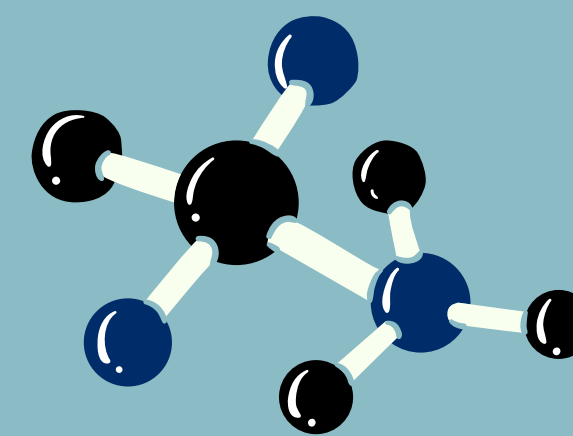


ELABORACIÓN DE SOFTWARE PARA LA VISUALIZACIÓN DE MOLÉCULAS EN TECNOLOGÍA DE *REALIDAD MIXTA*

Autor: Oliver Drogi Tello | Oliver249@hotmail.com
Asesor: Dr. Ángel David Reyes Figueroa | CIMAT, MTY



Planteamiento del problema

- En México el 80% de los jóvenes no están interesados en estudiar en un área afín a la ciencia (Hernández, 2018).
- Solo el 7% de los egresados de educación superior opta por una carrera del tipo STEM (Hernández, 2018).
- Existe falta de compromiso y de recursos adecuados para enseñar dinámica molecular, lo cual genera frustración e incompreensión (Tan & Waugh, 2013).

OBJETIVOS



- Brindar una herramienta tecnológica que pueda apoyar en la comprensión y adquisición de conocimiento de disciplinas afines a la biología y la química.
- Desarrollar un software que sea capaz de mostrar resultados de Simulaciones de Dinámica Molecular en un entorno tridimensional además de contar con la capacidad de interactuar con el sistema.

Marco teórico

La capacidad de poder visualizar tridimensionalmente la estructura de moléculas como proteínas y ácidos nucleicos ha producido muchos estudios exitosos en áreas como la bioquímica (Gelpi, Hospital & Orozco, 2015).

La dinámica molecular es una técnica de simulación computacional, la cual es capaz de ‘capturar’ la esencia del comportamiento de biomoléculas (Hollingsworth & Dror, 2019). Esta herramienta se utiliza para estudiar diversos sistemas biomoleculares.

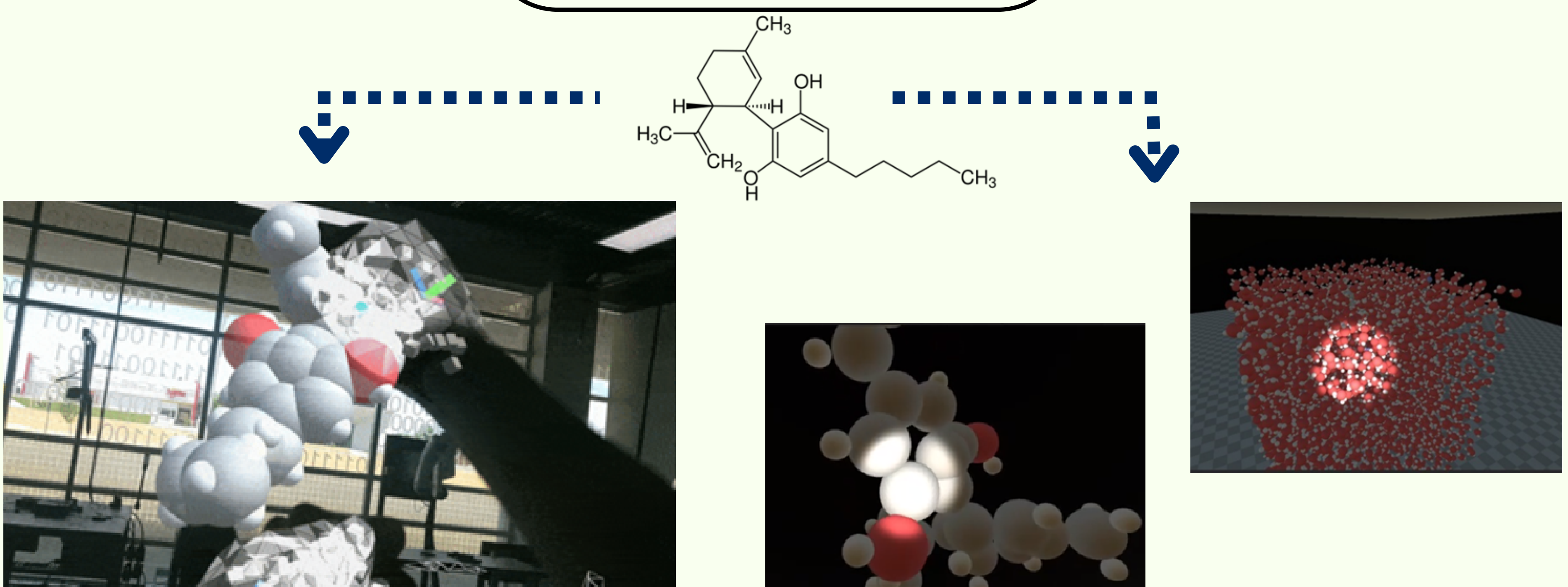
Es considerado que la animación es una parte importante del proceso de visualización, ya que es particularmente útil para mostrar el comportamiento de procesos dinámicas (Brůža, 2019).

METODOLOGÍA

- Contar con la información de un sistema biomolecular (archivos específicos como .gro o .pdb).
- Exportar el archivo a Blender para trabajar desde ahí para luego exportar hacia Unity.
- Instalar y configurar Mixed Reality Feature Tool.
- Programar cuestiones relacionadas con la representación del sistema.
- Programar cuestiones básicas (movimiento de cámara, movimiento de personaje, etc.).
- Programar cuestiones más técnicas (una lámpara, menú de opciones).



RESULTADOS



CONCLUSIONES

- Proyecto aplicable en el ámbito educativo y de investigación.
- El proyecto apenas esta iniciando.
- Existen diversas ideas para el futuro tales como mostrar animaciones, implementar sistemas más complejos, desplegar sistemas elegidos por el usuario, etc.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Brůža, V. (2019). Video Recording of Molecular Structures in Virtual Reality [Tesis de maestría, Masaryk University Faculty of Informatics]. Recuperado de https://is.muni.cz/th/p3sgv/Master_Thesis___Bruza_final.pdf
- Gelpi, J., Hospital, A., Goñi, R., & Orozco, M. (2015). Molecular dynamics simulations: advances and applications. *Advances and Applications in Bioinformatics and Chemistry*, 37. doi:10.2147/aabc.s70333
- Hernández, L. (septiembre 2018). Falta de estudiantes de Ciencias y Tecnología en México preocupa a empleadores. Recuperado de <https://www.elfinanciero.com.mx/economia/falta-de-estudiantes-de-ciencias-y-tecnologia-en-mexico-preocupa-a-empleadores/>
- Hollingsworth, S. A., & Dror, R. O. (2018). Molecular Dynamics Simulation for All. *Neuron*, 99(6), 1129–1143. doi:10.1016/j.neuron.2018.08.011
- Tan, S., & Waugh, R. (2013). Use of Virtual-Reality in Teaching and Learning Molecular Biology. *3D Immersive and Interactive Learning*, 17–43. doi:10.1007/978-981-4021-90-6_2