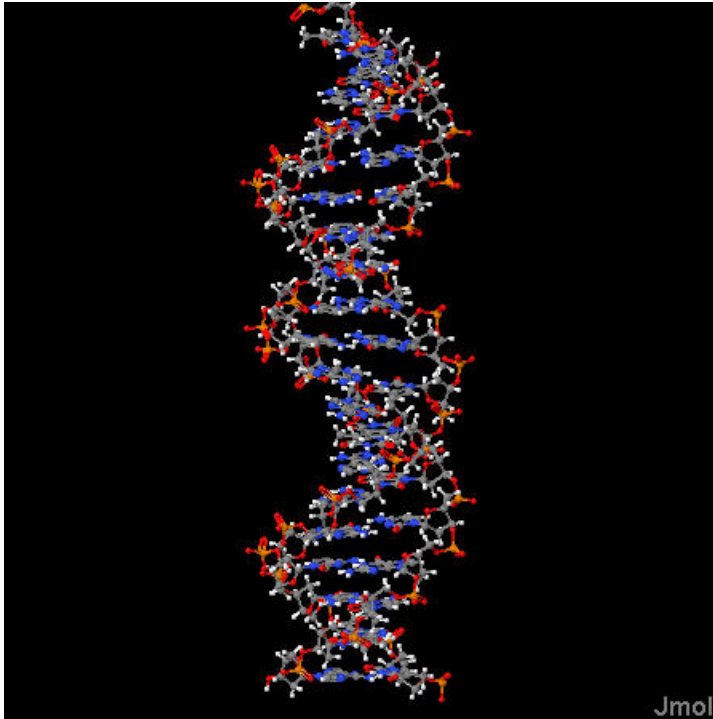


Moodle での Jmol リソースの使い方

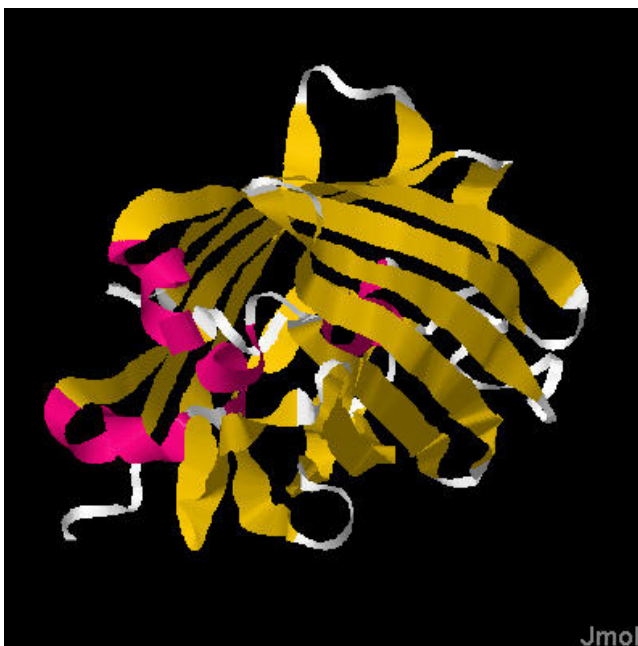
1. 表示例

分子構造データファイルを指定して、分子の 3 次元構造と分子軌道などを表示することができます。

1.1. DNA - PDB 形式データファイル



1.2. タンパク質の表示 - GFP の一種

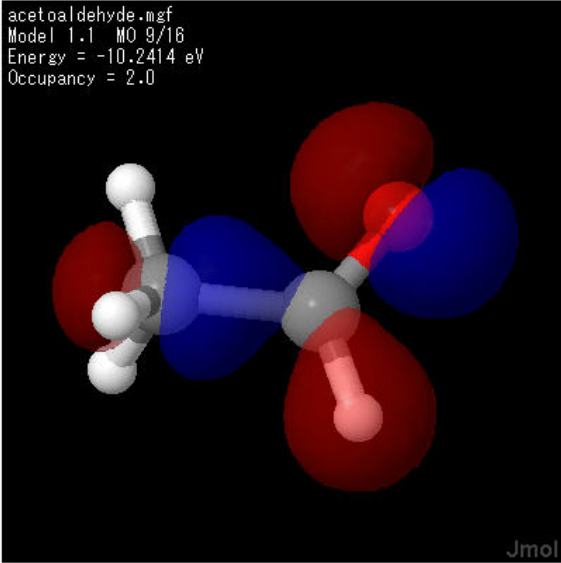




1.3. 波動関数の表示ーアセトアルデヒド

UTMS2 ▶ 波動関数の表示-アセトアルデヒド このリソースを更新する

HHOMOとLUMOの分子軌道の形状を観察し、求核置換反応の起きやすい部位について考察しなさい。

mo next で次の軌道、mo previous で一つ前の軌道の波動関数を表示します。Jmol Appletの操作法についてはHelpを参照してください。



原子 オフ 20% 100% 水素 回転  

2. リソースの追加

2.1. 編集モードの切り替え

「編集モード開始」をクリックし、編集モードに切り替えます。

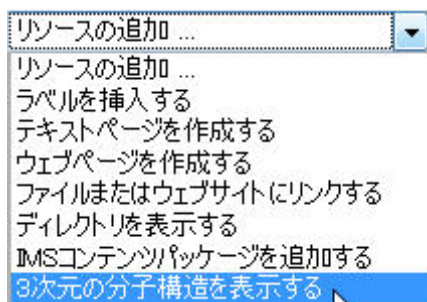
サンプルコース2 あなたは **Kihara Hiroshi** としてログインしています (ログアウト)

UTMS2 ▶ RS0009_1 ? ロールを切り替える ...

<p>人</p> <p> 参加者</p> <p>活動</p> <ul style="list-style-type: none">  課題  リソース  小テスト  フォーラム  フィードバック <p>フォーラムの検索</p>	<p>トピックアウトライン</p> <p> ニュースフォーラム</p> <p>1 <input type="checkbox"/></p> <p>第1週の課題</p> <ul style="list-style-type: none">  Textファイルのアップロード  テキストファイルへのリンク  ファイルのアップロード-PDFファイルの表示  Webサイトへのリンク 	<p>最新ニュース</p> <p>新しいトピックを追加する... (新しいニュースはありません。)</p> <p>直近イベント</p> <p>直近のイベントはありません。</p> <p>カレンダーへ移動する... 新しいイベント...</p>
--	--	---

2.2. リソースを追加

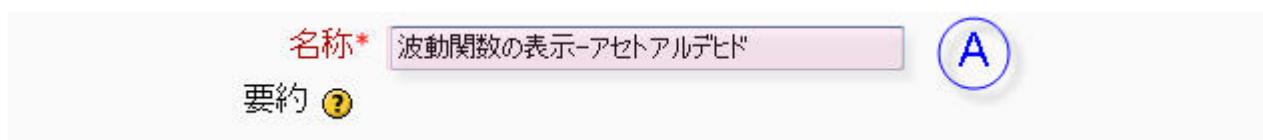
「リソースの追加」から「3次元の分子構造を表示する」を選択します。



2.3. リソースの編集画面

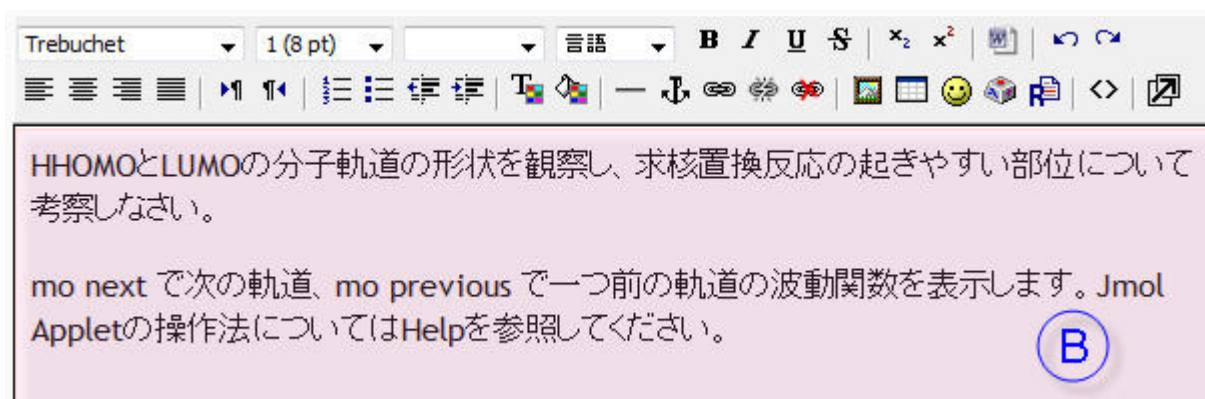
A. 名称

名前を入力します。



B. 要約

短い説明を入力します。



C. ロケーション

ファイル名を指定します。ファイルはあらかじめアップロードされている必要があります。アップロードされていない場合は、「ファイルを選択またはアップロードする」をクリックしてファイルをアップロードした後、選択します。



Jmol がサポートしているファイルフォーマット

ADF - Amsterdam Density Functional	MOLDEN
AIMS	MOLPRO(XML)
Argus(XML)	Mopac
Chem3D(XML)	MopacGraphF
CASTEP	NWCHEM
CIF	Odyssey
CML(XML)	Odyssey(XML)
CSF	PDB
CUBE	PQR
FoldingXYZ	PSI
GAMESS	QCHEM
Gaussian *	SHELX
GhemicalMM	Spartan
GRO	SpartanSmol
HIN	V3000
Jaguar	WebMO
JME	Wien2k
MDTOP, MDCRD	XYZ
MOL, MOL2	XYZ+vibABINIT

* バージョンによって読み込めない場合もあります。

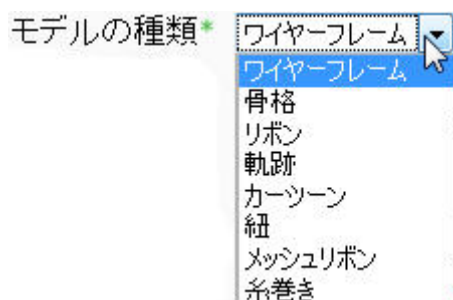
D. ウィンドウの大きさ

プルダウンメニューから表示ウィンドウの大きさを指定します。(ピクセル単位)

E. モデルの種類

プルダウンメニューからモデルの種類を選択します。

コントロールを表示 原子の表示サイズ 水素 単位格子 回転 コンソールを開く



結合の太さの初期値は、0.15 Åとなっています。

F. 色指定の形式

プルダウンメニューから色指定の形式を選択します。



G. コントロールを表示

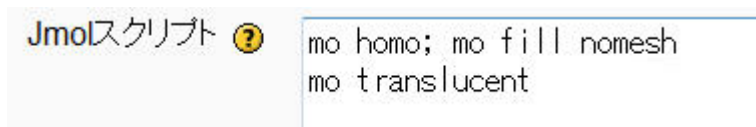
ウィンドウの下部に表示するコントロールを指定します。

コントロールを表示 原子の表示サイズ 水素 単位格子 回転 コンソールを開く

H. Jmol スクリプト

必要に応じてスクリプトを記入します。一行に複数のコマンドを記入する場合は、; (セミコロン) で区切ってください。

分子軌道や振動計算の結果を含むデータを読み込ませても、そのままでは構造だけしか表示されません。分子軌道や振動計算の結果を表示するには、スクリプトを使用して指定する必要があります。1.3 の図は、下記のように指定して出力したものです。



Moodle 上でリソースが表示された際に、利用者が Jmol コンソールからスクリプトを入力して指定することもできます。

※ Jmol スクリプトについては、4. 参考文献の項を参照してください。

[Jmol スクリプト について](http://www3.u-toyama.ac.jp/kihara/soft/jmol/jmol-script.html) <http://www3.u-toyama.ac.jp/kihara/soft/jmol/jmol-script.html>

[Jmol interactive scripting documentation](http://chemapps.stolaf.edu/jmol/docs/) <http://chemapps.stolaf.edu/jmol/docs/>

I. ウィンドウ

同一ウィンドウで表示するかあるいは新しいウィンドウを開いて表示するかどうかを設定します。

J. 一般モジュール設定

・可視性

学生が課題を閲覧できるか否かを「表示」／「非表示」で設定します。通常は「表示」のままにします。

・ID ナンバー

ID ナンバーフィールドは空白のままでもかまいません。

2.4. 保存

設定を終えたら、「保存してコースに戻る」または「保存して表示する」をクリックします。

3.3. ラジオボタンなどによるコントロールの利用

Applet ウィンドウの下部に、ラジオボタンなどによるコントロールが表示されている場合はそれを利用します。

3.4. Jmol メニューの表示

ウィンドウ右下の Jmol のロゴをクリックするかまたは Ctrl キーを押しながらウィンドウ内をクリックしてください。

3.5. コンソールウィンドウの表示

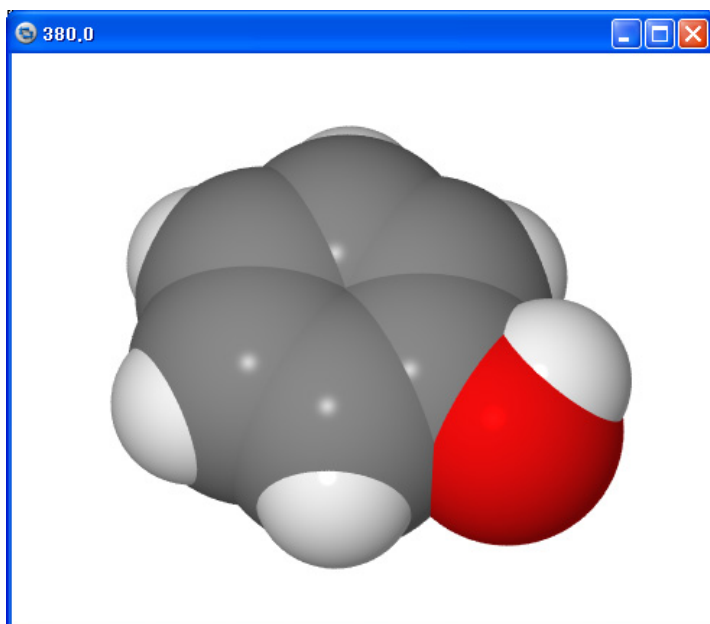
Jmol メニューを表示し、"Console "を選択してください。ウィンドウ下部に「コンソールを開く」ボタンが表示されている場合はそれをクリックしてください。

スクリプトに関する情報については参考文献の記載を参照してください。

3.6. 分子モデルの種類の変更

Jmol メニューから、Render - Scheme を選び、"CPK Spacefill", "Ball and Stick", "Sticks", "Wireframe" のうちのいずれかを指定します。

タンパク質などの場合は、Style - Structures を選び、"Off", "Backbone", "Cartoon", "Cartoon Rockets", "Ribbons", "Rockets", "Strand", "Trace" のうちのいずれかを指定することができます。



3.7. 距離と角度の測定

3.7.1. 測定結果を残さずに値を表示させる場合

- 2 原子間の距離：
 1. 最初の原子をダブルクリックします。
 2. 目的原子の上にマウスカーソルを移動させます。
- 3 原子間の角度（結合角）
 1. 最初の原子をダブルクリックします。
 2. 2番目の原子をクリックします。
 3. 3番目の原子の上にマウスカーソルを移動させます。
- 4 原子間の角度（二面角）：
 1. 最初の原子をダブルクリックします。
 2. 2番目の原子をクリックします。
 3. 3番目の原子をクリックします。
 4. 4番目の原子の上にマウスカーソルを移動させます。
- 測定の途中でキャンセルするには、マウスカーソルをウィンドウの枠外に移動します。

3.7.2. 測定結果を残す場合

- 2 原子間の距離：
 1. 最初の原子をダブルクリックします。
 2. 2番目の原子をダブルクリックします。
- 3 原子間の角度（結合角）
 1. 最初の原子をダブルクリックします。
 2. 2番目の原子をクリックします。
 3. 3番目の原子をダブルクリックします。
- 4 原子間の角度（二面角）：
 1. 最初の原子をダブルクリックします。
 2. 2番目の原子をクリックします。
 3. 3番目の原子をクリックします。
 4. 4番目の原子をダブルクリックします。

測定値の表示を消すには、Jmol のウィンドウを再表示してください。

3.8. Slab (厚切り) 機能 – 断面の表示

Script Editor のウィンドウを開き、**slab on** と入力し、**Run** ボタンをクリックします。

機 能	左(主)ボタン
前から	Ctrl + Shift キーを押した状態で垂直方向にドラッグする
後から	Ctrl + Shift キーを押した状態でダブルクリックし、そのまま垂直方向にドラッグする
Slab を移動する	Alt + Ctrl + Shift キーを押した状態で垂直方向にドラッグする



4. 参考文献

Jmol に関する詳しい情報については右記を参照してください。 <http://jmol.sourceforge.net>

コンソール・ウィンドウで利用できるスクリプトに関しては下記を参照してください。

<http://chemapps.stolaf.edu/jmol/docs/?ver=11.0>

日本語による主なスクリプトに関する説明については下記を参照してください。

<http://www3.u-toyama.ac.jp/kihara/soft/jmol/jmol-script.html>

木 原 寛 (富山大学 総合情報基盤センター)