

ТЕХНОЛОГИЯ СОЗДАНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ МОДЕЛЕЙ БЕЛКОВЫХ КОМПЛЕКСОВ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Маленков А.П.¹, Лихачев И.В.^{1,2}

ФГБОУ ВО «Тульский государственный университет»

Россия, 300012, г. Тула, пр. Ленина, 92

Email: andforoff@gmail.com

ИМПБ РАН — филиал ИПМ им. М. В. Келдыша РАН РАН,

Россия, 142290, Московская область, г. Пущино, ул. Институтская, 4

3D печать приобретает всё большую распространённость. В первую очередь, это связано с доступностью процесса изготовления образцов. Вместо изготовления необходимой детали вручную и/или вместо сбора одной сложной детали из большого количества маленьких её можно напечатать, а для этого понадобится инструкция, некоторая программа для 3D-принтера. Такие инструкции пишутся на языках программирования для устройств с числовым программным управлением (ЧПУ) и условно называются G-коды. Они (G-коды) имеют много вариаций, ведь каждый производитель пытается что-то изменить для своих нужд. 3D печать осуществляется различными способами с использованием разных материалов, но в основе каждого лежит принцип послойного создания твёрдого объекта. Данную технологию можно применять только в производстве. В работе показано, что 3D печать также применима и в сфере образования при подготовке специалистов в области нанотехнологий, биоинженерии, при чтении ряда дисциплин, связанных с работой с белковыми комплексами, например, «Искусство моделирования молекулярной динамики». Макромолекулу можно распечатать для наглядности и изучить ее, а имея модель, можно распечатать этот же объект в разрезе, для лучшего понимания его устройства.

В представленной работе показан процесс получения инструкции на G-коде для печати молекулы белка на 3D принтере. Файл с описанием трёхмерной структуры молекулы белка, взятой из Protein Data Bank. Используя информацию о расположении атомов в молекуле, разработанный программный комплекс «Protein4Print» создает файл-программу на языке python для распространённого комплекса 3d-моделирования с открытым кодом Blender. Для того, чтобы 3D принтер смог нарисовать данную модель, предварительно изменяются координаты атомов по оси Oz ортогонального базиса, чтобы самый нижний атом был на печатной поверхности, а под остальные добавляются цилиндрические подпорки.

Авторы доклада предлагают распространять 3D печать не только в производстве, но и в образовании. Создание трехмерных моделей белковых комплексов поможет магистрантам, аспирантам и научным сотрудникам более четко представлять расположение вторичных структур, а также взаимное расположение молекул белков, легандов и аминокислот сложных макромолекул.