

# 演示実験における構造式の描画と分子モデルの生成

長谷川 浩史（大阪公立大学 杉本キャンパス 納品検収センター）

HASEGAWA Hiroshi : Drawing structural formulas and generating molecular models in demonstration experiments

This report describes free software that draws structural formulas and generates molecular models of reagents used in demonstration experiments for visitors to the Basic Experimental Education Building of Osaka Metropolitan University.

## 1. 目的

筆者は、以前、大阪市立大学基礎教育実験棟における基礎化学実験の支援を担当した。支援業務の中に、実験棟施設の見学者への化学実験の演示がある。この業務の担当中に、演示する実験で使用する試薬の分子モデルを生成して見ていただくのも良いのではと思い、量子化学計算プログラムの利用を検討した。演示では、モデルの生成結果の表示だけでなく、量子化学計算プログラムを操作し、生成していくのもよいと思える。その際、試薬名等を音声で入力し操作させると、見学者により興味を持っていただけるのではないかと考え音声駆動について検討を行った<sup>1)2)</sup>。そのシステムでは、windows7の音声認識機能と分子モデル生成にWinmostar（無償版）、マウスやキーの操作を記録し再生するHiMacroEx（フリーソフト）を用いている。コンピュータの入力方法には音声以外に、キー、マウス、文字、視線制御等があり多様である。システムはこの多様な入力方法にも対応できることが望ましいと思われる。本報告では、多様な入力方法の利用の検討と、試薬の選択、Ketcher（無償版）による化学構造式の描画、Avogadro（無償版）を用いた分子モデルの生成を、簡単な操作で行いながら手順も理解できる安価なシステムについて述べる。又、フリーソフトを共有メモリにマニュアル等とともに保存し共同利用することについても述べる。

## 2. マウスとキー操作の記録と再生

本報告で用いるHiMacroExは、マウスやキーの操作をマクロ命令で記述し記録する（テキストファイル）。記録内容は、編集が可能で、待ち時間の調節、プログラムの起動、アクティブウインドウの指定、テキストボックスへの文字の入出力等の機能を持ち、変数も利用できる。更に、ループや<Switch><Case>、GoTo文等

によるマクロ命令の条件分岐、無条件分岐も可能である。<Switch><Case>文では条件に、GetClip、変数、rand関数の値が利用できる。マクロ命令GetClipはクリップボードの値を読み込む。

## 3. 入力方法とクリックボードへの書き込みとHiMacroExとのリンク

2で述べたGetClipの機能を利用するために、クリップボードへの数値の書き込みを、SetClipboardData()関数を用いて行う。この関数を実行させると、試薬名に対応する数値がクリックボードへ書込まれる。試薬名（数値）の指定には、1で述べた入力手法の利用が考えられる。①音声入力には、音声認識の機能が必要で、先の報告では、windowsに内蔵されている音声認識プログラムを用いている。②マウスでは、試薬名が記載されたボタンを配置し選択する画面が、③キーでは、試薬名を入力する画面等が必要になり、プログラミング技術が必要になる。④視線制御では専用機が、⑤文字（手書き）ではタッチパネルやペン、OCR（文字認識）等が必要になる。本報告では、②のマウスによる入力方法を検討する。勿論、AvogadroやKetcherは、マウス操作がベースであるが、本報告では、マウスのワンクリックによる、モデルの生成や構造式の描画の実現を目的としている。この機能を実現するために、生成したウインドウ内に試薬名が記載されたボタンをいくつか用意し（図1）、ボタンをクリックすると、前述の関数により対応する数値がクリックボードへ書込まれるプログラムを作成した。このプログラムは、WinMain()とWinProc()関数からなり、Microsoft Visual studio2022（無償版）を用いて作成している。

図2のHiMacroExの基本画面で、「記録」ボタンをクリックすると、アクティブウインドウでのマウスの操作が、マクロ命令列として記録され、「保存」ボタン

をクリックすると、テキストファイルとして保存される。「読み」ボタンは、テキストファイルを HiMacroEx に読み込み、「再生」ボタンをクリックするとマクロ命令列を実行する。図 2 では、<Switch>の前に GetClip があり、この数値（試薬名）と一致する<Case 数値>文が選択され、次の行のマクロ（操作）を順に実行する。

図 3 と図 4 に、Ketcher と Avogadro と本手法を用いて描画し生成させた例を示す。HiMacroEx からの Ketcher 及び Avogadro の起動は、テキストファイル内の行で各々のパスを指定する。又、アクティブウィンドウの指定には、W の後にタイトルを記入する。

これらの処理によりボタンのワンクリックで、試薬の選択、描画と生成を行わせるとともに、カーソルの動きのトレースや、クリックしたボタンの機能表示時間を長くする等により操作手順の理解も可能になると思われる。

#### 4. フリーソフトの共有化

本学の基礎教育実験棟では、化学以外に物理学、生物学、地球学の実験を行っている。本稿で述べた手法は、同様の演示実験を行っている他の実験室にも応用できると思われる。それで、入手したフリーソフトは、実験棟の共有メモリに保存し、共同利用できるようにしておくが良いと考えている。理由は、複数の実験室で利用できるシステムの構築の可能性もうまれやすくなるのではと思えるからである。このために、化学、物理学、生物学、地球学、その他の分野（画像処理、プログラミング等）のフリーソフトの共有化を図っている。

#### 5. おわりに

ボタンのワンクリックによる処理について述べた。必要なソフトは、自作したものとフリーソフトを用い、安価なシステムとなっている。現在、文字や視線制御等の他の入力方法の利用と、フリーソフトの共有化の充実について検討を行っている。

#### 参考文献

- 1) 長谷川浩史 (2016) 量子化学計算プログラムの音声駆動. 2016 名古屋大学機器分析技術研究会報告集 : o-10
- 2) 長谷川浩史 (2017) 音声認識を用いた量子化学計算プログラム. 2017 生理学・生物学合同技術研究会報告集 : 179-180

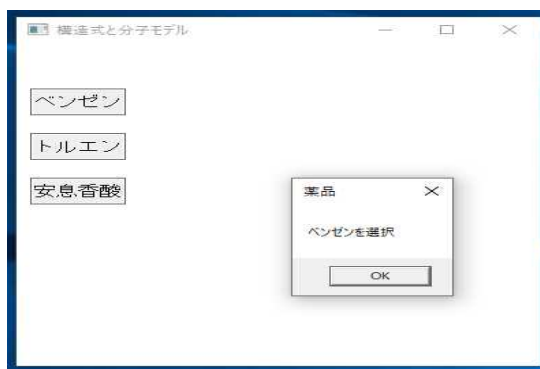


図 1 薬品名ボタン

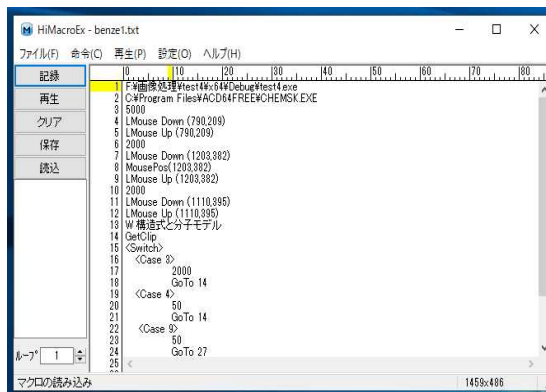


図 2 HiMacroEx のマクロ



図 3 Ketcher による描画

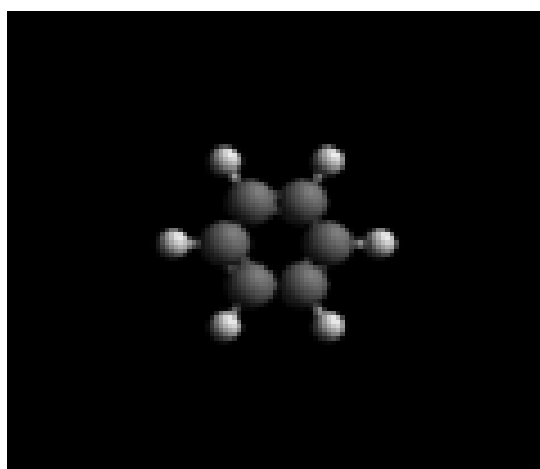


図 4 Avogadro による生成