMD-VR llamado "Narupa" (https://narupa.readthedocs.io/)

que permite a grupos de investigadores cohabitar simultáneamente en entornos de simulación en tiempo real con estructuras moleculares a un nivel atómico de precisión. Este programa es de código abierto (GPL v3.0) y permite que dos participantes manipulen la simulación en tiempo real de moléculas del tipo C60 por medio de los controles inalámbricos (https://irl.itch.io/narupaxr). El nombre "Narupa" combina el prefijo "nano" y el sufijo "ar upa" (una palabra sánscrita que describe objetos no físicos y no materiales), que representa el intento de interactuar con objetos simulados a nanoescala con realidad virtual, como se muestra en la figura 5. Narupa contiene empaquetados una serie de seis ejemplos estables, que los participantes pueden inspeccionar para guiarlos en la configuración de sus propias simulaciones interactivas.

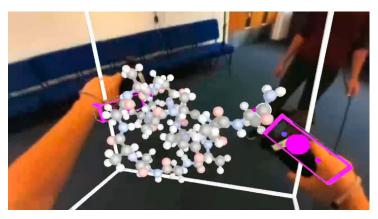


Figura 5. En la imagen se muestra la interacción de un Péptido 17-ALA atado en un nudo usando el software Narupa. Fuente https://vimeo.com/244670465

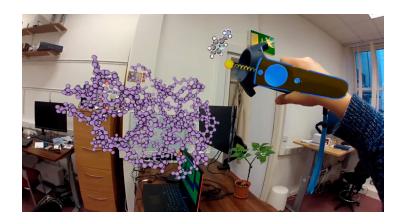


Figura 6. En la imagen se muestra la dinámica molecular interactiva en tiempo real de la unión de una molécula de benzamidina con tripsina. Fuente https://vimeo.com/274862765

Se propone que en futuros trabajos sea posible entrenar modelos mediante aprendizaje automático (machine learning), para que sean más rápidos que los métodos de la mecánica cuántica y que reproduzcan superficies de energía de la mecánica cuántica, lo que, incluso, permite la simulación interactiva de sistemas más grandes, con el fin de construir conjuntos de datos para entrenar máquinas para que aprendan funciones energéticas potenciales.

Ferrell et al. (2019) también señalan que emplearon el software Narupa en un curso de introducción a la química orgánica de primer semestre con 70 estudiantes de la Universidad de Vermont (UVM), y se les solicitó que completaran una tarea de ejemplo para extraer una molécula de metano a través de un nanotubo de carbono. Como resultado de la actividad encontraron un impacto motivacional en los estudiantes, ganancia en los aprendizajes medibles y una retroalimentación muy positiva.

Otra herramienta bastante interesante es ProteinVr (https://durantlab.pitt.edu/protein-vr/), mencionada por Cassidy et al. (2020). Es una aplicación basada en Web que funciona en varias configuraciones y sistemas operativos de realidad virtual. Desarrollado por el Laboratorio Durrant de la Universidad de Pittsburgh, bajo la licencia BSD-3-Clause de código abierto. Es compatible con varios cascos de realidad virtual de gama baja y alta; y cuando la realidad virtual no está disponible, aprovecha los sensores de orientación de los dispositivos móviles o la navegación con teclado al estilo de un videojuego para brindar a los usuarios una experiencia lo más atractiva e

inmersiva posible. Al abrirla por primera vez, la aplicación muestra la molécula predeterminada NanoKid, como se muestra en la Figura 9. Después de unos segundos, aparece un formulario emergente simple en el que los usuarios pueden ingresar el ID de PDB o la URL del modelo molecular que desean visualizar. El mismo formulario también permite a los usuarios indicar el entorno 3D en el cual colocar el modelo molecular. Después de hacer clic en el botón "Cargar molécula", NanoKid se reemplaza con la estructura molecular deseada. Para adaptarse a una amplia gama de dispositivos, Protein-VR se ejecuta en cuatro modos: modo VR, modo de orientación del dispositivo, modo de escritorio y modo líder. En los cuatro, utiliza una navegación al estilo de los videojuegos. Los objetos residen en posiciones fijas en un entorno 3D y la cámara se mueve o se teletransporta a diferentes lugares de la escena.

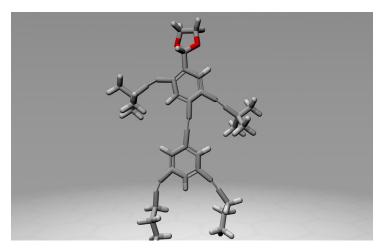


Figura 7. En la imagen se muestra la molécula predeterminada NanoKid, generada al inicio de la aplicación ProteinVR. Fuente propia.

ProteinVR es único entre los programas de visualización molecular basados en realidad virtual, ya que está completamente basado en la web. Esta característica la hace una herramienta útil tanto para la comunidad investigadora como para la educativa. Permite a los investigadores examinar mejor las estructuras moleculares y compartir visualizaciones moleculares de forma colaborativa a través de URL públicas. También permite a los educadores y coordinadores de programas compartir fácilmente escenas en 3D instructivas con los estudiantes y el público en general, como se muestra en la Figura 8.

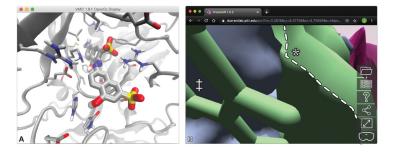


Figura 8. Dos ejemplos que muestran las ventajas de utilizar ProteinVR. Fuente https://journals.plos.org/ploscompbiol/article?id=10.1371/journal.pcbi.1007747

Conclusiones

Como se demostró, las actividades de laboratorio juegan un papel vital en la mejora del aprendizaje de los estudiantes, por lo que varios investigadores han desarrollado proyectos de laboratorios de realidad virtual en los últimos años. Desde una perspectiva de investigación, una pregunta clave para las ciencias moleculares implica comprender aquellas áreas particulares en las que las posibilidades de los nuevos entornos de realidad virtual permiten una visión más profunda, una mejor sensación para el diseño y la ingeniería a nanoescala, de manera más efectiva. comunicación y colaboración científicas, y progreso acelerado de la investigación en la comprensión de conceptos y sistemas moleculares importantes.

Sin embargo, existen varios problemas y limitaciones principales, incluidos los mareos y la orientación, las instrucciones solo únicamente en el idioma nativo, principalmente en inglés, y la poca carga cognitiva de los usuarios. Además, la mayoría de las instituciones educativas carecen de instalaciones de laboratorio debido a los problemas financieros y a la falta de equipo disponible.

Referencias

- Agbonifo, O. C., Sarumi, O. A., & Akinola, Y. M. (2020). A chemistry laboratory platform enhanced with virtual reality for students' adaptive learning. Research in Learning Technology, 28.
- Cassidy, K. C., Šefčík, J., Raghav, Y., Chang, A., & Durrant, J. D. (2020). ProteinVR: Web-based molecular visualization in virtual reality. *PLoS computational biology*, *16*(3), e1007747.
- Dai, R., Laureanti, J. A., Kopelevich, M., & Diaconescu, P. L. (2020). Developing a virtual reality approach toward a better understanding of coordination chemistry and molecular orbitals. *Journal of Chemical Education*, *97*(10), 3647-3651.
- Dalgarno, B., Bishop, A. G., & Bedgood Jr, D. R. (2012). The potential of virtual laboratories for distance education science teaching: reflections from the development and evaluation of a virtual chemistry laboratory. En Proceedings of The Australian Conference on Science and Mathematics Education (9).
- Ferrell, J. B., Campbell, J. P., McCarthy, D. R., McKay, K. T., Hensinger, M., Srinivasan, R., Zhao, X., Wurthmann, A & Schneebeli, S. T. (2019). Chemical exploration with virtual reality in organic teaching laboratories. *Journal of Chemical Education*, 96(9), 1961-1966.
- Jensen, N.; Seipel, S.; Voigt, G.; Raasch, S.; Olbrich, S.; Nejdl, W. (2004). Development of a Virtual Laboratory System for Science Education and the Study of Collaborative Action. *EdMedia* + *Innovate Learning*, Association for the Advancement of Computing in Education (AACE): Waynesville, NC; pp 2148–2153.
- O'Connor, M., Deeks, H. M., Dawn, E., Metatla, O., Roudaut, A., Sutton, M., Thomas, L.M., Glowacki, B.C., Sage, R., Tew, P, & Glowacki, D. R. (2018). Sampling molecular conformations and dynamics in a multiuser virtual reality framework. *Science advances*, 4(6), eaat2731.
- O'Connor, M. B., Bennie, S. J., Deeks, H. M., Jamieson-Binnie, A., Jones, A. J., Shannon, R. J., Walters, R., Mulholland, A. & Glowacki, D. R. (2019). Interactive molecular dynamics in virtual reality from quantum chemistry to drug binding: An open-source multi-person framework. The Journal of chemical physics, 150(22), 220901.
- Qin, T., Cook, M., & Courtney, M. (2020). Exploring Chemistry with Wireless, PC-Less Portable Virtual Reality Laboratories. *Journal of Chemical Education*, 98(2), 521-529.
- Ramírez, J. Á., & Bueno, A. M. V. (2020). Learning organic chemistry with virtual reality. En 2020 IEEE International Conference on Engineering Veracruz (ICEV), 1-4.

- Spark, A., Kitching, A., Esteban-Ferrer, D., Handa, A., Carr, A. R., Needham, L. M., ... & Lee, S. F. (2020). v LUME: 3D virtual reality for single-molecule localization microscopy. *Nature Methods*, *17*(11), 1097-1099.
- Stauffer, S., Gardner, A., Ungu, D. A. K., López-Córdoba, A., & Heim, M. (2018). Labster Virtual Lab Experiments: Basic Biology. Springer.
- Winter, J. (2018). Playing with chemistry. *Nature Reviews Chemistry*, 2(5), 4-5.