

信息技术与化学 使用 Acrobat3D 与 VMD 制作三维化学课件

卢 天

(北京师范大学化学学院 北京 100875)

摘要 结合使用 Acrobat3D 与 VMD, 可以方便地制作内嵌三维立体分子的 pdf/ ppt 课件, 这种方法突破了常规课件制作在二维平面上的限制。教师可以在课堂上对分子进行实时操作和演示, 使讲授的内容更加生动、直观。

关键词 Acrobat3D VMD 三维课件

随着多媒体技术的应用, 视频、flash 动画、交互式元素等内容逐渐引入课件的制作, 使课件内容与形式变得愈加丰富, 但是长久以来并未突破二维平面的限制, 难以引入三维对象以立体的形式描述分子、晶体。Acrobat3D 与 VMD 结合使用将解决这一难题, 可以方便地创建 pdf 与 ppt 课件, 在其中嵌入立体分子结构, 能够实时进行旋转、平移、视角切换等操作, 获得更好的授课效果。

Acrobat3D 是由 Adobe 公司开发的 Acrobat 系列软件中功能最完全的版本, 在 Acrobat Professional 基础上增加了 3D 对象导入等功能。VMD 由伊利诺斯大学 champaign 分校开发, 是一款使用广泛的分子动力学、蛋白质的可视化软件, 在其最新版本 1.8.6 中, 开始正式支持 Acrobat3D 的导入功能。VMD 可以在其官方网站 <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd> 免费下载。

1 软件的设置

在安装 Acrobat3D 过程中, 为了使用 3D 对象导入功能, 注意必须选择安装其中的 Import CAD files 与 Capture CAD model 组件。安装完毕后打开 Acrobat3D 与 VMD, 在 Create PDF 中选择 From 3D Capture, 出现 3D Capture 对话框, 同时提示找到 winvmd (即 VMD) 程序, 选择 yes, 这样 VMD 就被加入 Acrobat3D 支持模型导入的应用程序列表中。点 cancel 关闭 3D Capture 对话框。进入 Edit—Preference—3D Capture, 在其中修改对 winvmd 中的模型导入方式的设置, 如图 1 所示。

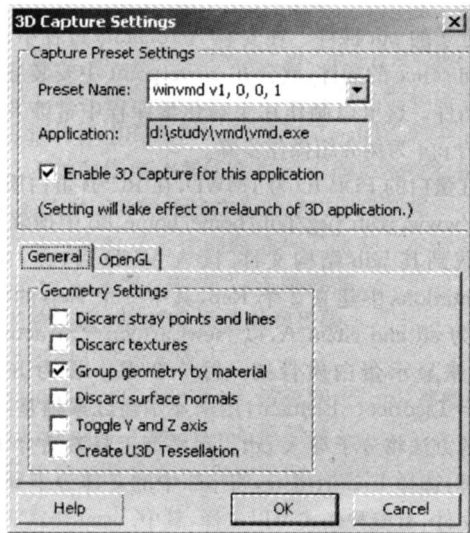


图 1 模型导入方式的设置

在 General 标签中打开 Group geometry by material 选

项, 关闭此标签下其他选项。在 OpenGL 标签中将 Frame Buffer Mode 选为 Clear Event, View Transform Mode 选为 First Matrix, Capture Units 选为 Unknown。点击 OK 并退出 Acrobat3D 与 VMD。

2 导入分子模型

重新启动 Acrobat3D 与 VMD, 此时 3D 模型导入功能已经可以使用了。在 VMD 中建议将 Display 中 Axes 设为 off, 否则左下角的坐标轴也会被作为 3D 模型与分子一并导入。将 Rendering Mode 设为 Acrobat3D, 可以使 VMD 更好地兼容 Acrobat3D。

在 VMD 中打开一个分子结构文件, 之后点击键盘上 Print Screen 键, 稍等片刻 Acrobat3D 会出现 Acrobat 3D Conversion 对话框。在 General 标签下可以设置背景颜色、光源等属性。建议将其中 Default Lighting 设为 CAD optimized lights, 可以使导入后的分子模型更明亮更有光泽。Preview Image 可以设置在 pdf 中尚未激活嵌入的三维分子模型时, 用作预览所显示的图片。Import 标签中 3D Format in PDF 选择 PRC B—rep(solid)。如果将 Optimize 标签中的 Compress B—rep to 选项开启, 可以使导入三维分子模型后的 pdf 文件明显减小, 建议设为 0.1mm。用 NewCartoon、Licorice 等显示方式不会因此使导入后的模型产生问题, 但如果用球棍模型显示则应关闭此选项, 否则会导致原子与化学键连接处分离。

点击 OK, 处理过程结束后, 在 Acrobat3D 中就可以看到已经导入的分子 3D 模型。现在可以通过鼠标对导入后的三维分子模型进行旋转、缩放等操作。在 3D 模型上方有视图工具条, 可以设置光源、渲染方式, 还可以测量距离、显示分子切面图。

直接保存文件即可生成带有内嵌三维分子模型的 pdf 文件, 这样直接生成的 pdf 文件本身只包含一个分子结构而没有其他内容。将立体分子嵌入 pdf 中指定位置的方法是: 打开已编辑好的 pdf 课件, 选择 Acrobat3D 中的 3D Tool 按钮 (Tools—Advanced Editing—3D Tool), 在课件相应位置中画一个矩形, 自动弹出窗口, 点 Capture 按钮, 然后激活 VMD 点击 print screen 导入分子即可, 设置同上, 导入后点手形工具就可以对立体的分子模型进行操作了。

3 设置视角与注释

在 Acrobat3D 中可以对导入的分子添加注释并预设视角, 还可以创建视角按钮以便在不同视角间快速切换, 使各部位特征一目了然。这里以制作一个介绍碳纳米管的材料化学课件为例介绍操作方法。

在导入分子前需要获得分子的结构文件, 分子结构文件可以通过 Chem3D 等软件自行构建, 也可以通过在互联网上各种结构数据库中下载等方式得到。在此例中需要碳纳米管的三维结构文件, 可以由 <http://turin.nss.udel.edu/research/tubegenonline.html> 网站在线程序 TubeGen 来生成。进入页面后, 填入碳纳米管的参数, (n, m) 设为 $(5, 5)$, (i, j, k) 设为 $(1, 1, 5)$, Format 选 PDB, 其他保持默认, 点击 Generate 得到结构信息, 将其中由 HEADER 字段到 END 字段的内容全部复制到文本编辑器中, 存为 nanotube.pdb, 这样便得到了 $(5, 5)$ 碳纳米管结构文件。

在 VMD 中载入 nanotube.pdb, 将分子的 colorID 设为 8 (白色), Drawing Method 设为 CPK, Material 设为 Metallic-Paste。通过前述方法将之导入到已编辑好的 pdf 课件适当位置, 默认背景设为白色。激活导入后的分子, 在工具栏中点 Toggle Model Tree 按钮, 出现视角列表。旋转分子使分子侧面正对屏幕, 点 Create View 创建 New View 1 视角。再

次旋转分子使分子轴向正对屏幕, 创建视角 NewView 2。另外如果在分子的某些部位需要加以说明的话, 可以选主菜单中 Tools—Comment & Markup—Callout Tool 在分子结构上添加注释后创建视角, 这样切换回此视角后注释也会在相应位置显示出来。

使用 Acrobat3D 的 Button Tool 工具, 在课件空白处拖出矩形按钮, Option—Icon and Label 中 Label 输入“横向”作为按钮显示的名字, Action 中的 select Action 选择 Go to a 3D View, 点 Add Named View 选 NewView 1。同样方法制作另外一个按钮名为“轴向”用于切换到视角 New View 2。重复上述步骤创建并导入参数为 $(n, m) = (8, 0)$, $(i, j, k) = (1, 1, 6)$ 的碳纳米管分子于适当位置, 制作完成后如图 2 所示。在课堂上可以通过鼠标实时操纵这 2 个立体碳纳米管, 还可以通过“横向”、“轴向”按钮使 2 个碳纳米管迅速切换到相同朝向, 便于在不同视角下对比 2 种碳纳米管的结构差异, 介绍对称性等性质。

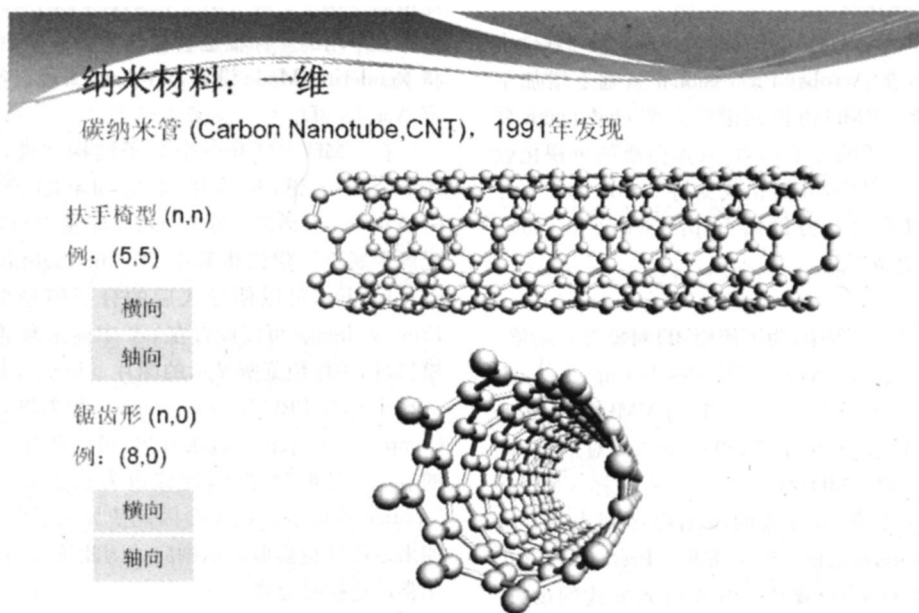


图 2 纳米材料 pdf 课件

用 Acrobat3D 从可视化软件中导入三维分子用于制作课件及相关文档非常方便, 但是目前一部分分子可视化软件对 Acrobat3D 支持尚有不足, 比如 GaussView、Chem3D 等, 若用球棍模型, 使用同样的方法导入分子至 pdf 后, 化学键不能正常与原子连接。这个问题可以借助 VMD 来解决。例如在 GaussView 中显示的分子, 保存为 VMD 可以识别的格式, 如 mol2 格式, 再用 VMD 打开, 就可以正常导入到 pdf 中了。

VMD 在其官方网站中提供了通过 Acrobat3D 制作的“Water and Ice” Scientific Case Study 的 pdf 文档^[1], 文中包含了可以用鼠标操作的三维冰的结构(图 3), 使冰的结构一目了然, 很好地体现了在课件、文档中引入分子立体结构的意义。用上述方法制作的 pdf 使用 Acrobat 系列 7.0.7 及以下的版本打开就可以正常激活其中三维对象, 也包括已被广泛使用的免费阅读器 Adobe Reader 系列。

4 制作三维分子 ppt 课件

结合使用 Acrobat3D 与 VMD 同样可以方便地制作含

有三维分子的 ppt 课件。在安装 Acrobat3D 过程中, 只要选择了面向 office 的插件, 就会在 powerpoint 中安装导入三维模型的插件。这里以制作在生物化学课程中常涉及到的肌红蛋白的 ppt 为例介绍操作步骤。

肌红蛋白的 PDB ID 为 1MWD, 在 RCSB 蛋白质数据库 <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do> 中搜索 1MWD 即可下载到其 pdb 结构文件, 读入 VMD 后, 在 Graphical Representations 中建立 2 个 Rep, 其中一个 Rep 的 selected atom 设为 all and chain A, 以 NewCartoon—Structure 方式显示, 用来显示蛋白质骨架。另一个 Rep 设为 heme and chain A—Licorice—Element, 用来显示血红素辅基, 然后按照前述的方法将分子导入 pdf。用手型工具激活分子模型, 点击右键, 选择 Export data, 将 pdf 中的立体分子导出到三维格式文件, 有多种格式可以选择, 其中.vrml 格式文件尺寸较小, 建议使用。

(下转第 72 页)

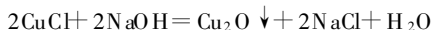
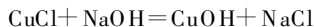
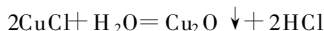
液时,在Cu阳极上生成的白色CuI,既有Cu阳极电极氧化生成的CuI,也有I₂与Cu阳极的化学氧化生成的CuI。

在整个电解KI溶液的过程中,溶液不见有蓝绿色沉淀物生成。尽管电解池内石墨阴极上发生了还原反应($2\text{H}^+ + 2\text{e}^- \rightarrow \text{H}_2 \uparrow$),阴极区溶液呈碱性,也不见有蓝绿色Cu(OH)₂沉淀生成,证明 $\text{Cu}^+ + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Cu}^{2+}$ 的反应不曾在这里发生,即Cu²⁺不存在于电解过程的电解质溶液中。

再以Fe作阳极电解KI溶液为例。Fe的电子层结构是3d⁶4s²。Fe阳极发生的反应是 $\text{Fe} - 2\text{e}^- \rightarrow \text{Fe}^{2+}$,Fe以Fe²⁺的形式进入溶液。随着电解过程的进行,Fe²⁺与石墨阴极区扩散来的OH⁻相遇,生成灰绿色的Fe(OH)₂沉淀。

实验表明,用Cu、Fe等变价金属作电解池阳极电解某种电解质溶液,电极材料(Cu、Fe)本身是以氧化成低氧化态为主。

情况当然也不尽然。实验③的情况很值得实验者注意。电解中性的饱和食盐水^[2],Cu阳极氧化生成的Cu⁺生成CuCl。随着电解过程的进行,溶液的碱性逐渐增强,CuCl的水解迅速发生:



于是出现大量桔黄色CuOH和Cu₂O沉淀。

当电解NaCl的稀溶液时,Cu电极氧化成的Cu⁺,很快会被阳极生成的Cl₂氧化成Cu²⁺,同时阳极生成的Cl₂也会氧化Cu阳极本身生成Cu²⁺。所以用Cu作阳极电解NaCl的稀溶液时,随着电解过程的进行,Cu阳极因电极氧化生成的Cu⁺和化学氧化生成的Cu²⁺,都会与阴极的碱性溶液一起,生成CuOH(Cu₂O)和Cu(OH)₂的混合物而使沉淀显黄绿色。

3 几点认识

(上接第58页)

在powerpoint的工具栏中点击Insert Acrobat 3D Model按钮,在弹出的对话框中选择Browse Model……选择刚才导出的.vrml文件,三维分子就会出现在ppt中,调整好所占位置和尺寸后,在幻灯片演示时,就可以对ppt中的分子

(1)化学反应是复杂的。无论是普通的化学反应,还是在溶液中进行的电极反应,那种简单而又单一的化学反应是很少很少的。而实际情况是既有同一条件(如温度、浓度)下的先后反应和平行反应,也有不同条件下的不同反应和平行反应,甚至还有某些反应进行的后续反应。从这些角度讲,问题(4)有它的合理性,而问题(3)、(5)就有它的片面性。比如,我们不能把I₂与Cu直接化合生成CuI的反应视为电极反应。

(2)作为试题的答案,应当跟试题提供的信息(如淀粉溶液变蓝)有联系。从答案的简约性原则来讲,答案只出示Cu阳极的主反应($2\text{Cu} - 2\text{e}^- \rightarrow 2\text{Cu}^+$),而略去副反应($2\text{I}^- - 2\text{e}^- \rightarrow \text{I}_2$)似乎是可以理解的。如果作为教学示例来分析,从充分利用试题而言,应当说明阳极区淀粉溶液变蓝,也是I⁻在Cu阳极上发生氧化反应的结果。从这个角度讲,如果把Cu阳极上的2种氧化反应整合成 $2\text{Cu} + 4\text{I}^- - 2\text{e}^- = 2\text{CuI} \downarrow + \text{I}_2$,尽管美中不足,但也比答案B要好。

(3)有必要在分析问题给学生提出:鉴于高价金属的氧化性和低价金属的还原性,对于有不同氧化态的活动性金属阳极(Cu、Fe),电极被氧化成低氧化态,这是一种普遍性规律,但是电解过程中对活性阳极以外的其他在电极上被氧化(如I⁻氧化成I₂,Cl⁻氧化成Cl₂)和化学氧化(如Cu被I₂氧化成Cu⁺,Cu⁺被Cl₂氧化成Cu²⁺,Cu被Cl₂氧化成Cu²⁺等)也是不可忽视的。这或许是电解过程中电极反应复杂性的主要原因。

参 考 文 献

- [1] J. W. 莱斯脱著. 无机化学大纲(第二卷). 苏文焯等译. 上海: 上海科学技术出版社. 1963: 74
- [2] 刘怀乐. 化学教育, 2002, 23(3): 38—39

同pdf文件中一样进行旋转、缩放等操作,在此例中直观地展示出蛋白质的立体结构以及血红素辅基的空间位置(图4)。需要注意的是这种含有3D对象的ppt幻灯片需要在已经安装Acrobat3D插件的powerpoint才可以激活三维对象。

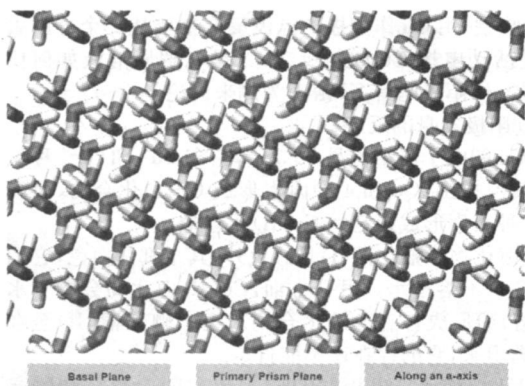


图3 三维冰的结构

5 结束语

在以往的课件制作方法中,一直缺乏简便易行的演示三维分子结构的方法,给教学带来不便。例如讲授晶体结构,教师往往需要通过携带实物模型来展示。对于一些课程涉及到的复杂分子,比如超分子、生物大分子等,更难以在二维平面的课件中清晰展现其立体结构。通过Acroba3D与VMD的结合使用,很好地解决了这一问题,方便地将分子结



图4 肌红蛋白三维ppt课件

构文件有机地整合于ppt、pdf课件文件中,显示效果好,可以用鼠标对分子实时操作,演示中无需借助专业的可视化软件,很大程度上方便了课程的讲授与课件的制作,值得推广。

参 考 文 献

- [1] [http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/minitutorials/acrobat3d.Creating interactive 3-D PDF documents with VMD and Acrobat3D](http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/minitutorials/acrobat3d.Creating%20interactive%203-D%20PDF%20documents%20with%20VMD%20and%20Acrobat3D). 2007-10-11