

## 「分子に触れて力を感じる」 体験型化学教材『HaptiChem (ハプティケム)』を公開

平成 19 年 3 月 15 日

国立情報学研究所

### 概 要

国立情報学研究所（所長：坂内 正夫(さかうち まさお) 以下、NII 東京都千代田区一ツ橋）では、化学と情報学の融合（化学情報学：ケモインフォマティクス）により、化学の重要な要素である「分子」に触れて力を感じることでできる体験型化学教材『HaptiChem (ハプティケム)』を研究開発し、理科教育の教材として、平成 19 年 3 月 15 日（木）から公開します。

『HaptiChem』は、力覚デバイス SPIDAR（スパイダー）（東京工業大学 精密工学研究所 佐藤 誠(さとう まこと) 教授）を利用して、3次元空間で分子を自由に操り、分子の間に働く力を視覚と力覚により疑似体験することを実現したシステムです。グラフィックスによる可視化（＝見る）に加え、『可触化』（＝触る）を組み合わせた感覚の融合効果によって、現実には見たり触ったりすることができない化学の世界を体験できる、人と化学情報の新しいインタフェースとして、利用者の考察や理解を促進し、創造を支援することを目指します。

分子の構造や性質を理解することは、化学や生命科学などの、分子を取り扱う幅広い自然科学分野において基本的で不可欠な要素であり、理科教育の最も重要な出発点の 1 つです。HaptiChem は、分子に対する学習者の好奇心を引き出し、興味をもって分子学習に取り組み、理解を深めることができる教材を指向してデザインされています。

### 化学におけるモデルと視覚化

分子やその現象といった目に見えない対象や概念を理解し考察する化学分野においては、視覚的な表現やモデルは重要です。化学構造式やプラスチック分子模型、分子軌道図などはその代表であり、思考や情報伝達のための不可欠な手段として用いられています。これらを目的に応じてコンピュータで視覚化するグラフィックスシステムも様々なものが開発され、研究や開発の現場で利用されています。HaptiChem は、ここに『可触化』（＝触る）という感覚を加えることで、人が化学情報にアクセスする手段の幅を広げることを目指すシステムです。

### 化学学習と分子

分子の構造や性質を理解することは、化学や生命科学などの、分子を取り扱う幅広い自然科学分野において基本的かつ不可欠な要素であり、理科教育の最も重要なスタート地点

です。この段階で分子に対する学習者の知的好奇心を引き出し、理解を促すことは重要であり、興味と進路の方向を決める大きな要因となりえます。このためには、学習者が興味をもって分子学習に取り組む、理解を深め、考察の助けとなる教材が望まれます。現象を視覚的にとらえることや、対象に触れて体験することは、学習者の興味を引き出し、思考のきっかけをつくるのに有効であると考えられます。実験を通じて現象を体験し、分子構造図等により描画しモデル化する作業過程や、写真やカラー図が多く導入された高校や大学向けの化学の教科書が増加傾向にあることなども、様々な感覚を刺激する体験の重要性を示しているといえます。

HaptiChem は、『分子間力の体感』を通じて、分子についての興味を引き出し、理解を助け、考える手がかりを与える教材を指向してデザインされています。

### HaptiChem システム

HaptiChem システムは、力覚デバイスを利用し、分子の3次元空間における操作と、それに応じて変化する分子間に働く力とその方向を、画面に表示される分子と物理化学的数値を見ながら同時に力覚デバイスに出力される力を感じることで、すなわち視覚と力覚の連携により体感できる環境を提供します。

HaptiChem の公開版 (Ver. 069) は、最も基本的な分子間力の学習教材で、希ガス分子間のファンデルワールス相互作用の体験を行うことができます。ファンデルワールス相互作用の計算には、Merck Force Field の非結合相互作用パラメータを用いています。Windows XP 上で稼動可能です。

力覚デバイスとしては、SPIDAR (スパイダー) とよばれる、東京工業大学 精密工学研究所の佐藤誠教授の研究室で開発されたデバイスを利用しています。HaptiChem に必要なデバイスの機能の SPIDAR へのフィードバックも随時行い、共同で開発を進めています。

可視化部分は、化学用グラフィックスオープンソースライブラリ『ケモじゅん』(国立情報学研究所 佐藤 寛子(さとう ひろこ) 助教授) とマルチメディアオープンソースライブラリ『じゅん』(株式会社 SRA 先端技術研究所) を用いて構築されています。『ケモじゅん』は、平成 17 年 12 月 26 日にオープンソースとして無償公開を開始して以降(同年 12 月 13 日にプレスリリースを行いました)、定常的なアクセスが続いており、平成 19 年 2 月 28 日までに公開サイトからダウンロードされたファイルの総件数は 68,580 件に達しました。



## HaptiChem の特長

### 1. 純国産のシステム

HaptiChem ソフトウェアは、化学系グラフィックスオープンソースライブラリ『ケモじゅん』（国立情報学研究所）と3次元マルチメディアオープンソースライブラリ『じゅん』（株式会社 SRA 先端技術研究所）を基盤に構築されています。力覚デバイス部の SPIDAR（東京工業大学精密工学研究所）も含めて、全て国産の技術で構築された、「純国産」のシステムです。

※『ケモじゅん』 <http://research.nii.ac.jp/~cheminfo/ChemoJun/>

※『じゅん』 <http://www.sra.co.jp/public/sra/technical/jun/index.html>

### 2. 人の感覚と科学的な正確さの接点を考慮したデザイン

視覚と力覚を組み合わせた分子モデルを化学研究や教育に実践的に活用するためには、化学分野に特化した体感システムの適用範囲と限界を知る必要があります。つまり、分子間力は実際には感じることでできない力なので、どこまでが正確で、どこからが仮想的（バーチャル）な世界であるかの線引きを明確にすることが極めて重要です。

一方で、人の感覚に効果的に働くための表示や力の表現を満たしていることも必須です。HaptiChem は、基本的な操作実験により得られたデータからソフトウェアとデバイスの要件を求め、これらの結果に基づいてシステム的设计を行うことで、人の感覚に有効に働くシステムを実現しています。また、実際の物理化学的数値と可視化・可触化されている値との間の関係を示すことで、実データと仮想体験との違いを利用者が意識できるようにデザインされています。

### 3. 分子の3次元空間での操作が可能

通常、分子モデルは3次元空間で操作するものですが、従来の2次元マウスだけでは3次元空間内での自由な移動や回転は困難でした。この2次元マウスの代わりに3次元マウス=SPIDAR を利用することで、x, y, z 軸の任意の方向への回転や移動の同時操作などが容易に行えるようになり、フラストレーションなく分子を自由に操ることを可能にしています。

### 4. 分子間力の体感

分子やその現象といった、目に見えない対象や概念を理解し考察する化学分野では、視覚的な表現やモデルは重要です。分子の3次元的な構造特徴を理解し考察するためのプラスチック分子模型や、分子構造の様々な形状や物理化学的特性を可視化するグラフィックスシステムなど、化学分野では様々なメディアが利用されています。分子の間に働く力は、化学の基本的な現象の1つですが、従来のメディアだけでは表現が難しい物理量でした。

URL:<http://www.nii.ac.jp/>

National Institute of Informatics

HaptiChem は、分子間力の引力と斥力を、ポテンシャルや力の関数形だけではなく、力の方向と大きさの違いで表現することを実現しています。

### HaptiChem の公開

HaptiChem のソフトウェアを平成 19 年 3 月 15 日より以下のサイトから無償公開を開始します。

公開サイト：<http://research.nii.ac.jp/~cheminfo/HaptiChem/>

力覚デバイスの SPIDAR-G 本体は、日本国内の高等学校での教育目的に限り、期間限定で無償貸出しを実施します。お問い合わせ先は以下にお願いします。

[cheminfo@nii.ac.jp](mailto:cheminfo@nii.ac.jp) (国立情報学研究所 化学情報学研究室)

#### ■ 本件問い合わせ先

佐藤 寛子(さとう ひろこ) 国立情報学研究所情報学プリンシプル研究系 助教授

---

取材窓口／その他問合せ

国立情報学研究所 (NII: エヌアイアイ)

国際・研究協力部 広報普及課 企画・広報係 担当: 小野・早川  
〒101-8430 東京都千代田区一ツ橋 2-1-2 (学術総合センター 18 階)

TEL: 03-4212-2135 (直通) FAX: 03-4212-2150

e-mail: [kouhou@nii.ac.jp](mailto:kouhou@nii.ac.jp)

URL: <http://www.nii.ac.jp/>