

RAPORTARE ȘTIINȚIFICĂ— structură recomandată (max. 20 pagini):

Raportul Științific 2025

Contract nr. 25PED/2025, etapă nr. 1/2025; **Soluție digitală inovatoare pentru îmbunătățirea educației în domeniile bio-moleculare prin producerea de modele moleculare tipărite 3D**

1. Descrierea științifică

Proiectul răspunde direct constatării evidențiate în studiul anterior al grupului nostru, conform căruia utilizarea modelelor moleculare imprimabile 3D a îmbunătățit semnificativ înțelegerea structurii macromoleculelor de către studenți (Răzvan-Ștefan et al. 2025). Prin generarea automată de fișiere STL într-un mediu web accesibil, instrumentul extinde impactul educațional dincolo de laboratoarele fizice, oferind studenților — inclusiv celor cu dizabilități vizuale sau mobilitate redusă — acces la experiențe tactile și vizuale în biologia structurală, contribuind astfel la consolidarea competențelor în biochimie, biologie structurală și imprimare 3D. Acest demers este în concordanță cu tendințele recente de integrare a instrumentelor 3D în educația STEM (Teplá et al. 2022).

Planul de realizare al proiectului presupune parcurgerea a două etape: 1. crearea unui serviciu web (2025) și 2. testarea acestuia cu utilizatori reali (2026).

Scopul principal al acestei etape a fost deci elaborarea și validarea unei versiuni funcționale a instrumentului **3DP-Jmol**, capabil să genereze fișiere STL pentru modele moleculare tridimensionale obținute din date PDB. Instrumentul a fost dezvoltat în Java/Jmol, în colaborare cu Dr. Ángel Herráez (Universitatea din Alcalá, Spania). **3DP-Jmol** are o pagină dedicată pe GitHub, poate fi integrat în orice platformă web care suportă JavaScript și este distribuit sub licență MIT.

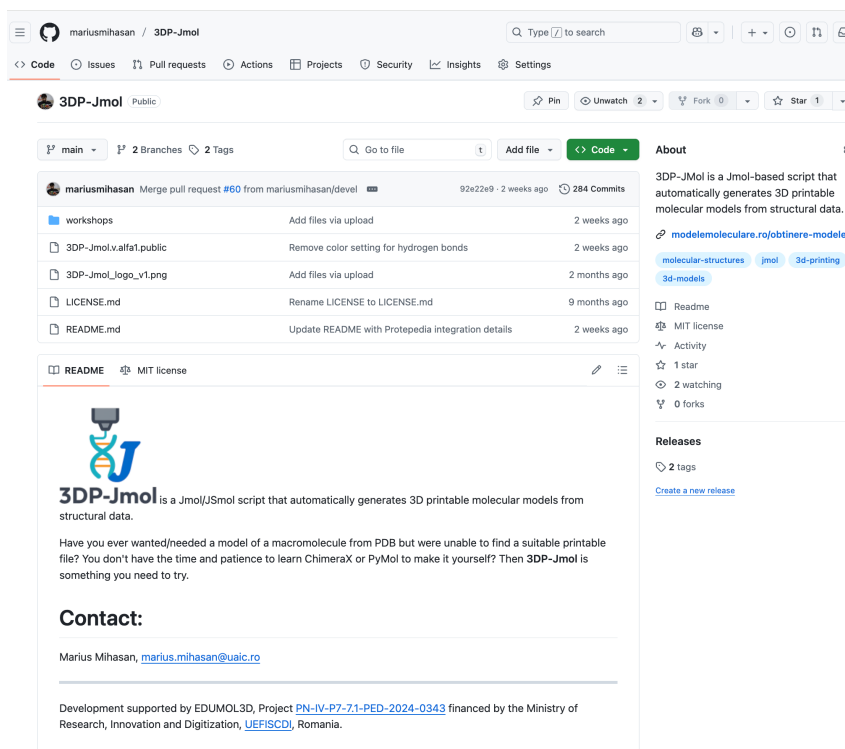


Figura 1. Pagina de GitHub a instrumentului **3DP-Jmol** dezvoltat în cadrul acestui proiect.

Codul sursă este disponibil în **Anexa 1**. [3DP-Jmol](#) a fost bine recepționat de comunitate, existând deja pe lângă implementarea web din cadrul proiectului, și o integrare într-o resursă de referință din domeniul proteinelor: [Proteopedia](#). Această integrare a fost realizată în colaborare cu Jaime Prilusky, Weizmann Institute of Science, Israel.

[3DP-Jmol](#) a fost dezvoltat astfel încât să includă calculul automat al scării maxime de imprimare, ajustarea proporțională a atomilor și legăturilor, și generarea de recomandări privind randarea și scara de printare. Funcționalitățile au fost validate prin teste multiple pe modele proteice cu geometrii variate (insulina umană, PDB ID 4ins) și pe 6 imprimante 3D de la producători diferiți ce utilizează tehnologii diferite (FDM și SLA). Acuratețea dimensională, calitatea modelului final și rezistența sa mecanică au fost evaluate. Testele au însumat 643 de ore de tipărire și un consum total de 6,6 kg de acid polilactic (detaliat în **Anexa 2**). Testele au fost efectuate și cu sprijinul voluntar al 3 studenți: Mihaela Tanas, Tiberius Iustin Munteanu, Amada El-Sabeh.



Figura 2. Testarea printabilității diverselor tipuri de reprezentări moleculare oferite de scriptul [3DP-Jmol](#) pe imprimante diverse. Reprezentări moleculare testate: *balls and sticks*, *backbone*, *trace*, *cartoon*, *surface*. Numerele indică poziția respectivului model în coloana NR asociată fiecărei imprimante din **Anexa 2**.

În cursul etapei de testare, au fost dezvoltate și validate profile de tipărire specifice, adaptate fiecărui tip de reprezentare moleculară pe care o poate realiza [3DP-Jmol](#). Cel puțin trei profile de tipărire pentru fiecare imprimantă testată — în total peste 30 de profile — au fost puse la dispoziția publicului într-o colecție separată pe GitHub. — [molecularmodels-3d-printing-profiles](#). Astfel, [3DP-Jmol](#) și [molecularmodels-3d-printing-profiles](#) reprezintă o **combinație unică** ce oferă software pentru dezvoltarea de modele și instrucțiuni de tipărire adaptate specific acestor modele.

Un avantaj major al [3DP-Jmol](#) este faptul că a fost realizat Jmol/JavaScript. Aceasta facilitează integrarea sa în aproape orice pagină web care suportă JavaScript. Structura logică a scriptului, cu doar câteva variabile ce trebuie precizate de către utilizator face ca dezvoltarea

de interfețe grafice să fie extrem de facilă. Astfel, **3DP-Jmol** a fost deja integrat în 3 pagini web:

1. O implementare web bazată pe html dezvoltată de colaboratorul Dr. Angel Herráez, Universitatea din Alcalá, Spania și disponibilă la adresa: https://biomodel.uah.es/JSmol2/Marius_Mihasan/PDB2STL.htm
2. O implementare web bazată pe motorul MediaWiki - **Proteopedia**. Această integrarea a fost realizată printr-o strânsă colaborare cu Jaime Prilusky, Weizmann Institute of Science, Israel.
3. O implementare web bazată pe xxx dezvoltată în cadrul acestui proiect și disponibilă temporar la adresa: <https://projects.info.uaic.ro/edumol/>. În etapa 2 de implementare a proiectului, aceasta va fi integrată cu site-ul partenerului pentru a deveni un serviciu web de sine stătător. Spre deosebire de celelalte implementări de mai sus, aceasta va permite selectarea producătorului și a modelului imprimantei utilizatorului, generând astfel modele mult mai adaptate cerințelor utilizatorului/partenerului.

Considerăm că proiectul și-a atins două dintre cele trei obiective majore definite în cererea de finanțare: (1) **dezvoltarea și testarea instrumentului 3DP-Jmol** și (2) **crearea unui site web care să găzduiască acest instrument**. Forma finală a acestui site nu este încă disponibilă.

La momentul redactării acestui raport (11.11.2025), s-au realizat o serie de acțiuni ce au în vedere îndeplinirea obiectivului 3, respectiv diseminarea către comunitate a facilităților pe care le oferă instrumentul dezvoltat. Astfel, o campanie de testare a scriptului a fost lansată la nivel local, în cadrul grupului de cercetare **BioActive** și a cadrelor didactice de la Facultatea de Biologie, Iași. Persoanele selectate au utilizat **3DP-Jmol** pentru a-și genera modele de interes, au furnizat feed-back și apoi au primit modelul generat tipărit.



Figura 3. Primii utilizatori ai instrumentului **3DP-Jmol** dezvoltat în cadrul acestui proiect și modelele lor.

De asemenea, rezultatele obținute până în acest moment au fost prezentate la 4 conferințe (1 poster și 3 prelegeri, detalii în secțiunea următoare) și a fost realizat un workshop în cadrul conferinței International Conference: Molecular Biology- Current Aspects and Prospects, Cluj-Napoca Romania.

2. Sumar al progresului

Pentru o imagine de ansamblu asupra progresului obținut în prima etapă, **Tabelul 1** sintetizează pachetele de lucru (WP), livrabilele asociate și gradul de realizare. Primele 12 luni din propunerea de proiect includ primele trei pachete de lucru. Pachetul de lucru patru

a fost preconizat a debuta începând cu luna 16 de implementare, însă o serie de activități au fost deja inițiate începând cu luna 10. Pachetul de lucru 5 este preconizat a se desfășura pe parcursul întregului proiect.

Tabel 1. Pachete de lucru și gradul lor de realizare la finalul lunii 11 de implementare

Pachet de lucru	Livrabile	Grad de realizare
WP.1. Definirea parametrilor tehnici aplicabili serviciului web	Anexa 3. - 4 liste cu parametri tehnici pentru 1 - Parametri tehnici relevanți ai principalelor programe de vizualizare moleculară (Tabel A1); 2 - randarea modelelor moleculare (Tabel A2); 3 - platforma web (Tabel A3) și 4 - integrare platformei cu site-ul partenerului (Tabel A4);	100%
WP2. Dezvoltarea instrumentului web	Instrumentul 3DP-Jmol disponibil sub licență MIT, versiune alfa (https://github.com/mariusmihasan/3DP-Jmol/releases/tag/v.alpha1.public) Pagină de integrare disponibilă la adresa https://projects.info.uaic.ro/edumol/ .	100%
WP.3. Validarea modelelor moleculare generate cu ajutorul instrumentului dezvoltat folosind diverse tehnologii de fabricare aditivă ;	Instrumentul 3DP-Jmol disponibil sub licență MIT, versiune beta (https://github.com/mariusmihasan/3DP-Jmol/releases/tag/v.beta.public) Pagini cu ajutor și instrucțiuni de tipărire: https://tinyurl.com/Print3Dhelp	100%
WP.4. Testarea instrumentului cu utilizatori reali	6 modele realizate de utilizatori din cele 50 propuse până la finalul proiectului. Modelele au acoperit proteine cu geometrii diverse, ilustrând aplicabilitatea generală a instrumentului.	20%
WP.4. Management și diseminare	4 participări la conferințe, 1 workshop	50%

Datorită unor limitări tehnice, planul de realizare în EVOC nu a fost structurat pe pachete de lucru. Etapa 1 în EVOC listează 13 activități și următoarele livrabile: 3 liste cu parametri tehnici pentru 1 - randarea modelelor moleculare; 2 - platforma web și 3 - integrare platformei cu site-ul partenerului; platforma web funcțională, ver. alpha; platforma web funcțională, ver. beta; pagini help și instrucțiuni de tipărire. Activitățile 1.1 – 1.12 au fost realizate integral, iar activitate 1.13 este în curs de realizare. Toate livrabilele indicate în EVOC pot fi identificate în

Tabelul 1.

Rezultatele obținute confirmă atingerea indicatorilor tehnici stabiliți pentru etapa 1, iar baza tehnologică pentru dezvoltarea serviciului web complet este consolidată.

3. Diseminarea rezultatelor:

Activitățile de diseminare au vizat creșterea vizibilității rezultatelor obținute în cadrul proiectului și promovarea instrumentului [3DP-Jmol](https://github.com/mariusmihasan/3DP-Jmol) în mediile academice și educaționale, atât la nivel național, cât și internațional.

3.1. Comunicări științifice la conferințe

- Marius Mihășan, *Bridging Abstract Concepts and Tangible Learning: 3D-Printed Models in Biomolecular Science Education*, Bioinformatics Horizons '25, Bucharest, Romania, April 2-4, 2025, **prezentare orală**;
- Mihaela Tanas, Andreea Mihaela Mlesnita, Andrei Scutelnicu, Angel Herráez, Marius Mihasan, *3DP-Jmol – an automatic tool for generating 3D printable molecular models from structural data*, 49th FEBS Congress, Istanbul, Turcia, 5–9 Iulie, 2025, poster;
- Marius Mihășan, *3DP-Jmol: easy conversion of structural data into classroom-ready 3D printable molecular models*, FBSS 2025, Iași, Romania, 23-26 Octombrie, 2025, **prezentare orală invitată**;
- Marius Mihășan, *3DP-Jmol: Bridging Structural Bioinformatics and Physical Models for Teaching and Outreach*, International Conference: Molecular Biology- Current Aspects and Prospects, Cluj-Napoca, Romania, 4-7 November, 2025, **prezentare orală**;

3.2. Workshopuri

- *A Practical Introduction to 3DP-Jmol and 3D Printing* realizat în cadrul International Conference: Molecular Biology- Current Aspects and Prospects, Cluj-Napoca, Romania, 4-7 November, 2025, aprox. 20 de participanți (5 PI, 5 doctoranzi, 3 masteranzi, 7 studenți), 4 din străinătate, 16 din țară. Instrucțiunile realizate pentru workshop sunt disponibile la adresa: <https://tinyurl.com/3dpjmolworkshop>

3.3. Diseminare online și vizibilitate internațională

- Pagina oficială a proiectului cu secțiune de noutăți: http://cercetare.bio.uaic.ro/grupuri/bioactive/content/grants/PED2024_mm.html
- Integrare în Proteopedia: <https://tinyurl.com/Print3Dhelp>
- Pagina GitHub publică: <https://github.com/3DP-Jmol>
- Postări de promovare pe platforme de socializare: <https://www.facebook.com/3DPJmol>

3.4. Publicații și materiale în curs de publicare

- Mihășan M., Herráez Á., Prilusky J. – 3DP-Jmol: An open-source web-integrated framework for 3D printing molecular models (manuscris în pregătire pentru Biochemistry and Molecular Biology Education).

Activitățile de diseminare au contribuit la creșterea vizibilității instrumentului 3DP-Jmol și la consolidarea colaborărilor internaționale, confirmând interesul comunității pentru integrarea tehnologiilor 3D în educația biochimică și structurală.

Rezumat executiv

Proiectul „EDUMOL3D - *Soluție digitală inovatoare pentru îmbunătățirea educației în domeniile biomoleculare prin producerea de modele moleculare tipărite 3D*” are ca scop dezvoltarea unui instrument care să permită transformarea automată a datelor structurale biomoleculare în modele tridimensionale tipăribile.

Instrumentul rezultat, 3DP-Jmol, a fost dezvoltat în cadrul etapei I (2025) în colaborare cu Dr. Ángel Herráez (Universitatea din Alcalá, Spania) și Dr. Jaime Prilusky (Weizmann Institute of Science, Israel). Scriptul, bazat pe platforma Jmol și tehnologia JavaScript, generează fișiere STL direct din structuri PDB, calculând automat scara optimă de tipărire, dimensiunile maxime admise și recomandările de randare pentru diferite stiluri de reprezentare (*balls and sticks, backbone, cartoon, surface etc.*).

Instrumentul este disponibil public pe GitHub sub licență MIT și a fost deja integrat în resurse educaționale de referință, precum Proteopedia. Validarea sa experimentală a inclus 643 de ore de imprimare 3D și un consum de 6,6 kg de acid polilactic, pe șase imprimante 3D de tehnologii diferite (FDM și SLA). Rezultatele au demonstrat o fidelitate geometrică ridicată, o bună rezistență mecanică a modelelor și o reproductibilitate bună între imprimante.

3DP-Jmol a fost prezentat la patru conferințe internaționale și în cadrul unui workshop dedicat la Cluj-Napoca. Aceste acțiuni, alături de diseminarea online (site oficial, Proteopedia, GitHub și rețele sociale), au contribuit la creșterea vizibilității proiectului și la consolidarea colaborărilor internaționale.

Prin combinarea instrumentelor digitale cu imprimarea 3D, 3DP-Jmol oferă o punte între bioinformatica structurală și educația practică în biologie moleculară, facilitând învățarea interactivă și accesul egal la resurse educaționale pentru toți studenții.

3DP-Jmol - From Molecular Data to 3D-Printed Learning Tools



An open-source tool for molecular visualization, 3D printing and STEM education



Director de proiect
Marius Mihășan, Prof. dr. habil.