富山大学総合情報基盤センター広報　vol.9　（2012）　45-50頁.

技術解説

Jmol を利用した教育用コンテンツの作成

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 を利用して、教育用コンテンツを作成するための環境構築と Jmol の使用方法について紹介する。

キーワード：分子モデル、分子構造、分子軌道、分子振動、Moodle、Jmol

1　はじめに

Jmol [1] 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、種々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始めとするさまざまな表示を行うことができます。

本稿では、前報 [2] で紹介できなかった機能およびその後に追加された新しい機能を中心に、教育用コンテンツを作成するための環境構築と Jmol の利用方法の概略について紹介します。

2　Jmol の設定

2.1　Jmol の入手と設定方法

Jmol プログラムの入手方法および設定の仕方については、前報 [2] を参照してください。

Jmol の利用に際しては、Java 実行環境が必要です。

2.2　Jmol の日本語化

日本語化の作業を既に一部だけ行われた方がいて、主メニューは日本語で表示されるが、残りのメニューやメッセージは英語表記のままという中途半端な状態が続いていました。英語の術語を短くてわかりやすい日本語に置き換えるのはかなり難しい作業です。適切な日本語訳が思いつかない時に、単純にカタカナに置き換えるだけではほとんど意味がありません。そのため、著者はこれまで Jmol の日本語化には消極的でしたが、教育現場での利用を考えると、日本語化することにも意味があると考え、今回 Jmol の日本語化の作業を行いました。約 950 のメニューやメッセージのうち、既に日本語化されていたものを除く約 850 項目を新たた日本語化しました。その結果、Ver. 12.2.14 から完全に日本語が利用可能になりました。アプリケーションを起動した際の画面を図 1 に示します。

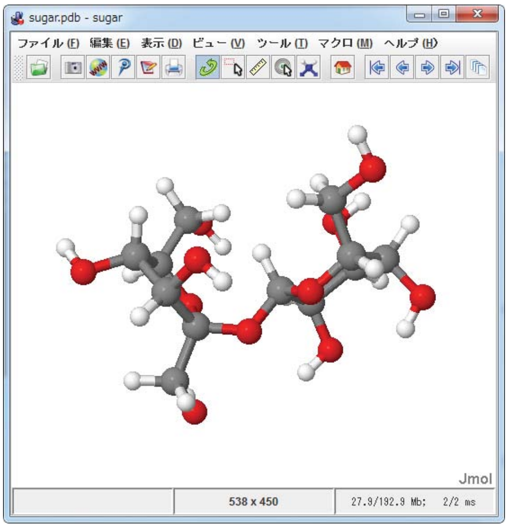

図 1　Jmol アプリケーションのメニュー

ウィンドウ右下隅の Jmol のロゴをクリックすると、図 2 に示すようなメニューが表示され、詳細な指定が可能となります。以下では、これらのメニューを Jmol メニューと記します。それぞれのメニュー項目の詳細については、Web ページ上の説明を参照してください。[3]

Jmol では、起動時に PC の OS の言語環境を判断して、メニューやメッセージがその言語で表示されます。

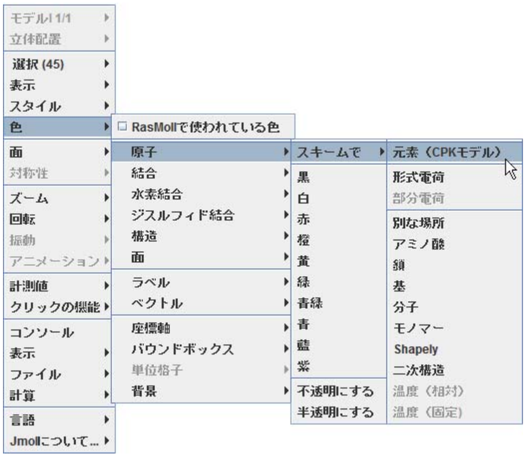

図２　Jmol メニューの日本語による表示例

Jmol メニューの「言語」から他の言語を選択して、表示に使用する言語を変更することができます。

図３　言語メニューの表示例

2.3 署名付きアプレットの利用

通常のアプレットを使用した場合、セキュリティ上の理由からファイルの保存や書き出しメニューが無効になっています。（図 4 参照）これに対し、最近提供された署名付きアプレットを利用すると、ファイルの保存や書き出し機能などを利用することが可能になります。署名付きアプレットの読み込み時に、セキュリティに関する警告が表示されるので、これを受け入れる必要があります。

3 Jmol の利用

図４　Jmol の書き出しメニューの表示例

Jmol を教育に利用する場合の手段としては、次のような方法があります。

- アプリケーションの利用
- 既存の Web ページの利用
- アプレットを利用した Web ページの作成
- Moodle の Jmol Resource の利用

3.1 アプリケーションの利用

アプリケーションでは、Jmol のすべての機能を利用することができます。ウィンドウのサイズも自由に変更することができます。

3.2 既存の Web ページの利用

Jmol を利用して分子の 3 次元構造を表示している Web ページが数多くあり、それらに対するリンクを作成して利用することができます。例えば、Protein Data Bank [4] の Web ページには、PDB ファイルを取得して Jmol で表示する "View in Jmol"という機能があります。また、結晶の単位格子や対称性をわかりやすく示してくれる "J-ICE web-manipulator" [5), 6] というページもあります。その他、著者らが公開している分子軌道の表示 [7] や分子振動のアニメーション表示 [8] ページを利用することもできます。

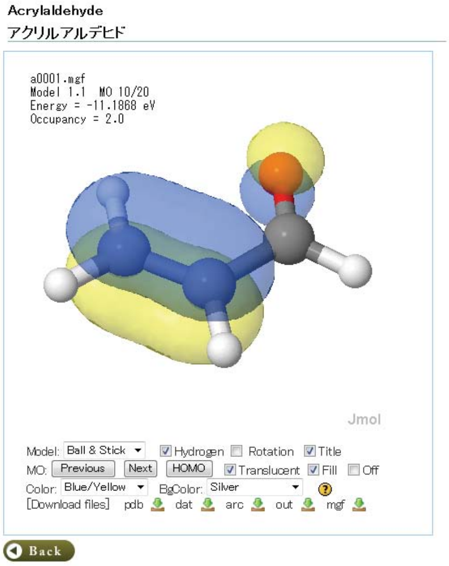

図 5　Jmol による分子軌道の表示例

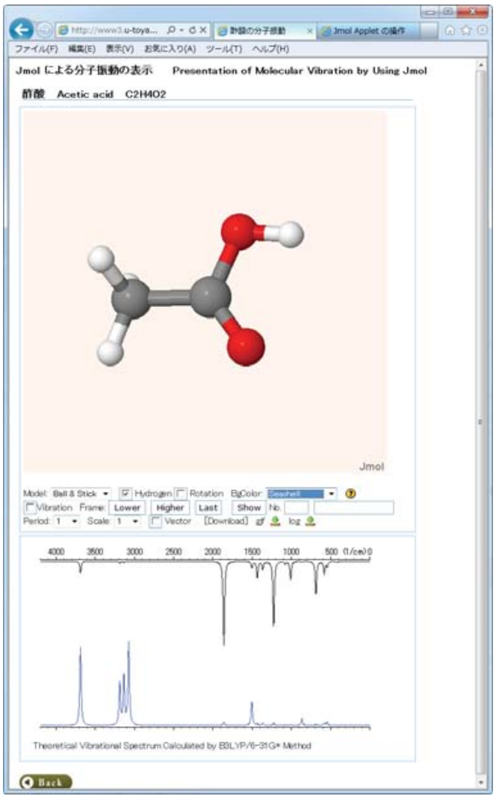

図 6　Jmol による分子振動の表示例

3.3 アプレットを利用した Web ページの作成

Jmol のパッケージに含まれる JavaScript ライブラリ Jmol.js 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 アプレットを用いた Web ページの作成については、前報 2) および Web 上の情報 9) を参照してください。

3.4 Moodle の Jmol Resource の利用

e ラーニングシステム Moodle のモジュールとして、Jmol Resource が提供されています。著者らは、Jmol Resource の日本語化を行うとともに一部を改良して分子軌道や分子振動の表示を可能にしました。10)、現在、Moodle 2 への対応作業を進めています。

なお、Jmol Resource は Moodle の標準モジュールではないため、利用するには管理者による追加インストールが必要です。

図 7　Moodle の Jmol Resource の表示例

図 8　Moodle の Jmol Resource の表示例 2

富山大学総合情報基盤センター広報　vol.9　（2012）　45-50頁.

４ Jmol の機能

4.1 分子組み立て（モデルキット）モード

アプリケーションや署名付きアプレットを利用した場合は､Jmol 内で新規に分子構造を作成することができます。分子力場法による構造最適化の機能をもち、作成した構造データをファイルに保存することができます。

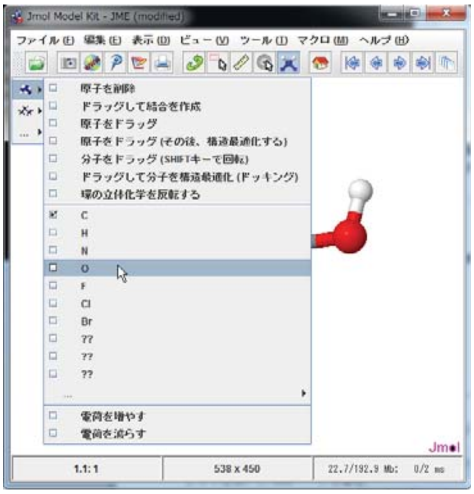

図 9　分子組み立てモードの画面例

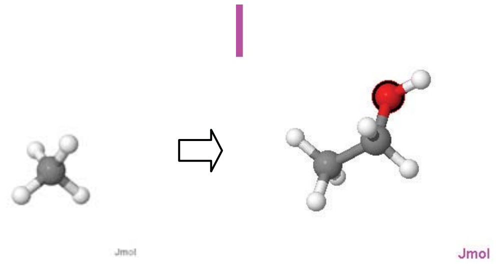

図 10　エタノールの構造を新規に作成した例

4.2 立体視

交差法および平行法による立体視画像を表示することができます。この場合、ウィンドウの横幅は縦の 1.6～2 倍程度にする必要があります｡交差法による表示例を図 11 に示します。

その他、赤/シアン、赤/青、赤/緑の眼鏡を使用して立体視を行う方式を選択することもできます。

また、図 12 のように、分子を回転させた場合でも、常に分子の正面と側面を同時に表示することもできます。

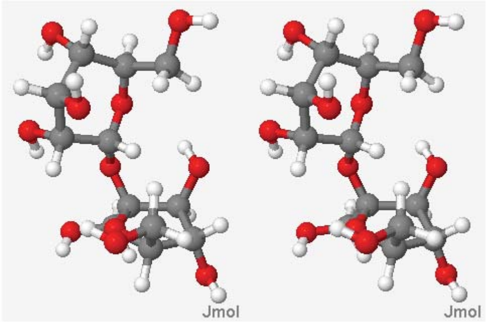

図 11　交差法によるショ糖分子の立体視表示

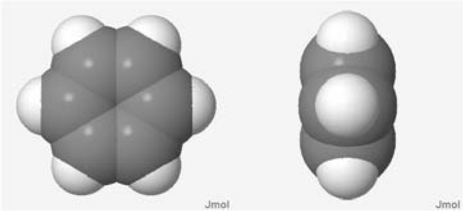

図 12　ベンゼン分子の正面と側面の同時表示

4.3 複数のアプレット・ウィンドウの表示

Web ページに複数のアプレット・ウィンドウを表示して比較することができます｡Java VM のメモリ割当量から推算すると、100 以上のウィンドウを開くことも可能ですが､実際には PC の性能やネットワーク接続環境による制限を受けます。

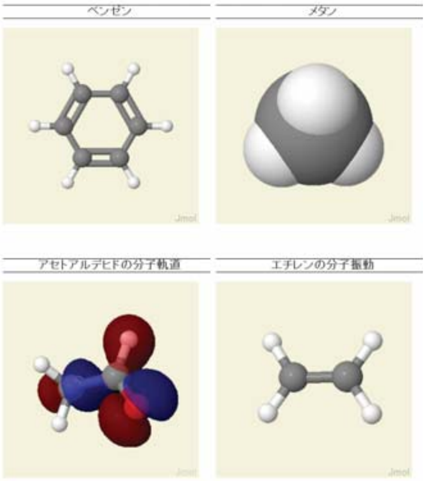

図 13　複数のウィンドウを表示した例

4.4 POV-Ray による高精細イメージの描画

アプリケーションや署名付きアプレットを利用

した場合は、POV-Ray 用のデータを書き出して CG による高精細画像を得ることができます。書き出す際は、ウィンドウの縦横比を 3:4 に設定しておく必要があります。POV-Ray イメージを書き出して描画した例を図 14 に示します。

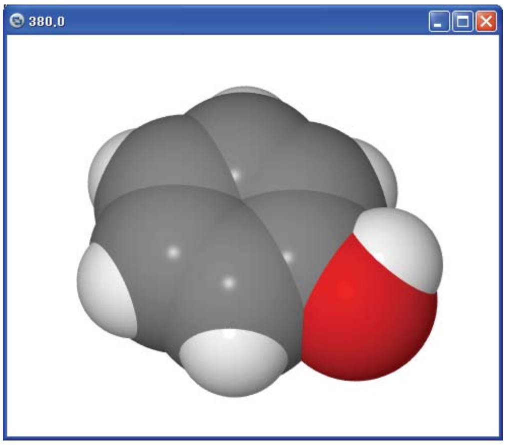

図 14　フェノールの CPK モデルの表示

4.5 分子軌道や分子振動の選択

スクリプトを利用せずに、Jmol メニューから表示したい分子軌道や分子振動を選択して指定することができるようになりました。すべての分子軌道を表示するためには、MOPAC 等で計算を実行する際に、ALLVEC を指定する必要があります。

図 15　Jmol メニューによる分子軌道の指定

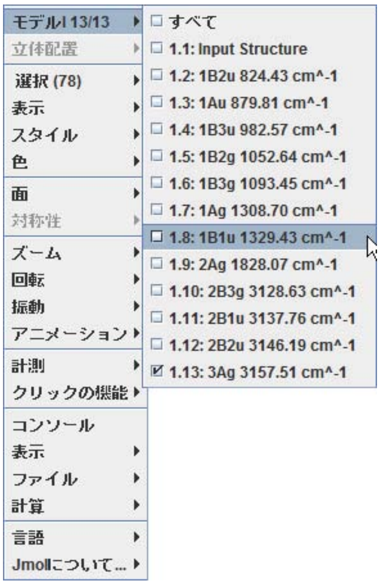

図 16　Jmol メニューによる分子振動の指定

4.6 コンソールの起動

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。[3)]

アプリケーションのメニューバーの「ファイル」メニューから「スクリプトエディター」を選択するかあるいは Jmol メニューから「コンソール」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 17　Jmol スクリプト・コンソール

スクリプトを入力し、Enter キーを押すか「実行」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。

例として、下記のようなスクリプト[11)]を指定して、タンパク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様子を図 18 に示します。

```
background whitesmoke; set frank off; select all; wireframe off; select protein;
spacefill off; backbone off; color structure; select protein; cartoon; select protein and not (helix or sheet); trace 0.6; color white; select not (protein or water); spacefill; color cpk; select (atomno>=467) and (atomno<=487);
colour atoms [255,0,0];
spacefill; select (atomno>=488) and (atomno<=494); colour atoms [0,255,0];
spacefill; select (atomno>=495) and (atomno<=503);
colour atoms [0,255,255]; spacefill; select (atomno>=456) and (atomno<=466);
colour atoms [0,0,180]; spacefill; rotate z 75;
```

図 18 たんぱく質のリボンモデル表示

4 おわりに

化学や薬学の教育において、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、目に見えない分子やそれらの電子状態など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きわめて有効な手段となると考えられます。

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。また、教材を作成する際に、Jmol を使用した既存の Web ページを利用したり、Jmol アプレットを使用したページを自分で作成することにより、インタラクティブで効果的な教材を比較的容易に作成することができます。

参考文献及び注

1) Jmol: an open-source Java viewer for chemical structures in 3D. http://www.jmol.org/
2) 木原　寛, " 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", 富山大学総合情報基盤センター広報, Vol.7, p.79-82, 2010
3) http://chemapps.stolaf.edu/jmol/docs/
4) http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do
5) http://j-ice.sourceforge.net/ondemand/index.html
6) P. Canepa, R.M. Hanson, P. Ugliengo, M. Alfredsson, J. Appl. Cryst., 44, p. 225-229, 2011
7) 木原　寛, 長尾　輝夫, "Jmol 版分子構造・分子軌道データ集の公開", 富山大学総合情報基盤センター広報, Vol.7, p.50-52, 2010
8) 木原　寛, 千田　範夫, "Jmol 版分子構造・分子振動データ集の公開", 富山大学総合情報基盤センター広報, Vol.8, p.61-65, 2011
9) http://www3.u-toyama.ac.jp/kihara/soft/jmol/index.html
10) 木原　寛, MoodleMoot 2012 Lighting Talks 6, 151　2012 年 2 月 23 日, 三重大学
11) http://www.ecosci.jp/