

インターネットを利用して分子を学んでもらう試み

Web サイト「生活環境化学の部屋」主宰 本間 善夫

<http://www.ecosci.jp/>, honma@muf.biglobe.ne.jp

1990 年にお茶の水女子大学で開催された「化学 PC 研究会」の第 5 回化学 PC ソフトウェア研究討論会に始めて参加して新しい時代に向けての熱心な雰囲気の魅力に魅かれ、その後拙い研究発表をさせていただくようになり、1992 年の「化学ソフトウェア学会」を経て 2002 年の「日本コンピュータ化学会」への発展という過程の中で、多くのことを学ばせていただいたと改めて思い起こしている。

新潟大学の伊東章先生に実行委員長をお願いして 1998 年の化学ソフトウェア学会研究討論会の準備委員を担当した際には、「化学とソフトウェア」1998 年 3 号に『「私」はインターネットのどこにいるのか』という巻頭言[1]を書かせてもらい、それまでの経緯を述べてから 10 年が経つ。

インターネットについては文中で“信頼のおける情報が不足しているのも事実であり、神経回路があっても学習しなければ脳が機能しないように、インターネットの仕組みが整っても有用な情報が流れなければ意味がありません”と記したが、Web2.0 という語に象徴されるように「あちら側」[2]への知の集積は予想以上に急激に進んでいる一方でその事情は変わっていないところもあり、多くの人の協力は今後も欠かせない。

Protein Data Bank (PDB) など生体分子関連のデータベースの充実も加速度的で、低分子に加えてそれらを利用しつつインタラクティブな教材を作成する営みを継続する中で、利用させてもらった多くのソフトウェアの能力向上や通信速度の飛躍的向上という追い風には助けられる一方である。

自作コンテンツの分子表示ツールを Chime から Jmol に変更することを余儀なくされるという思わぬできごともあったが、どうにかその営みを続行できているのもネットの背景にある人間の知の総力の賜物と感じざるを得ない。

さらに、Chime 版あるいは Jmol 版コンテンツの双方について、データを収載した CD または DVD-ROM を付録にした書籍[3]を上梓できたことも、オフラインで分子モデルについて学んだり教材にしてももらったりする上で大きな意味があった。編集過程で著者 2 名と編集者が電子データの添付メールだけで作業したことも Web2.0 を先取りした実践と捉えている。

なお、本研究関連論文[4]執筆の際には、本学会電子出版室の多大なご尽力により 2007 年 1 月から実施されている J-STAGE を利用した電子投稿システムを利用させていただくことができ、J-STAGE における早期版の公開など貴重な体験ができた。この点は「化学ソフトウェア学会」時代から会員以外にも HTML 版を全文公開していたことに加えての編集委員会各位の先駆的な姿勢に感謝するばかりである。

分子のかたちの意味するところを初学者にも理解してもらえるように、Chime や Jmol での分子表示を様々に変更できるよう、コンテンツごとに HTML ソースのスクリプトを書き換えるなどの工夫をしたほか、必要な文献や Web

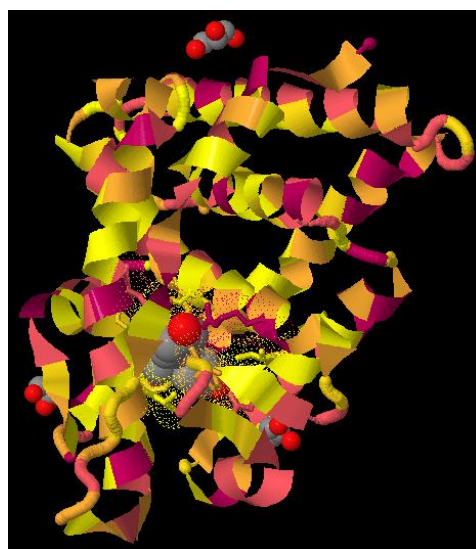


図 1 リボン構造で示した PDB データ例 2E2R. 親水性疎水性インデックス値順に着色し[4]、ビスフェノール A (中央の空間充填表示) の周囲のアミノ酸残基のみスティック表示したもの。

