

演 題	Java 3D グラフィックスによる無機結晶構造可視化の試み	
発 表 者 ( 所 属 )	○野口 文雄, 藤井 秀彦, 小林 秀彦 (埼玉大学工学部)	
連 絡 先	〒338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255 TEL/FAX 048-858-3536 E-mail <a href="mailto:noguchi@apc.saitama-u.ac.jp">noguchi@apc.saitama-u.ac.jp</a>	
キーワード	Java, 3D グラフィックス, 可視化, 結晶構造	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 等	Java のアプリケーションは機種依存性がないこと, Java はプログラミング言語の主流になりつつあることから, C/C++で自作した多機能な無機結晶構造可視化ソフトウェアの JAVA への移植を試みた。	
環 境	適 応 機 種 名	DOS/V
	O S 名	Windows2000, WindowsXP など
	ソ ー ス 言 語	Java
	周 辺 機 器	特になし
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 ○未定	具 体 的 方 法

## 1 はじめに

筆者らは, 無機結晶データベース (ICSD: Inorganic Crystal Structure Database) から出力されるテキスト形式の結晶データファイル (CIF: Crystallographic Information File) を読み取り, VRML(仮想現実設計言語)のスク립トファイルを利用して結晶構造を表示するソフトウェアを C/C++プログラミングにより開発した. このソフトウェアには, 配位多面体による結晶構造の簡素化表示機能をはじめとして, 多セル描画機能, 結晶多面体表示機能, 任意結晶面の原子配列表示機能等がある. 今回は, このソフトウェアの Java への移植の第一歩として, Java3D グラフィックスクラスライブラリの使い勝手を調査するため, 単位格子内の原子配列を原子球で表示させるソフトウェアの試作を行った.

## 2 プログラミングの方法

プログラミングでは, Java2 SE v1.3.1 および Java3D 1.3 を組み込んだ Borland 社の JBuilder7 SE を RAD(Rapid Application Development)ツールとして用いた. 結晶構造の描画では, 単位格子の大き

さと形を定める格子定数と原子の位置情報としての原子座標が必要となる。格子定数については CIF から提供されるものを直交座標系に座標変換するだけでそのまま利用できるが、原子座標については、CIF の原子座標を空間群の同価点座標によって座標展開しなければならない。この処理をすべて Java プログラムの中で行うにはかなりのプログラミングの手間を要するので、当面の処置として、C++で開発したソフトウェアに、描画に必要な最小限のデータをテキストファイルに出力させる機能を付加して、描画データを得た。Java にはテキストファイルの文字列データをトークンに分解する強力な StreamTokenizer クラスがあるため、結晶データの取得は容易であった。原子球による結晶構造描画に必要なプリミティブ (3D オブジェクト描画の基本部品) は Sphere クラスだけであり、これらを統合して扱うため TransformGroup クラスのサブクラス (派生クラス) として Crystal クラスを実装した。マウスによる選択に対応した回転、移動、遠近ズームのピッキングは、Java3D に予め組み込まれていた PickRotateBehavior, PickTranslateBehavior および PickZoomBehavior の各クラスをそれぞれ利用することでとても簡単に実現できた。

### 3 出力例

出力の一例として、スピネルの結晶構造図を図 1 に示す。現時点では、ユーザーは原子半径と描画色を変更できるだけで、インタラクティブなコンテンツとはなっていない。しかし、ピッキングは VRML ビューアの Cosmo Player 並みに非常にスムーズに実行されるので、単位格子内の原子数があまり多くない結晶については、その構造を可視化できることが分かった。

### 4 まとめと今後の課題

本プログラミングを通して、Java3D には各種の環境光源を設定する AmbientLight クラスや、物体の外観を詳細に指定できる Material クラスがあり、結晶構造可視化ソフトウェアの開発に Java3D を充分利用できることが分かった。また、Java にはポインタがないので、C/C++のような難解さがなく、しかも完全なオブジェクト指向言語であるため、本プログラミングを通して、Java が今後のプログラミング言語の主流の地位を占めると実感できた。今後は、Swing コンポーネントの使い方に習熟して、よりユーザーインタラクティブなソフトに改良した多機能な結晶ソフトとして仕上げたい。

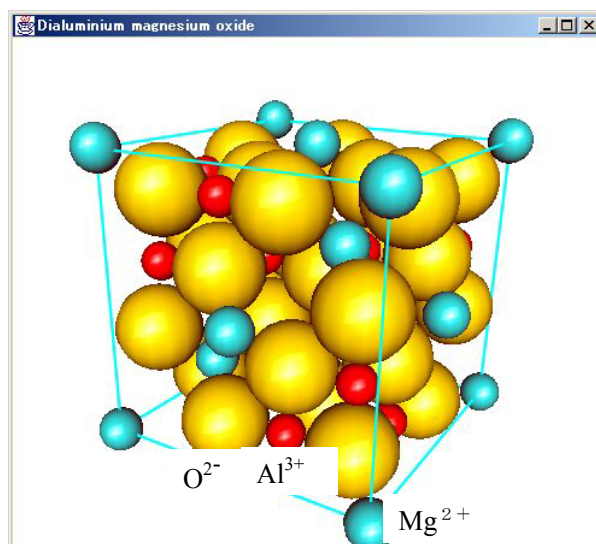


図 1 スピネル(MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)の結晶構造図

### 参考文献

- 1) 松村健一郎, 司ゆき, 「はじめての JBuilder6」, ソフトバンク (2002)
- 2) 田中成典編, 「Java3D グラフィックス入門」, 森北出版 (2002)
- 3) 大村忠史, 「Java GUI プログラミング Vol. 1, Vol. 2」, カットシステム (2002)