

化学構造式フィルタープラグイン ChemJaxの開発

2018.02.23

元東京家政大学 三浦 謙一

東京家政大学 松木 孝之

化学式記述の背景

- * 数学や物理学： TeXを使って資料や論文書かれている
- * 化学の分野： TeXが余り普及していない
- * 化学式・イオン式、化学反応式、構造式(ベンゼン環等)
- * TeXパッケージ
 - * mhchem : 化学式の記述 mhchem.tex mhchem.sty
 - * chemfig : 化学構造式の記述 chemfig.tex chemfig.sty
 - * TeX用描画パッケージTikZを使って化学構造式を描画

化学式記述の背景

- * 化学の分野ではTeXが余り普及していない

- * TeXが活用されない理由

- * なじみがない： なんて読むの？

 - * テック or テハ or てふ



蝶々



バッハ

TeX

- * TeXの使い方、環境設定が難しそう

 - * 種類： TeX、LaTeX、PLaTeX

 - * `yum install texlive-latex texlive-east-asian dvipdfmx`

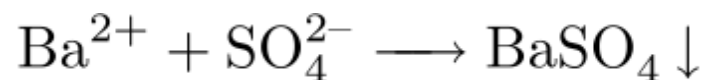
Moodleにおける化学式記述

現状では

- * MathJax: 数学記述用JavaScriptライブラリ
- * MathJaxの拡張として: Mathjax Extension
 - * mhchem.js: JavaScriptライブラリ
 - * MathJaxプラグインに組み込み可
 - * Mhchemなので化学構造式の描画不可

ベンゼン環や
枝分かれの
構造

$\forall \text{ce}\{\text{Ba}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} \rightarrow \text{BaSO}_4 \downarrow\}$



MathJax Extension

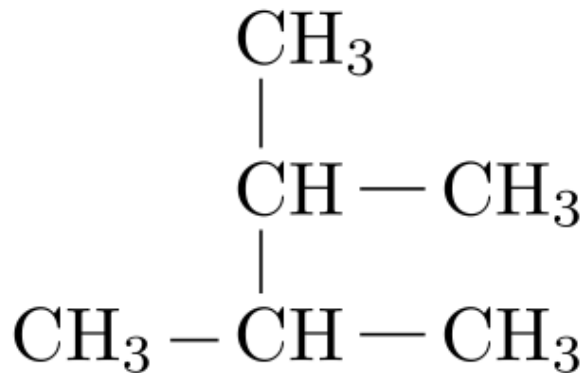
- * **MathJaxの拡張として： JavaScriptライブラリ**
 - * **Third Party Extensions**
 - * <https://github.com/mathjax/MathJax-third-party-extensions>
 - * **mhchem.js**
 - * <https://github.com/mhchem/MathJax-mhchem/blob/master/mhchem.js>
 - * **xypic.js**
 - * <https://github.com/sonoisa/XyJax/blob/master/extensions/TeX/xypic.js>

ChemJax登場

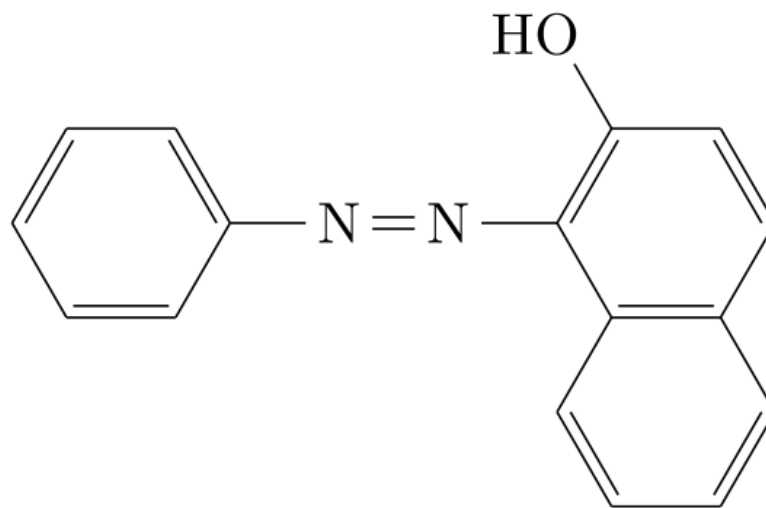
- * 複雑な化学構造式を描画するためのMathJax拡張タイプの Moodle Plugin
- * (1) Plugin 名 : ChemJaxプラグイン `filter_chemjax`
- * (2) Plugin タイプ : フィルタ
- * (3) 主な機能 :
 - * 普通の化学式や化学反応式に加え、
 - * 従来難しかった枝分かれのある構造式や環状構造式を描画できる

ChemJax登場

* 枝分かれのある構造式



* 環状構造式



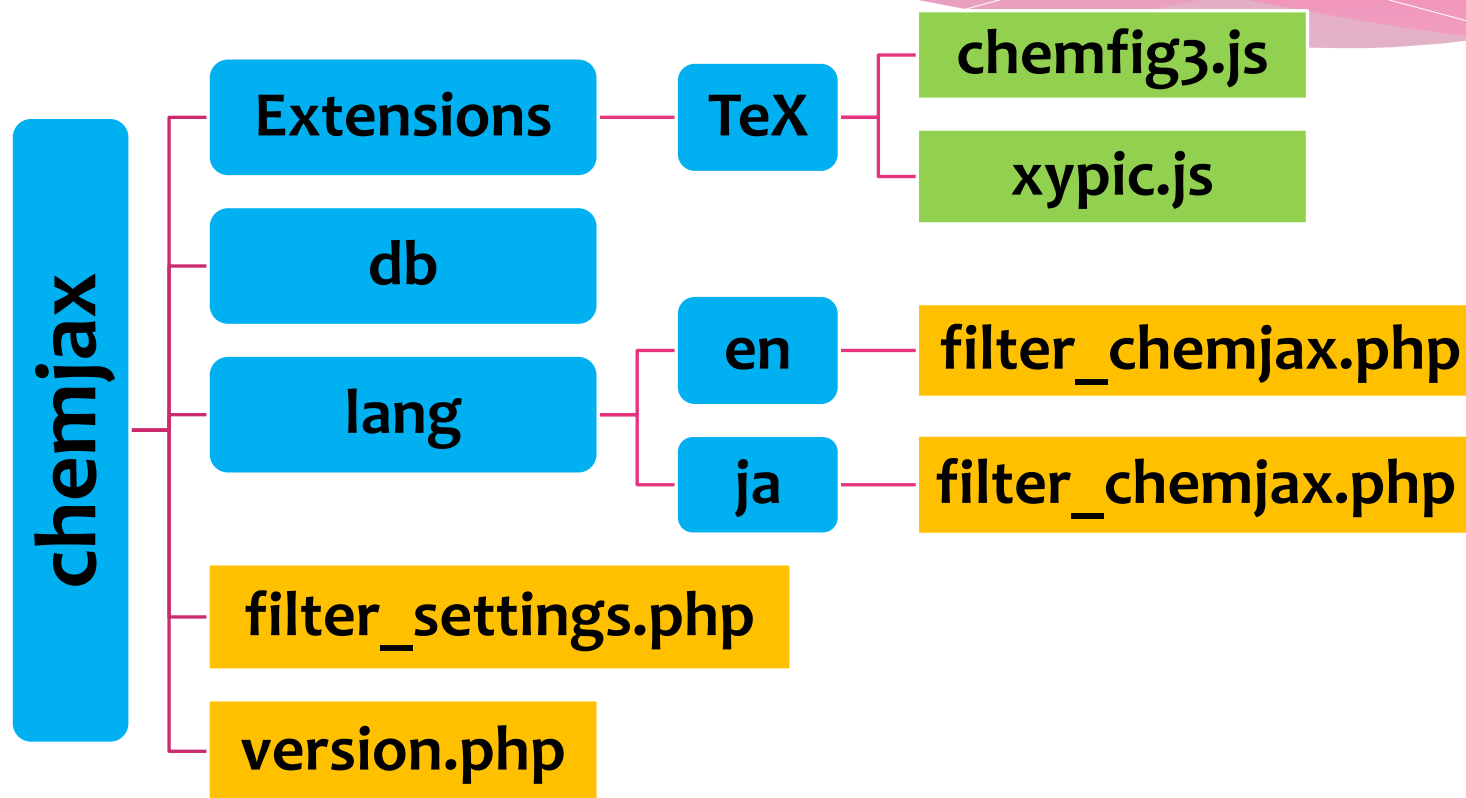
ChemJax登場

- * MathJax拡張として動作
- * TeX変換 : mhchem 応用
- * 描画エンジン : xy-pic.js 採用
- * 化学構造式コマンド : Chemfig 準拠
- * 添字やイオンの電荷入力 : mhchem の自動認識あり
 - * $\text{CH}_3 \Rightarrow \text{CH}_3$: Chemfig CH_3 : mhchem, ChemJax
 - * $\text{SO}_4^{2-} \Rightarrow \text{SO}_4^{2-}$: mhchem, ChemJax

ChemJax

ChemJax の構成

filter_chemjax.zip



ChemJax コマンド

結合のオプション

結合の種類

結合の長さ

結合元原子の n 番目

結合先原子の n 番目

-[角度, 長さの倍率, 原子のFrom番目, 原子のTo番目]

結合の角度

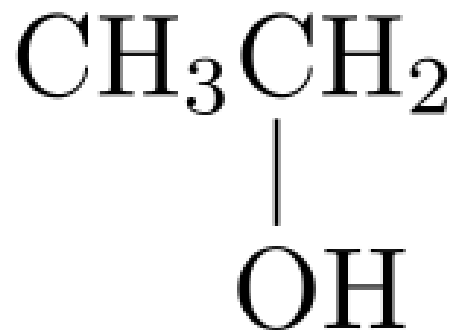
省略: 0°

省略すると 1

CH₃CH₂ -[: -90,,3,]OH



CH₃CH₂ -[: -90,1,3,1]OH



ChemJax コマンド

結合のオプション

* 結合の種類 と 指定コマンド

* 単結合 — : —

* 二重結合 = : =

* 三重結合 ≡ : ≡

ChemJax コマンド

結合のオプション

* 角度の指定

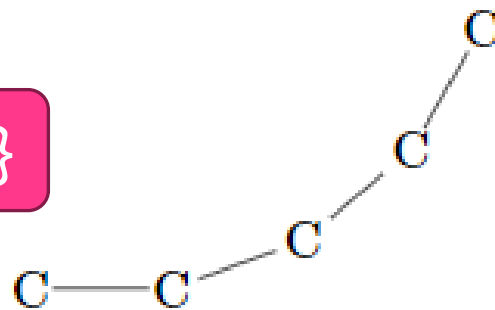
* 45° の倍数 : `-[2]` 45° の何倍方向か 0~7

* 絶対角度 : `-[:60]` ⇒ 60° `-[:-90]` ⇒ -90°

* 相対角度 : `-[:20]`

* そこまでの結合角からの相対的な回転

```
¥c|x{C-C-[::20]C-[::20]C-[::20]C}
```



入力規則

下線は省略可

* **添字**: 下線は省略できる

* CH_3 → CH3

* H_2O → H2O

* **結合の前**: 半角スペース入れる

* CH3_-OH

* CH3CH2_-OH

入力規則

多価のイオンの価数の
前には^を打つ

* イオン式

* SO_4^2-

⇒ SO4^2-

SO₄²⁻

* NH_4+

⇒ NH4+

NH₄⁺

* Cr_2O_7^2- ⇒ Cr2O7^2-

Cr₂O₇²⁻

省略可

入力規則

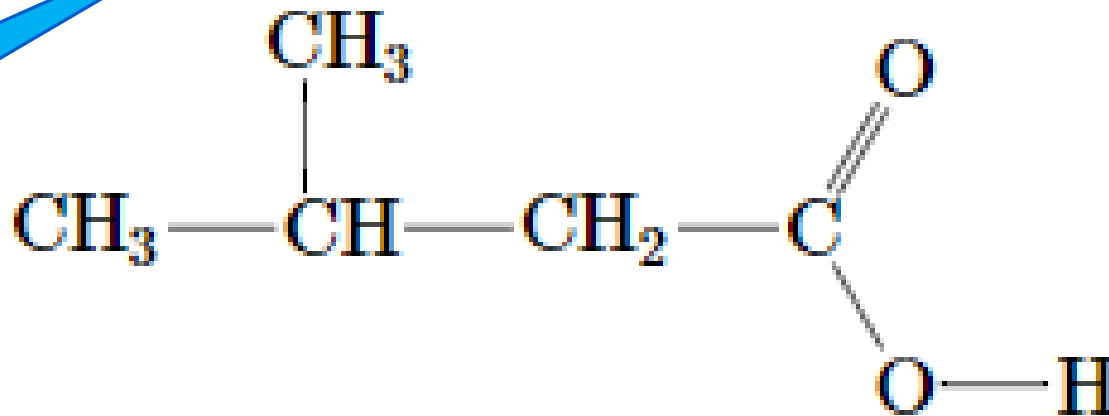
* 入力例

* ¥cjsx{CH_3-CH(-[2]CH_3)-CH_2-C(=[:60]O)-[:60]O-H}

半角スペース

CH₂でOK

CH₃でOK

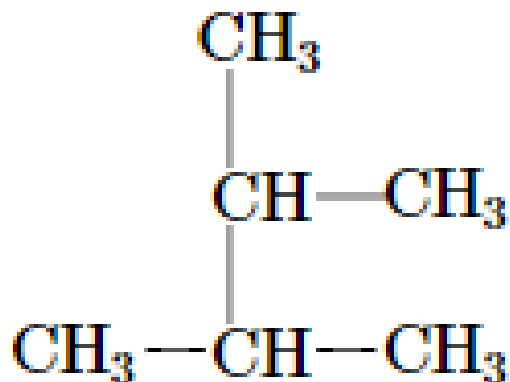


入力規則

* 枝分かれの記述

* () で括ると、その部分が枝になる **ネストOK**

* $\text{\%cjax}\{\text{CH}_3_-\text{CH}_(-[2]\text{CH}_(-\text{CH}_3)_-[2]\text{CH}_3)_- \text{CH}_3\}$

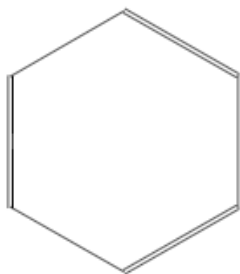


化学構造式の例

* 環状構造

* $\forall c_j x \{ \text{[:-30]}_{\perp} = [::60]_{\perp} - [::60]_{\perp} = [::60]_{\perp} - [::60]_{\perp} = [::60] \}$

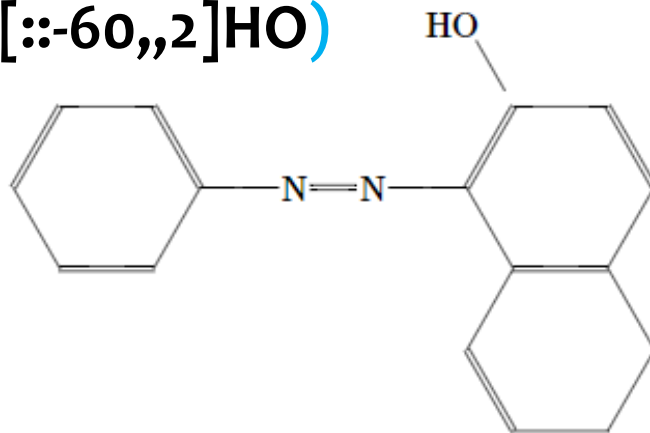
* $\forall c_j x \{ \text{[:-30,0]}_{\perp} - [::-30]_{\perp} = [::60]_{\perp} - [::60]_{\perp} = [::60]_{\perp} - [::60]_{\perp} = [::60] \}$



化学構造式の例

* 環から環や枝を伸ばす

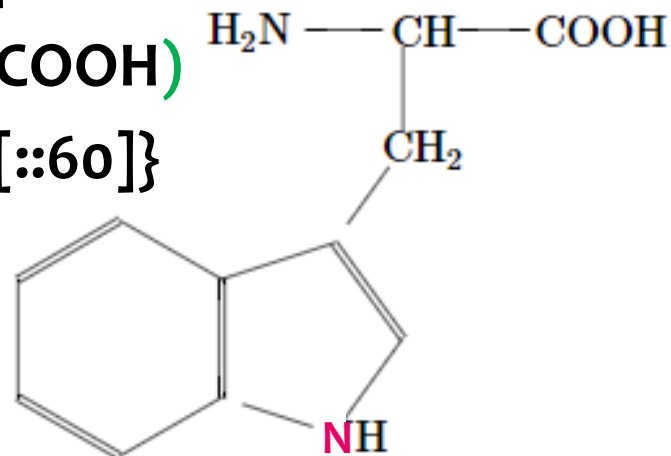
* $\text{c1ccc(cc1)-[::60]-[::60](-[::60,0.7]N=[,0.5]N$
 $-[,0.7]-[::60](-[::60]=[::60]-[::60]-[::60]-[::60])$
 $=[::60]-[::60]=[::60]-[::60](-[::60,,2]HO)$
 $=[::60])=[::60]-[::60]$
 $=[::60]-[::60]}$



化学構造式の例

* 環上の原子を明示する

```
* %cix{%vphantom{X}}_=[:-30]_-[::60]_(-[:-18]NH_-[::72,,1]
_=[::72]_(-[::72]CH2_-[2]CH_(-[4]H2N
%phantom{X}%phantom{X})_-[0]COOH)
_-[::72])_=[::60]_-[::60]_=[::60]_-[::60]}
```



ChemJax Config

Chemjax
directory 指定

サイト管理 > プラグイン > フィルタ >
MathJax MathJax設定

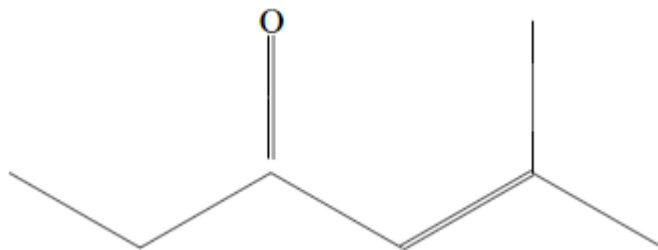
- * `MathJax.Ajax.config.path["ChemJax"] = "http://Your Moodle Site/filter/chemjax/unpacked/extensions/TeX";`
- * `MathJax.Hub.Config({`
- * `config: ["Accessible.js", "Safe.js"],`
- * `errorSettings: { message: ["!"] },`
- * `skipStartupTypeset: true,`
- * `messageStyle: "none",`
- * `TeX: {`
- * `extensions: ["[ChemJax]/chemfig3.js", "[ChemJax]/xypic.js",`
- * `"AMSMath.js", "AMSsymbols.js", "noErrors.js",`
- * `"noUndefined.js"]`
- * `}`
- * `});`

Chemjaxの
Javascript 指
定

化学式描画 その他例

* 炭素原子の省略

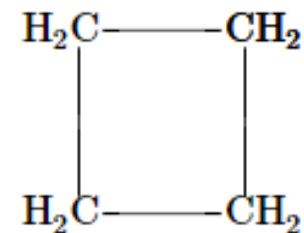
- * 大学以降の化学で標準的に用いられる、骨格のみで表した構造式
- * CC(=O)C=C(C)C



化学式描画 その他例

* 環状構造の記述

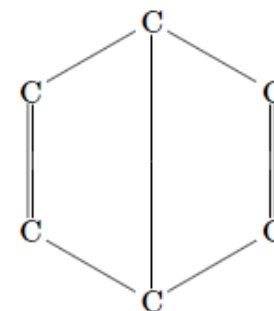
* $\forall \text{c} \text{ j} \{ \text{H}_2\text{C} \text{ (} [-2,2,2] \text{H}_2\text{C} \text{ } [-0]\text{CH}_2 \text{ } [-2]\text{CH}_2 \text{) } \text{-CH}_2 \}$



* 複数の環状構造を持つ分子

* デュワーベンゼンの例

* $\forall \text{c} \text{ j} \{ \text{C} \text{ =} [6]\text{C} \text{ } [-::60]\text{C} \text{ } [-::60]\text{C} \text{ =} [::60]\text{C} \text{ } [-::60]\text{C} \text{ (} [-2,2]\forall \text{phantom}\{X\} \text{) } \text{ } [-::60]\forall \text{phantom}\{X\} \}$



ChemJax

DemoコースでExperience

Moodle Plugin デモページ

化学構造式フィルタプラグイン ChemJax

Experience

Input

icjx{CH3}

Preview

CH₃

ChemJaxを使ってみよう

下にある化学式コマンドを、Inputに入力してください。
Previewに化学構造式が描画されます。
Copy & PasteもOKです。

* MAJ東京支部 / 東京ムードル交流会

* <http://tokyo.moodlejapan.org/demo/chemjax.html>

今後の課題

- * **立体化学表記**



- * $\langle, \rangle, \langle :, \rangle :$ $\forall \text{c}jx\{A \langle B \rangle C \langle : D \rangle : F\}$

- * **電子式(Lewis構造式)の機能追加**

- * $\forall \text{lewis}\{0.2:4.6.,N\}$



- * **Polygon**命令対応: $*6(-===)$

- * **Preview**機能

- * **絶対必要** \Rightarrow **Atto Editor**段階で描画確認

- * **Microsoft IE、Edge** 対応

参考データ

参考データ

- * TeX Alchemist Online
 - * chemfigパッケージによる構造式描画
 - * <http://doratex.hatenablog.jp/entry/20141212/1418393703>

ChemJax

さいごに

*Thank you
for your time!*

Contact : miura-k@tokyo-kasei.ac.jp
matsuki@tokyo-kasei.ac.jp