

Java によるオープンソースの分子構造表示プログラム Jmol の紹介

総合情報基盤センター 教授 木原 寛

Java で作成された分子の 3 次元の化学構造を表示するためのプログラム Jmol の機能の概要と使用方法及び利用例を紹介する。

キーワード：分子モデル、分子構造、計算化学、Jmol、Java

1 はじめに

Jmol^{1), 2)} は、Java で作成された分子の 3 次元の化学構造を表示するためのプログラムです。Jmol は、複数の形式の構造データに対応しており、さらに各種の量子化学計算プログラムの出力結果を読み込み、分子軌道や基準振動モードを表示したり、フレームのアニメーションを実行することができます。

本稿では、Jmol の機能と使用方法の概略について紹介します。

2 Jmol の入手と設定方法

2.1 Jmol プログラムの入手方法

Jmol は、無償で利用することができます。

Jmol のサイト³⁾ にアクセスし、Download Jmol のページから、安定版または最新版の圧縮ファイル Jmol.zip をダウンロードして解凍します。PC のアプリケーションとして動作するスタンドアローン版とアプレット版の両方のプログラムが含まれています。

Jmol は、MS Windows、MacOS 及び Linux のいずれの環境でも利用可能です。Jmol を利用するためには、Java の実行環境がインストールされている必要があります。

2.2 Jmol スタンドアローン版の設定と実行

Jmol.jar ファイルを PC の適当なフォルダ（例 c:\Program files\Jmol\）にコピーします。Jmol.jar（またはそのショートカット）のアイコンをダブルクリックすると Jmol が起動します。ウィンドウの大きさは自由に変更することができます。

2.3 Jmol Java アプレット版の設定

JmolApplet0 で始まる jar ファイルすべてと Javascript ライブラリのファイル Jmol.js を、サーバまたは PC の適当なフォルダにコピーします。⁴⁾ Java アプレットを用いた Web ページの作成については、3.3 を参照してください。

2.4 Jmol Resource Type for Moodle

e ラーニングシステム Moodle のモジュールとして、Jmol Filter と Jmol Resource Type⁵⁾ が提供されています。いずれも Moodle の標準モジュールではないため、追加インストールされていない場合は利用することができません。

3 Jmol の機能と使い方

3.1 対応ファイルフォーマット

PDB、Mol、CIF などの代表的な形式の構造データファイルを読み込むことができます。また、Gaussian、GAMESS、Q-Chem、MOPAC、Spartan、Jaguar、Molpro などの量子化学計算プログラムによる計算結果の出力ファイルを読み込むことができます。Jmol で分子軌道や基準振動モードなどを表示するためには、量子化学計算プログラムによる計算を実行する際に、必要な情報が出力されるように適切なオプションを指定しておく必要があります。

3.2 Jmol スタンドアローン版の操作

ウィンドウ上部のメニューバーの File メニューから分子構造ファイルを開きます。⁶⁾

Ball and Stick モデルが表示されます。



図1 Jmol スタンドアローン版のメニュー

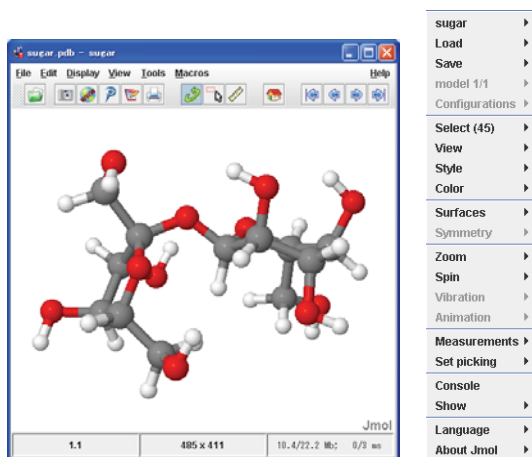


図2 Jmol による表示と Jmol メニュー

ウィンドウ右下隅の **Jmol** のロゴをクリックすると、上図右に示すような **Jmol** メニューが表示され、詳細な指定が可能となります。それぞれのメニューの詳細については、Web ページ上の説明を参照してください。⁷⁾

原子や結合の表示サイズを変更して、**Wireframe**、**Ball and Stick**、**CPK** モデルに相当する図を描くことができます。

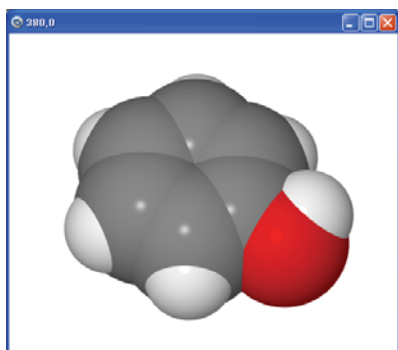


図3 フェノールの CPK モデルの表示

原子や構造単位を描く色を変更することもできます。たんぱく質をリボンモデルで表示し、 α ヘリックスと β ストランドに色をつけて表示した例を図4に示します。



図4 たんぱく質のリボンモデル表示

MOPAC による分子軌道法計算の結果に基づいて酢酸の静電ポテンシャルを表示した例を図5に、**Gaussian** による分子軌道法計算の結果に基づいてアセトアルデヒドの基準振動モードを表示した例を図6に示します。

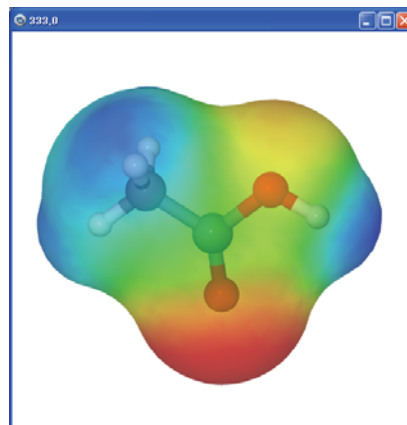


図5 MOPAC による静電ポテンシャルの表示

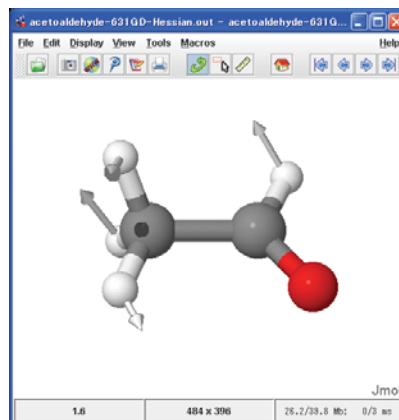


図6 Gaussian による基準振動モードの表示

基準振動については、アニメーションを表示することもできます。

マウスを利用して、分子モデルの移動、回転や拡大・縮小操作を行うことができます。

表 1 マウスの機能

機 能	左(主)ボタン	右ボタン
X,Y 軸の回りの回転	クリック & ドラッグ	
X,Y 方向の移動	Shift+ダブルクリックした後、ドラッグ	Ctrl+クリックした後、ドラッグ
Z 軸の回りの回転	Shift+クリックした後、水平方向にドラッグ	Shift+クリックした後、水平方向にドラッグ
拡大・縮小	Shift+クリックした後、垂直方向にドラッグ	
リセット	分子の上以外で、Shift+ダブルクリック	

3.3 アプレット版による表示

Jmol のパッケージに含まれる Javascript ライブラリ Jmol.js^{8),9)}を利用すると、Jmol アプレットを用いた Web ページを簡単に作成することができます。Jmol.js を利用することにより、Jmol アプレットの Web ページへの挿入、アプレットの HTML や CSS レイアウトの制御及び図 7 に示すような Jmol アプレットを Web ページ上で対話的に操作するためのコントロール（ボタン、ラジオボタン、チェックボックス等）の作成などを行うことができます。

同じディレクトリにある PDB ファイルを読み込んで分子モデルを表示させる場合の HTML コードの主要な部分の記述例を次に示します。

```
<head>
<title>Simple example</title>
<script src="Jmol.js"
      type="text/javascript">
</script>
</head>
<body>
  <script type="text/javascript">
    #Java アプレットファイルがあるディレクトリの指定
    jmolInitialize(".");
    #アプレットの表示
    jmolApplet(300, "load acetoaldehyde.pdb");
  </script>
</body>
```

ファイルを開いた際に分子軌道を表示させる場合は、jmolApplet 関数の引数の部分を例えば次のように変更します。

```
jmolApplet(300, 'load "acetoaldehyde.mgf";
mo homo;mo fill nomesh;mo translucent');
```

Jmol.js を利用して Web ページに分子軌道を表示した例を示します。

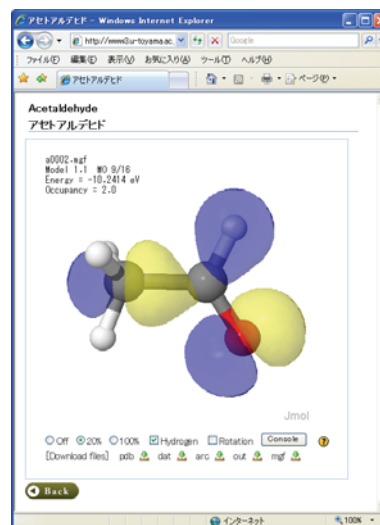


図 7 アセトアルデヒドの HOMO の表示

3.4 Jmol スクリプトについて

Jmol では、RasMol や Chime プラグインで使われていたものを元にした強力な対話型スクリプト言語を利用することができます。

メニューバーの File メニューから Script Editor を選択するかあるいは Jmol メニューから Console を選ぶと、スクリプトを入力するためのウィンドウが表示されます。

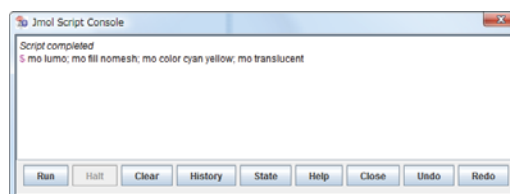


図 8 Script Editor ウィンドウ

スクリプトを入力し、Enter キーを押すか Run ボタンをクリックします。

スクリプトを利用することにより、メニュー

から選択するだけでは不可能な詳細な指定を行うことができます。分子軌道の表示に関係した主なスクリプトの概要を表2に示します。

表2 分子軌道の表示に関する主なスクリプト

スクリプト	機 能
mo ON/OFF	分子軌道を表示する/しない
mo (整数)	何番目の分子軌道を表示するかを指定する
mo NEXT	次の番号の分子軌道を表示する
mo PREVIOUS	一つ前の番号の分子軌道を表示する
mo HOMO [+/-n]	HOMOまたはHOMOから+/-n番目の分子軌道を表示する。
mo LUMO [+/-n]	LUMOまたは LUMOから+/-n番目の分子軌道を表示する。
mo [mesh / nomesh]	格子あるいは面で表示するかを指定する。
mo [fill / nofill]	格子内（面）を塗りつぶすか否かを指定する。
mo [translucent / opaque]	半透明/不透明を指定する。
mo COLOR 色	軌道のロープの色を指定する。色は、color name、[r, g, b] または [xRRGGBB]の形式で指定する。
mo COLOR 色1 色2	波動関数の値が負の部分と正の部分を描く色をそれぞれ指定する。
mo CUTOFF (実数1)	軌道の等値面のカットオフ値を指定する。+/-の符号を付けた場合はそれぞれ正負の等値面のみを指定することになる。
mo RESOLUTION (実数1)	等値面を作成する際の格子点の数を指定する。
mo PLANE (面の指定)	指定した面での断面を表示する。
mo NOPLANE	断面ではなく通常の表示に戻す。

Jmol のスクリプトの詳細については、“The Jmol interactive scripting documentation”のサイト¹⁰⁾及び著者の作成した Web ページ上の説明を参照してください。⁷⁾

4 おわりに

化学の研究・教育において、分子模型（分子

モデル）は、分子の構造や立体化学などを視覚化して深く理解するために極めて重要な役割を担っています。また、現代の化学では、分子軌道の概念に基づいて分子の性質や反応性を議論することが多くなってきています。そのため、化学の教育においても、目に見えない分子やそれらの電子状態を可視化して提供することは、学習者の理解を助けるための極めて有効な手段となると考えられます。

今回紹介した Jmol を利用することにより、PC 上で手軽に分子の構造や分子軌道などを可視化することができます。Jmol は無償で利用することができるため、学生の個人用 PC に導入して課外に利用させることもできます。また、Jmol アプレットを利用することにより、インタラクティブな教材コンテンツを比較的容易に作成できると期待されます。

参考文献及び注

- 1) Jmol: an open-source Java viewer for chemical structures in 3D.
<http://www.jmol.org/>
- 2) Angel Herraiz, “How to use Jmol to study and present molecular structures: Learning to Use Jmol”, Lulu.Com (2008)
- 3) <http://jmol.sourceforge.net/>
- 4) 分子構造ファイルは、Jmol ディレクトリと同じレベルかまたは下位のレベルに置く必要があります。
- 5) <http://moodle.yeovil.ac.uk/course/view.php?id=1927>
- 6) フォルダ名に日本語が含まれていると、ファイルが読み込めない場合があります。
- 7) <http://www3.u-toyama.ac.jp/kihara/soft/jmol/index.html>
- 8) <http://jmol.sourceforge.net/jslibrary/#jmolApplet>
- 9) <http://homepage2.nifty.com/copper29/ipr/jmol.html>
- 10) href=“<http://www.stolaf.edu/academics/chem/apps/jmol/docs/?ver=11.0>”>