

携帯電話での3D分子構造表示

○庄司光男、山口兆

大阪大学大学院理学研究科(〒560-0043 大阪府豊中市待兼山町 1-1)

【緒言】 これまで分子構造 3D 表示プログラム(Makiko)を独自に開発してきた[1]。携帯電話は非常に普及しているが、この環境は軽量、通信可能、画像表示可能な点で、分子構造表示に適していると考えられる。特に気軽に表示出来る点において、グラフィック専用のワークステーションや PC には無い利点があると考えられる。これまで、携帯端末での分子構造を表示する試みはいくつかある[2, 3]。しかしながら、本研究では携帯電話用の分子構造 3D 表示プログラム(iMakiko)を独自に開発し、その有用性について調査した。

【方法】 携帯電話における Java 言語は機能限定版である (J2ME: Java 2 Micro Edition)。そのため Java 言語(JavaSE)で書いた Makiko を参考に、コーディングしなおした。J2ME は各携帯電話会社 (NTT DoCoMo, au, vodafone) により仕様が異なる[4]。そのためまず NTT DoCoMo 版の Java プログラム(i アプリ)の作成を行った。

【結果】 本プログラム(iMakiko)の最大の特徴は携帯電話で分子の構造を操作できることである(Fig)。以下本プログラムの特徴を列挙する。

1) 分子構造を 3D 表示でき、表示方法を変えることが出来る (Van der Waals, ball and Stick, Wire frame)。Stick 表示は識別しにくい事が分かった。

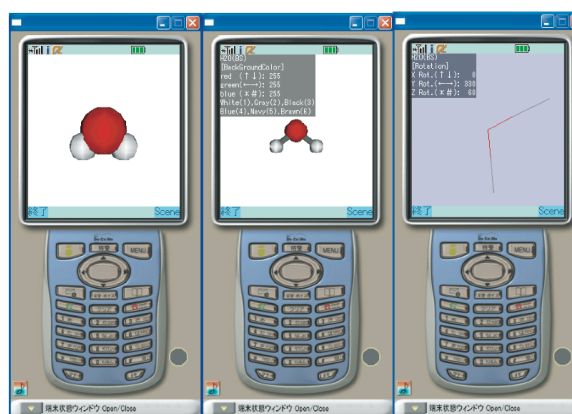
2) 拡大縮小、平行移動の操作が可能。

3) 背景の色を変えられる。

4) 分子軌道、スピン構造の表示可能

本プログラムは計算結果の可視化、デモンストレーションという点で非常に有用であると考えている。当日の発表では iMakiko の表示デモを行うとともに、J-molda[2]との比較を行う予定である。

【今後の展開】 WWW での公開とダウンロード環境の整備、および各 J2ME 版を作成していく予定である。【参考文献】 [1]庄司光男、山口兆, SCCJ 春年会 2005. [2] 吉田 弘, 本間善夫, CSSJ 討論会, 210(2001). [3] 戸根健輔, 林治尚, 山名一成, 中野英彦, SCCJ 年会, 306(2003). [4] JavaPress, 技術評論社, 46(2006).



(a) (b) (c)

Fig エミュレーター上での分子構造表示例(H2O) (a)VdW,(b)BandS,(c)Wire.