

## 立体化学の基礎教育における MolView の活用

西本 寛 (愛知大学経済学部)

### 1. はじめに

立体化学は、有機化学を学ぶうえで避けては通れない項目である。分子の三次元構造が、その分子の性質を左右するためである。化学の教科書では、透視式 (perspective formula)<sup>1)</sup> や破線くさび形表記法 (dashed-wedged line notation)<sup>2)</sup> と呼ばれる表記法により、分子の三次元表記を行う場合が多い。また、補助的にステレオ図を活用する場合もある (図1)。

しかし、紙面上でのこうした表記だけで分子の立体構造を理解することは、化学初学者にとっては極めて困難であり、実際に自分の手で分子模型を組んで立体化学の学習を進めることが推奨される。しかし、履修者数が数百人規模にのぼる文系大学の共通科目では、分子模型を履修者全員に購入させることは現実的ではなく、分子模型を用いた授業進行は難し

い。また、立体化学の学習用として多くの教育機関で導入されていたHGS分子構造模型が、製造元 (日ノ本合成樹脂製作所) の倒産により入手不可能となっており、在庫が無くなれば継続的な利用はできなくなる。

そこで、本稿では立体化学教育のための3D分子モデリングアプリケーションの活用方法を紹介する。PDBの管理を行うRCSBのウェブサイトには30種以上のソフトウェアがリストアップ<sup>3)</sup> されているように、3D分子モデリングソフトには数多くの種類が存在するが、ここではMolViewというウェブアプリケーションを取り上げる。このアプリケーションの特徴は、無料で使えること、そして、パソコンだけでなくスマートフォンからも利用できる点であり、文系学生への立体化学教育に導入し易いという利点がある。

### 2. MolView の解説

MolViewは、ナノバイオロジーを学ぶデルフト工科大学の大学生Herman Bergwerfによって開発されたウェブアプリケーションである<sup>4)</sup>。2004年の7月1日から一般に公開されている。ウェブ

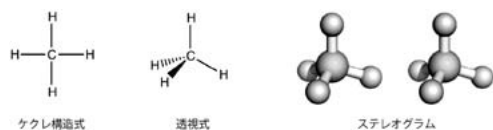


図1 メタンのケクレ構造式と透視式及びステレオグラム

ブラウザを介して動作させるプログラムであるため、WindowsやMac、LinuxといったOSに依存せず利用することができる(図2)。

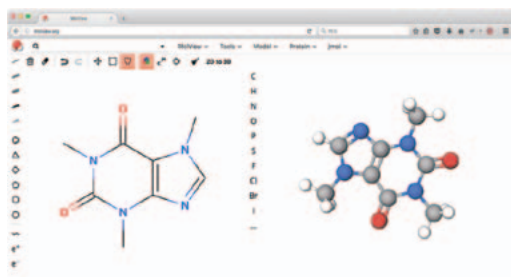


図2 MolViewの動作画面 (Firefox, Mac OS)

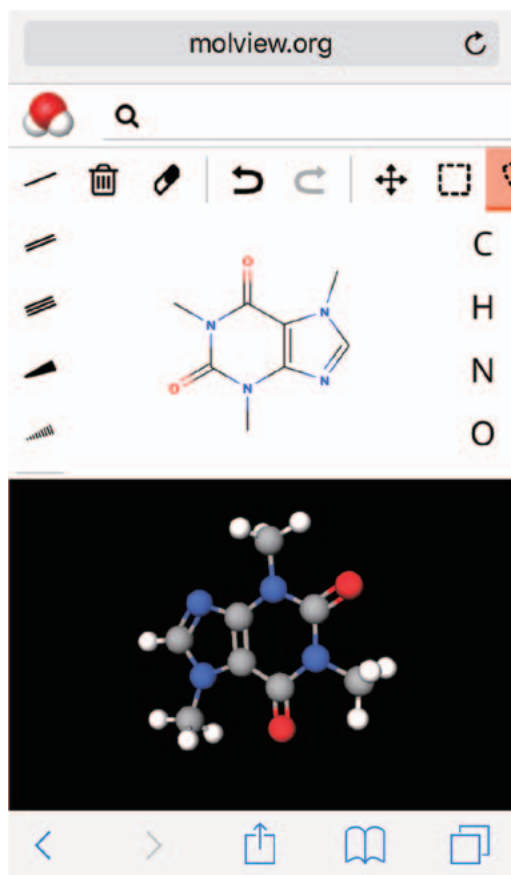


図3 MolViewの動作画面(Safari, iPhone)

また、パソコンから利用した際には画面構成が若干変わるものの、iPhoneやiPadのようなタブレット端末からも動作させることができる(図3)。ここでは、2016年9月現在の最新バージョンMolView v2.4の操作方法について解説する。

## 2.1 構造式からの3Dモデリング

MolViewを利用するためには、<http://molview.org>にアクセスする。パソコン画面からアクセスした場合、画面左側には構造式が、画面右側には構造式に描かれた分子の3Dモデルが表示される。iPhoneからアクセスすると、画面が上下に分かれており、上部に構造式、下部に3Dモデルが配置されている。ここからは、学生の利用を想定してiPhoneの画面をもとに解説する。

初めてMolViewにアクセスした場合、カフェインの構造式と3Dモデルが表示される。3Dモデルは指でドラッグしたりピンチイン・ピンチアウトにより自由に動かしたりサイズを変えることができる。MolViewの基本機能は2Dの構造式から3Dモデルを描画することであり、任意の構造式から3Dモデルを作成することができる。構造式エディタの周りには、構造式を描くための各種ツールが並んでいる。このうち、[ゴミ箱]ボタンを押すことで最初に描かれていたカフェイ

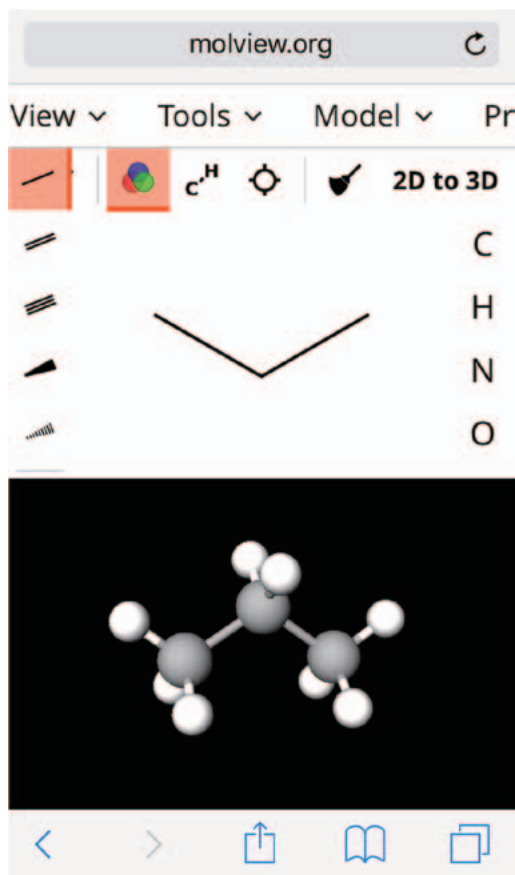


図4 MolViewで作成したプロパンの構造式と3Dモデル

ンの構造式をクリアすることができる。構造式を描く方法は、基本的に一般的な構造式エディタを利用する場合と同様である。画面左側には単結合や二重結合といった結合線が並んでいるが、上にスワイプするとベンゼンや五員環などの骨格構造が現れる。例えば、単結合を選択して画面上をタップすれば、炭素-炭素の単結合を持つエタンが描かれるし、エタンの端を再度タップすると、3つの炭素を持つ直鎖アルカンであるプロパンがで

きあがる。

こうして描いた構造式を3Dに変換するためには、画面上部のツールメニューを左にスワイプして現れる [2D to 3D] ボタンをタップする。すると、構造式エディタに描かれた分子の3Dモデルが画面下部に表示される(図4)。化学を専門としない学生は、二次元の構造式から三次元構造をイメージしにくいという場合が多いが、MolViewを用いることで極めて容易に分子の立体構造を作り出すことができる。

## 2.2 外部データベースを用いた検索機能

MolViewでは、構造式を自分で描かなくても、物質の英語名称から構造式及び3Dモデルを作図することができる。画面上部の検索窓に任意の物質名を入力すると、PubCem, Crystallography Open Database, RCSBのデータベースから物質を探し出し、自動的に構造式とその3Dモデルが描画される。また、物質名を途中まで入力すると候補となる物質がリストアップされる機能も備わっているため、物質名を正確に覚えていなくても的確に目的の物質を探し出すことができる。例えば、グルコースを出力したい場合は検索窓にGlucoseと入力すればよいが、Gluまで入力すると、検索窓の下にGlucose, Glucagon, Gluconic acid と

いった候補物質が並ぶので、その中から Glucose を選択すればよい。

検索機能は、キラル分子を出力する際に有用である。例えば、L-alanine と D-alanine の立体配座の違いを見たいが、キラル中心の立体配座がわからないために構造式を描けない場合がある。そうした時は、検索機能を用いて L-alanine と入力すれば L-alanine の 3D モデルが、D-alanine と入力すれば D-alanine の 3D モデルを得ることができる。

### 2.3 Moodle との連携

MolView では、作成した 3D モデルをウェブサイトに埋め込むための HTML コードを取得することができる。画面上部の [Tools] メニュー内にある [Embed] ボタンを押すと、現在表示されている 3D モデルの HTML コードが現れる。これをコピーして任意のウェブサイトに貼り付けると、MolView 以外のサイトに 3D モデルを埋め込むことができる。

本学が 2009 年度よりオンライン教材提示システムとして採用している Moodle では、HTML コードの埋め込みが可能であるため、MolView で作成した 3D モデルを Moodle 上でも表示させることが可能である。例として、Moodle のトピック内に新規ページを作成し、そこにカフェイン分子の 3D モデルを埋め込



図5 Moodle のページ上に埋め込んだ MolView の 3D モデル (カフェイン)

んだものを図5に示した。HTML コードは、ページコンテンツ入力欄の [HTML] ボタンを押したうえで入力する。こうして埋め込まれた 3D モデルは、MolView と同様に向きやサイズを変えながら閲覧することができる。Moodle で提示しているレジュメなどの授業資料と対応付けて教員側が 3D モデルを用意しておくことで、テキストやレジュメでは伝えきれない分子の立体構造を学生に提供することができる。同様の機能は、Moodle に Jmol プラグイン<sup>5)</sup>を導入することで実現可能であるが、この場合は Moodle への Jmol プラグインの実装、表示させたい分子の PDB や MOL ファイルのアップロードなどの準備が必要であり、MolView を利用した方がより簡便である。

### 3. まとめ

本稿では、立体化学教育のための MolView の活用方法を紹介した。二次

元的な構造式から三次元の3Dモデルを作成できること、外部データベースから物質を検索して3Dモデルを作図できること、さらにMoodle上に3Dモデルを埋め込める点など、特別な知識を持たなくても直感的な操作で3Dモデルの作成・利用が可能である。学生に利用させるうえで、iPhoneのようなスマートフォンでの操作も可能なこと、そしてアプリケーションのインストールが必要なく無料で使える点など、化学を専門としない学生にも扱いやすい点がMolViewの最大のメリットである。

今回は詳しく取り上げなかったが、ここで紹介した機能以外にもMolViewには様々なツールが用意されている。例えば、分子の静電ポテンシャルを表示したり、NISTのデータベースを利用したIRやマススペクトルを得ることもできる。機能の詳細については、公式のマニュアル<sup>6)</sup>を参照されたい。

## 参考文献

- 1) 村橋俊一ほか：ボルハルト・ショアー 現代有機化学第4版（上），p. 43，化学同人，1996.
- 2) 富岡清ほか：ブルース有機化学第5版（上），p. 230，化学同人，2004.
- 3) Molecular Graphics Software Links,  
[http://www.rcsb.org/pdb/staticHelp.do?p=software/software\\_links/molecular\\_graphics.html](http://www.rcsb.org/pdb/staticHelp.do?p=software/software_links/molecular_graphics.html)
- 4) Herman Bergwerf: MolView: an attempt to get the cloud into chemistry classrooms, ACS CHED CCCE Newsletter, 2015.  
<http://confchem.ccce.divched.org/2015FallCCCEENLP9>
- 5) Jmol/JSmol filter.  
[https://moodle.org/plugins/filter\\_jmol](https://moodle.org/plugins/filter_jmol)
- 6) MolView manual.  
<http://molview.org/docs/manual.pdf>

