

演 題	携帯電話向け3D分子表示プログラムJ-moldaの開発	
発 表 者 ( 所 属 )	○戸根健輔, 林治尚, 山名一成, 中野英彦 (姫路工大工)	
連 絡 先	〒671-2201 兵庫県姫路市書写 2167 姫路工業大学大学院 工学研究科 物質系工学専攻 林治尚先生気付	
キーワード	携帯電話 JAVA	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 等	近年、個人向け携帯端末の普及に伴い、携帯専用コンテンツの利用による分子グラフィック表示を行う試みがある。今回は J-PHONE 端末をターゲットにした 3D 分子表示プログラムの開発を、JAVA 言語を用いて行った。	
環 境	適 応 機 種 名	携帯端末 J-PHONE
	O S 名	WINDOWS
	ソース言語	JAVA
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 ( 右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い )	・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他	具 体 的 方 法
	・未定	

## 1. 緒言

分子シミュレーションを行うにあたり、計算結果をグラフィック表示することで、従来の合成実験化学の結果からでは得ることが困難だった、分子の構造や状態を容易に入手できるようになった。また、これらの情報から構造を視覚化することで、分子の反応性や物性を調べられる。

近年のグラフィックス分野では、映像を 3D 表示する技術が実用化されており、分子グラフィックスもこの恩恵を受け日々進歩している。それにより、携帯端末やマウスなどの、ボタンを押すだけの簡単な操作で軸回転や拡大縮小を行い、あらゆる角度から分子を閲覧することができるようになった。分子の 3D 表示技術は、構造を評価する上で重要な意味を持つため、非常に有効である。

また、個人向け携帯端末の普及に伴い、携帯専用コンテンツの利用による分子グラフィック表示を行う試みがある。本研究では、J-PHONE 端末をターゲットにした 3D 分子表示プログラムの開発を行った。開発にはプラットフォームに依存しない JAVA 言語を選択した。

## <J-PHONE の特徴>

J-PHONE の Web 閲覧サービスを「J-Sky Web」、JAVA アプリケーションのダウンロードサービスを「Java アプリ」と呼ぶ。J-PHONE の Java 実行環境では、Java の API として「MIDP(Mobile Information Device Profile)」が採用されている。さらに、3D グラフィックの表示、待ち受けアプリを容易に作成することができる J-PHONE 独自の API 「J-PHONE Specific Class Library(JSCL)」も使用できる。

## 2. 作成手順



### 3D モデルデータとリソースの作成

分子モデルの作成には、3DCG 作成ソフト AnimationMaster Ver.9.0 (9.5h) を使用した。このソフトを用いて Model ファイルと Action ファイルを作成した後、携帯に適用可能なプログラム形式にするために、Micro3DConv.exe を用いてファイル変換を行った。

### JAVA プログラムの作成

JAVA 言語を用いてソースコードを記述し、そのソースコードにそれぞれコンパイルと検証を行い、JAVA VM 上で実行可能な形式であるクラスファイルに変換した。

ソースコードは J-PHONE 本体動作の制御部分、実機に分子表示や各操作の機能を持つプログラムを作成した。

### J-PHONE エミュレータでの実行

作成したプログラムとモデルデータをパソコン上でテストする為に J-Sky Application Emulator を用いて表示した。

