



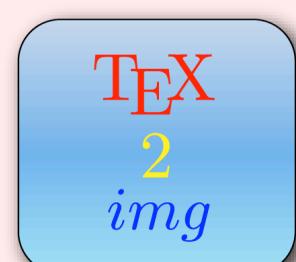
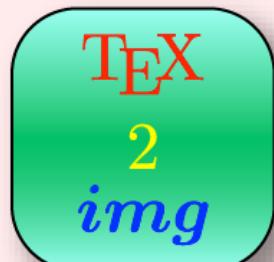
こんにちは！

アセトアミノフェンです！

Acetaminophen's diary

— 化学のこと、 \TeX のこと、その他雑多なこと —

最近は…



今日は…お待ちかねの…



今日は…お待ちかねの…

化学

の話をしにきました！

今日は…お待ちかねの…

化 学

の話をしにきました！

心の中で「難しそうだなー」と思った方

心の中で「難しそうだなー」と思った方

大丈夫です！

心の中で「難しそうだなー」と思った方

大丈夫です！

基礎から説明します。

心の中で「難しそうだなー」と思った方

大丈夫です！

基礎から説明します。

はい、そういうことではないですね… (^^;)

心の中で「聞きたくないなー」と思った方も
見ていてくださいね！



心の中で「**聞**きたくないなー」と思った方も
見ていてくださいね！

見るだけで結構です。



Acetaminophen

「化学」のイメージ

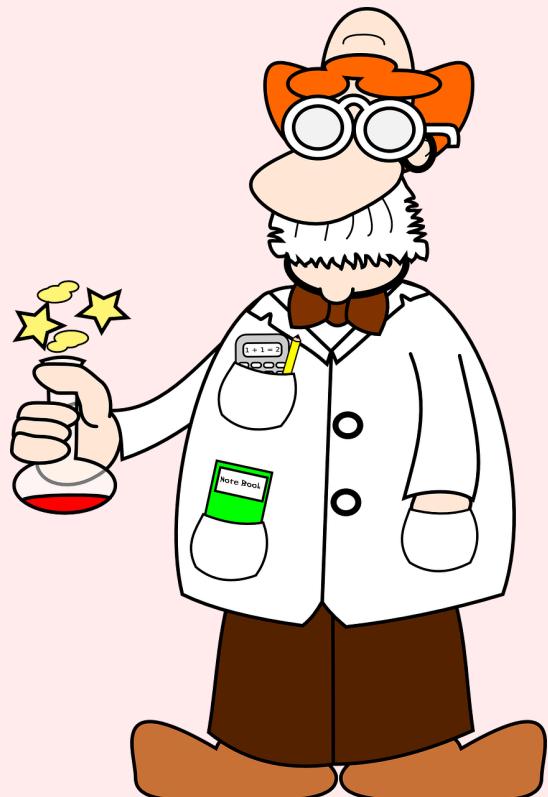
「化学」のイメージ

- なんか難しそう…



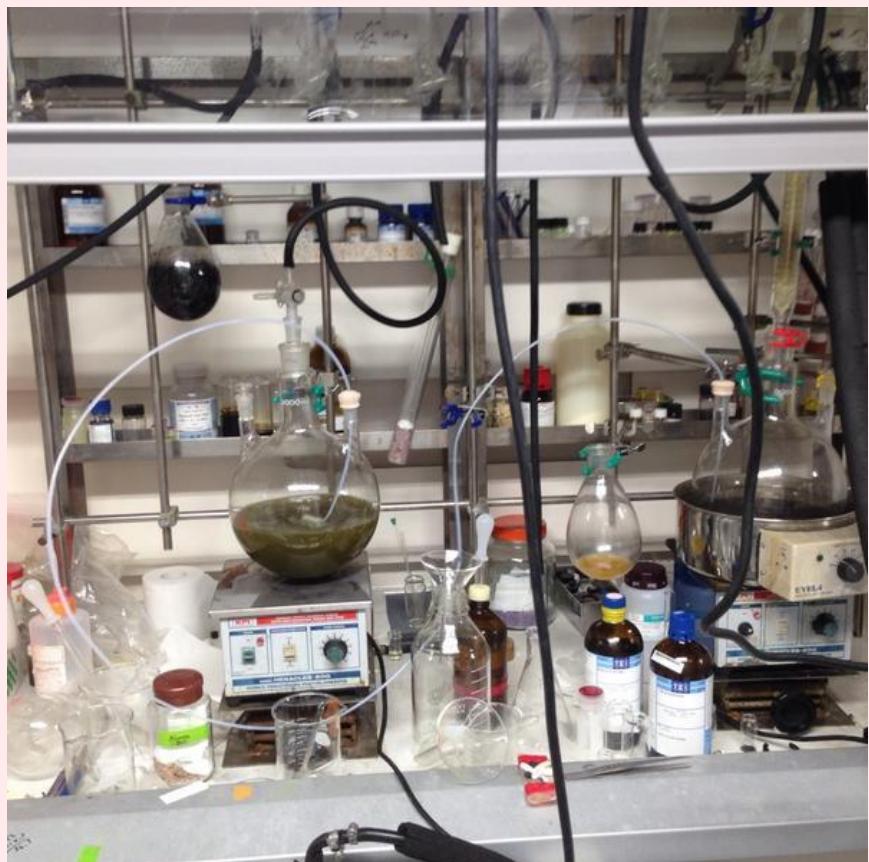
「化学」のイメージ

- なんか難しそう…
- 変なもののつくってるんじゃないの？



「化学」のイメージ

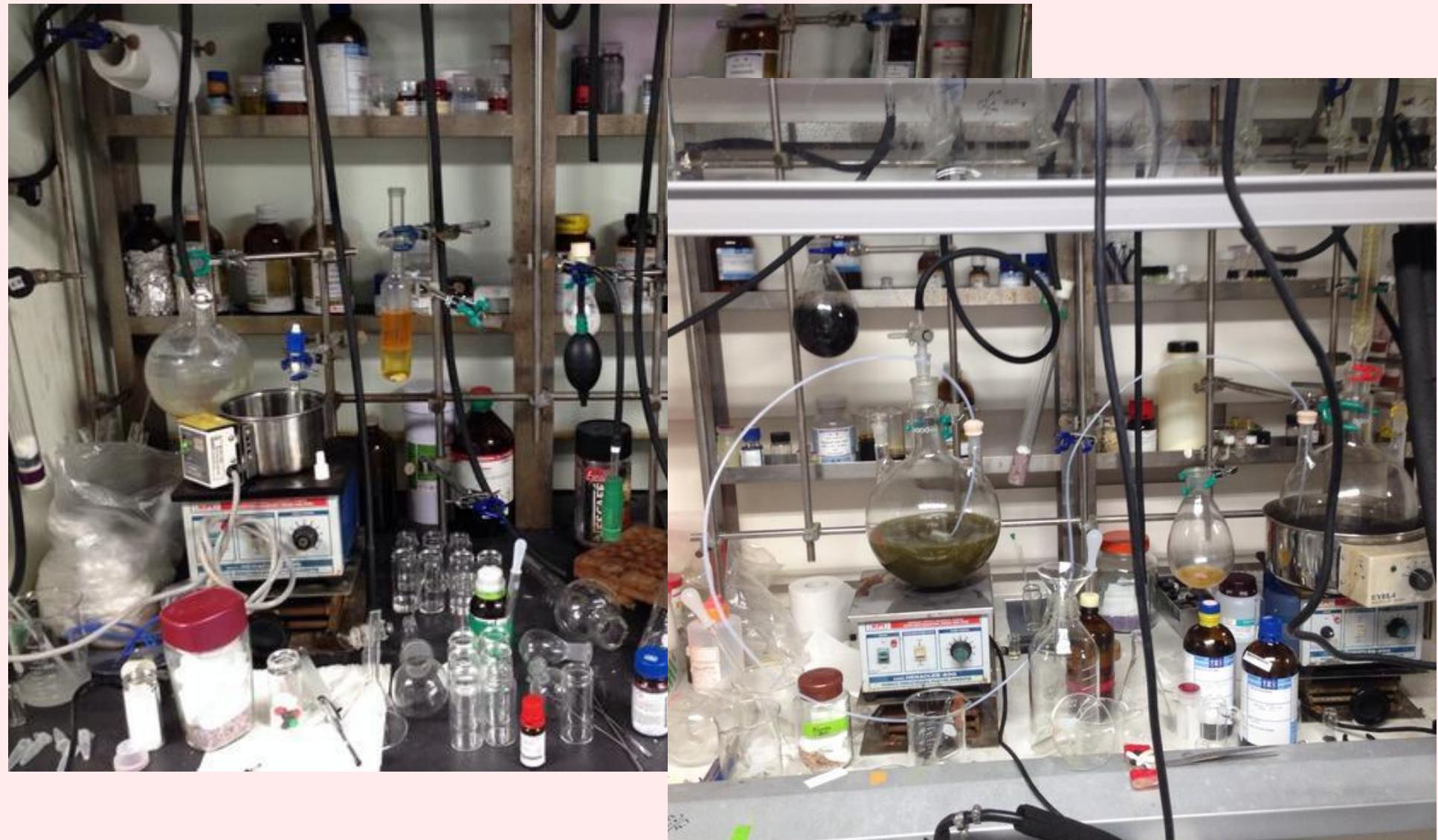
- なんか難しそう… Pictures: kindly offered by Yuzuru (Kagaku-ya)
- 変なものつくってるんじゃないの？
- 例えば、こんな感じ？



「化学」のイメージ



「化学」のイメージ



「化学」のイメージ





私の研究室：



日頃は…

東京大学工学部 応用化学科 野地研究室

私の研究室：



日頃は…

東京大学工学部 応用化学科 野地研究室

…はい、卒論研究もちゃんとやってますよ？

私の研究室：



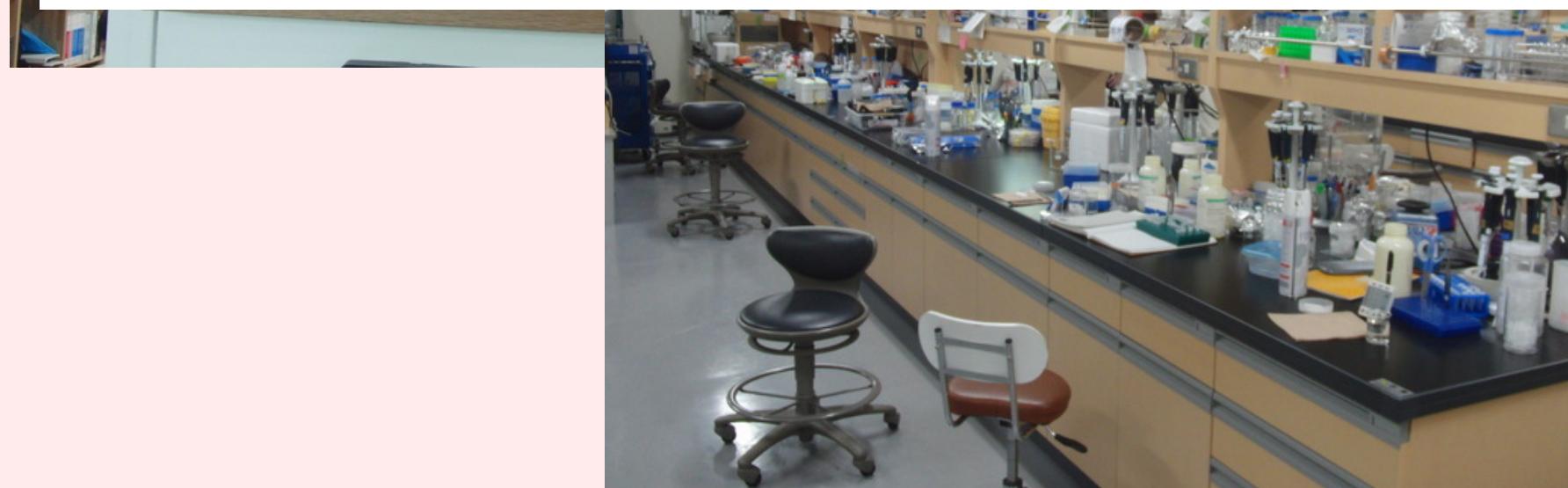
私の研究室：



私の研究室：



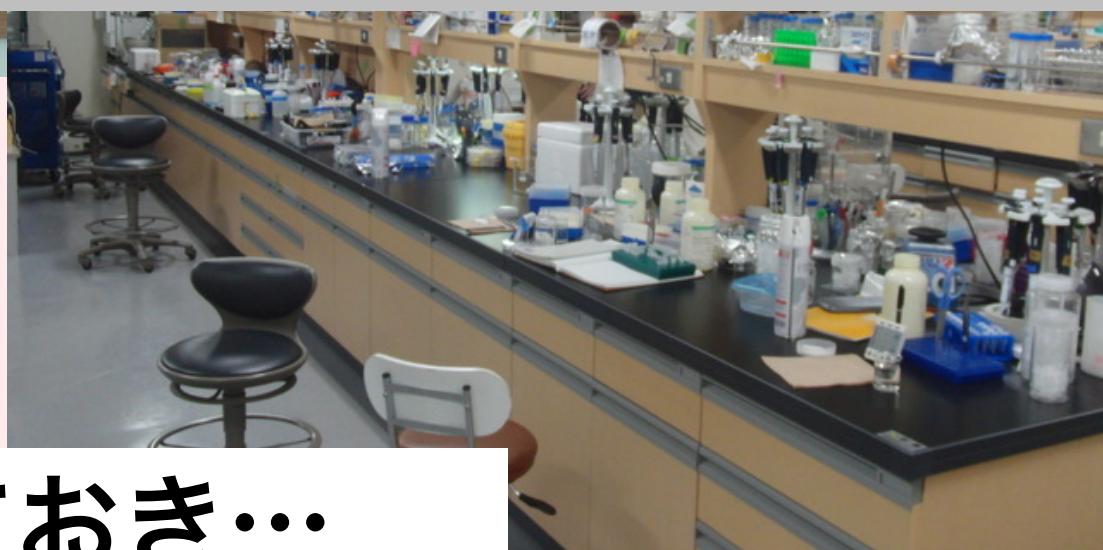
ね？ きれいですよ？



私の研究室：



ね？ きれいでしょ？



それはさておき…

美しい 化学 の世界へ

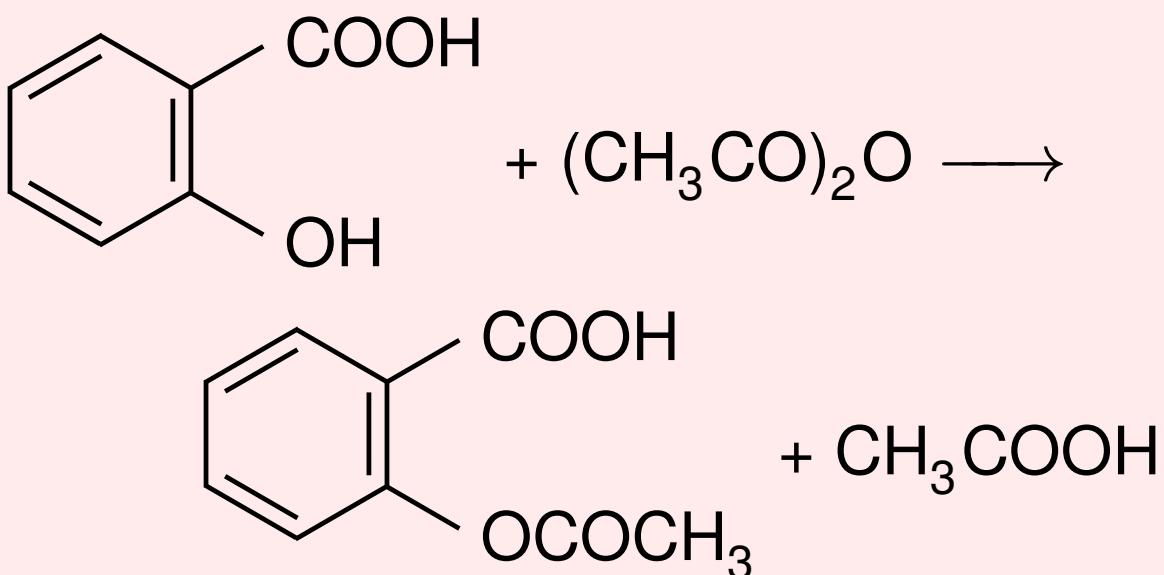
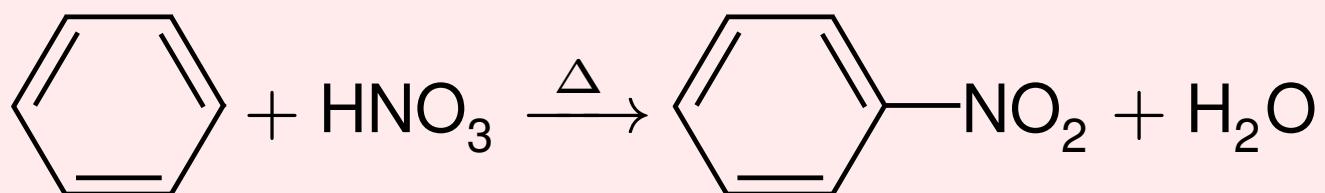
Acetaminophen

美しい 化学 の世界へ

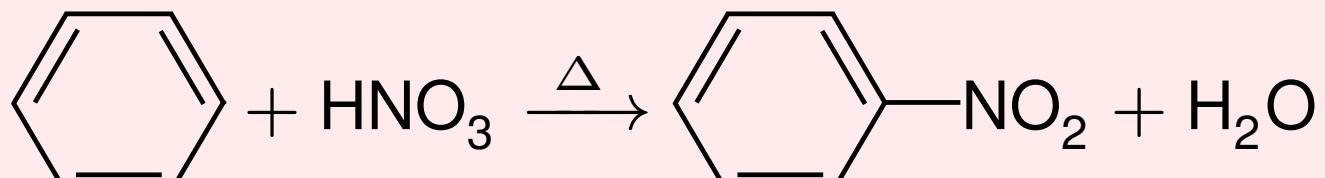
みなさんを

(ちょっとだけ) ご招待します！

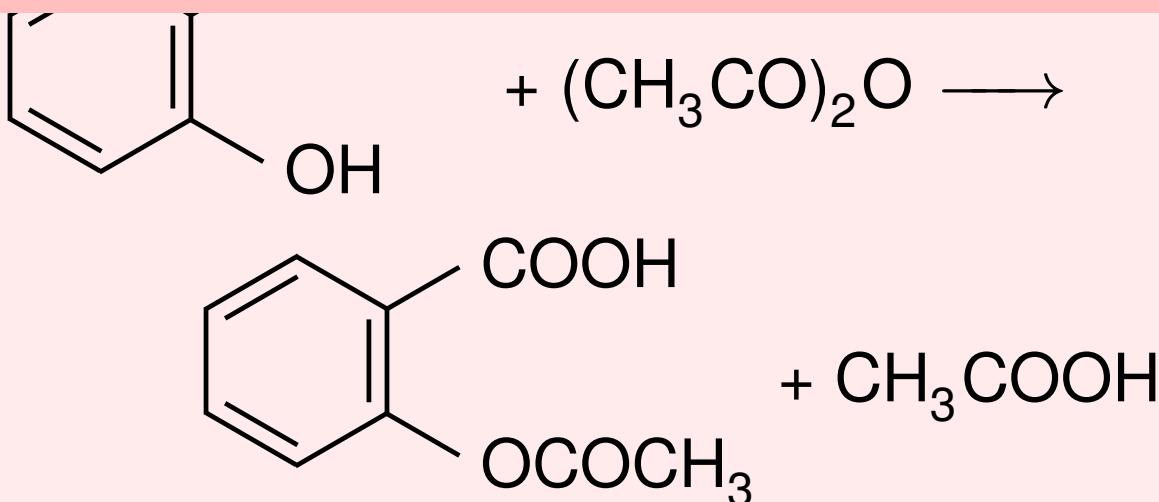
ほら！ なんと美しい！！！



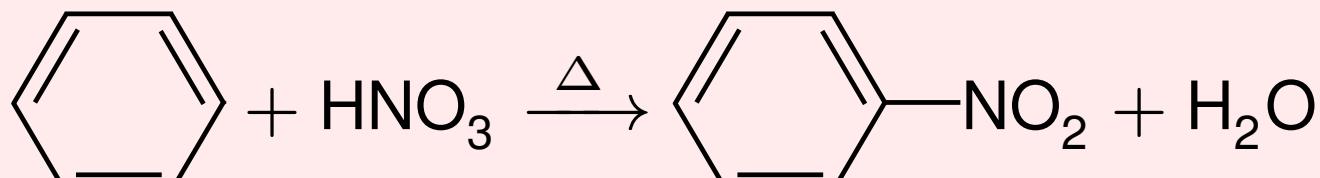
ほら！ なんと美しい！！！



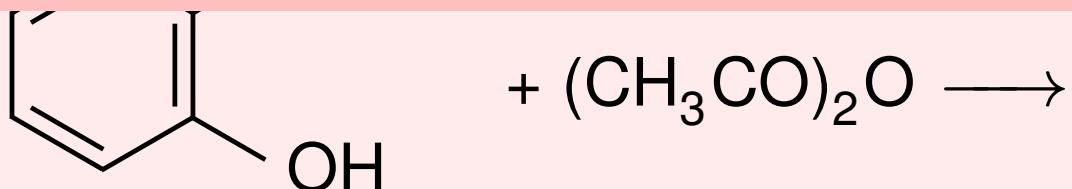
冗談です。



ほら！ なんと美しい！！！



冗談です。



X^YMT_EXとか mhchem とかの話ではないのでご安心を…

そちらを期待した方、ごめんなさい… □



2014年11月8日 TeXユーザの集い 2014

化学は美しい

—LaTeXとの融合—

Acetaminophen

1 まずは身近なところから

デンプン (炭水化物) :

1 まずは身近なところから

デンプン（炭水化物）：

「アミロース」と「アミロペクチン」の混合物

1 まずは身近なところから

デンプン（炭水化物）：体内で分解されて

グルコース（糖）

人間のエネルギー：

人間のエネルギー：

ATP

人間のエネルギー：

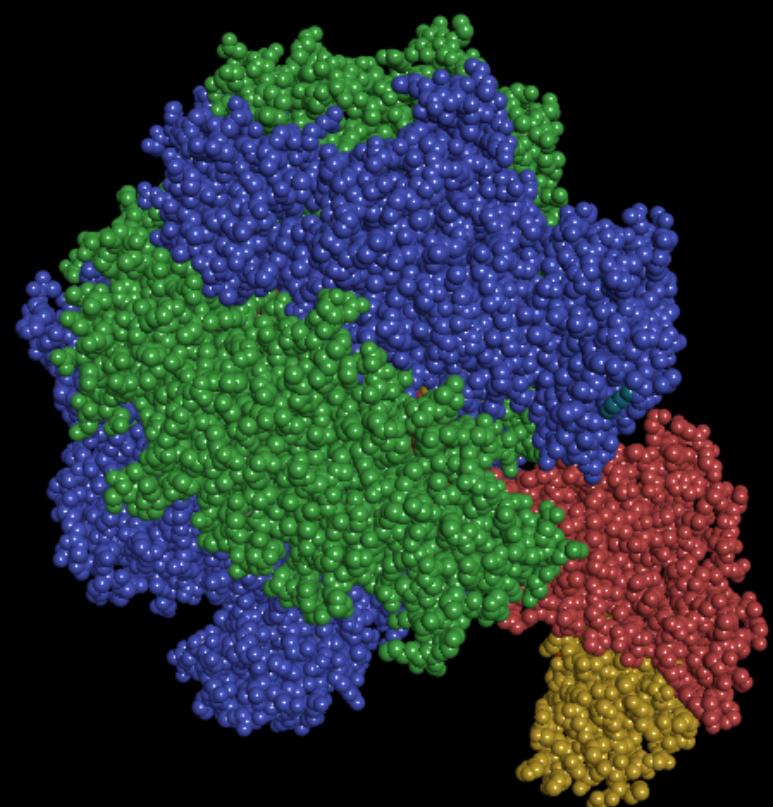
ATP

どうやって作られ、使われるかご存知ですか？

こんな装置があるんです！

再生 一時停止/再生 停止
…何かに似ていませんか？

そう、モーターみたいですね！



見かけ倒しじゃなくて
本当に回ります！！！

Animation Movies of ATP Synthase; F1_3d_sp_2.mov
(by Hongyun Wang and George Oster, University of California)

2 よく知られている例

遺伝子 といえば…

2 よく知られている例

遺伝子 といえば…

DNA

2 よく知られている例

遺伝子 といえば…

DNA

一度は聞いたこと ありますよね？

- DNA検査
- DNA鑑定 etc.

二重らせん構造

人間の細胞：分裂して増える

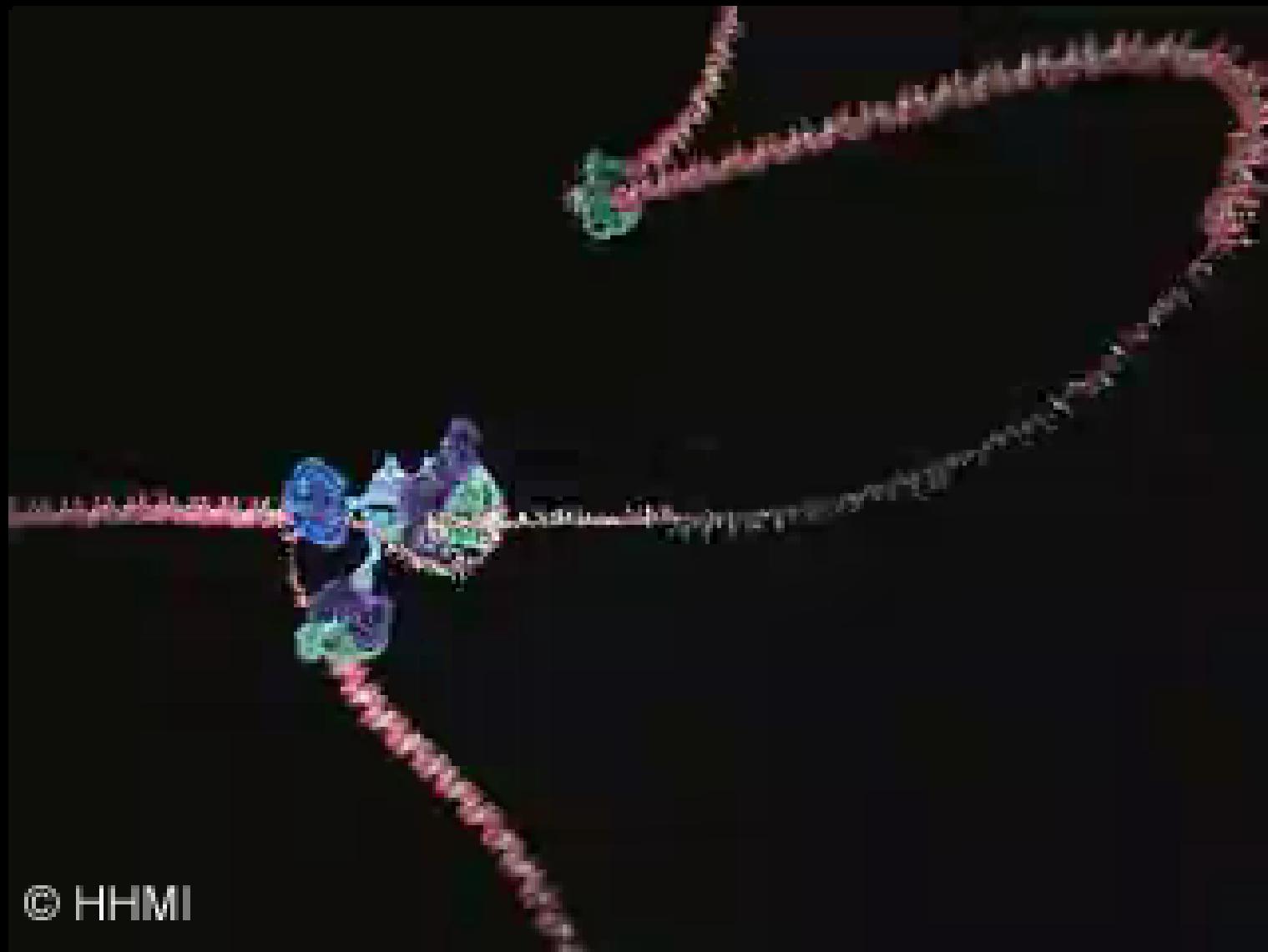
人間の細胞：分裂して増える
つまり、遺伝子も増える

人間の細胞：分裂して増える
つまり、遺伝子も増える

DNA複製！

Molecular Biology of the Cell, 5th edition;
DNA replication from Media DVD-ROM

(by Bruce Alberts, Alexander Johnson, Julian Lewis, Martin Raff,
Keith Roberts, Peter Walter; Garland Science 2007)



…生物ってすごいね

再生

時停止/再生

停止

さてさて…



今日は

TeXユーザの集い

ですね。

3 化学と \LaTeX の融合

今日やったこと：



3 化学と \LaTeX の融合

今日やったこと：

Adobe Reader で PDF ファイルを開いて



3 化学と L^AT_EX の融合

今日やったこと：

Adobe Reader で PDF ファイルを開いて

- アニメーション
- 動画再生
- インタラクティブな 3D モデル

3 化学と L^AT_EX の融合

今日やったこと：

Adobe Reader で PDF ファイルを開いて

- アニメーション
- 動画再生
- インタラクティブな 3D モデル

\documentclass[slide,papersize]{jsarticle}
と platex + dvipdfmx で実現！



animate パッケージ：GIF アニメ



animate パッケージ：GIF アニメ

```
$ convert anime.gif -coalesce anime_%03d.eps
```

いったん ImageMagick でフレームごとに分割
→ animate で取り込む

画像を連続表示可能

GIF アニメに限らず！

animate パッケージ：GIF アニメ

```
$ convert anime.gif -coalesce anime_%03d.eps
```

T_EXソースファイル

```
\usepackage[dvipdfmx]{graphicx}
\usepackage[dvipdfmx]{animate}
\begin{document}
  \animategraphics[<options>]{<frame rate>}%
    {anime_}{000}{015} % ベース名, 開始と終了番号
\end{document}
```



movie15 パッケージ：動画や音声



movie15 パッケージ：動画や音声

T_EXソースファイル

```
\usepackage[dvipdfmx]{movie15_dvipdfmx}
\begin{document}
  \includemovie[<options>,label=<label>]%
    {<width>}{<height>}{<filename>}
  \movieref{<label>}{<text>} % 再生, 一時停止など
\end{document}
```



movie15 パッケージ：動画や音声

TeXソースファイル

```
\usepackage[dvipdfmx]{movie15_dvipdfmx}
\begin{document}
  \includemovie[<options>,label=<label>]%
    {<width>}{<height>}{<filename>}
    \movieref{<label>}{<text>} % 再生, 一時停止など
\end{document}
```

avi, mov, mp3, mp4, mpeg, wav, wma, wmv, etc.

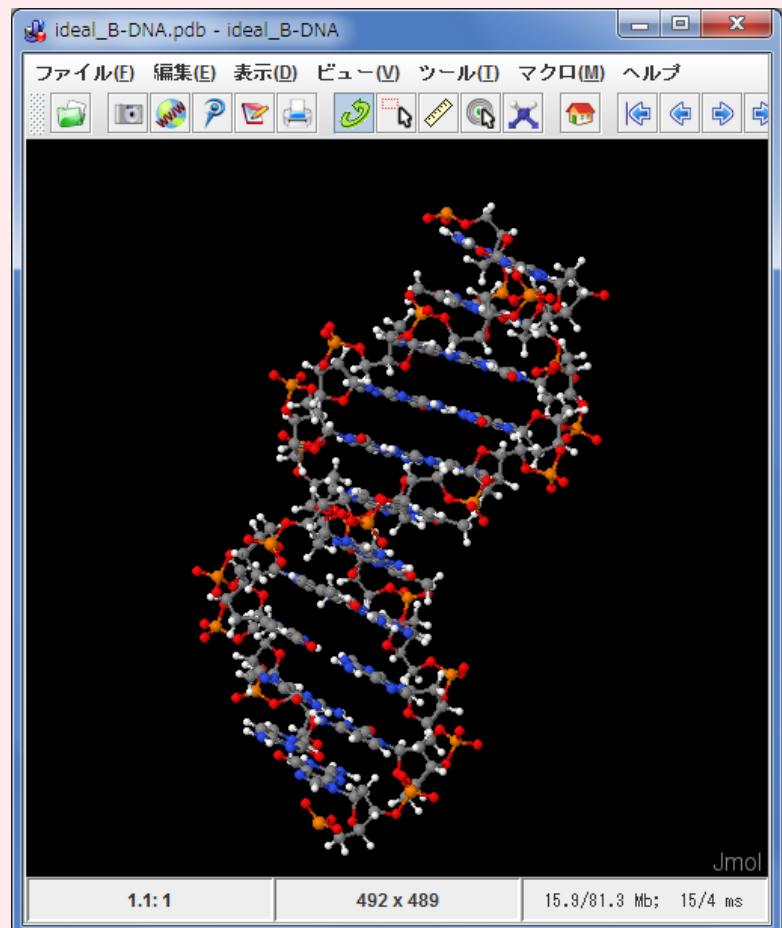
⇒ movie15 は多数のフォーマットに対応



movie15 パッケージ：3D モデル



movie15 パッケージ：3D モデル

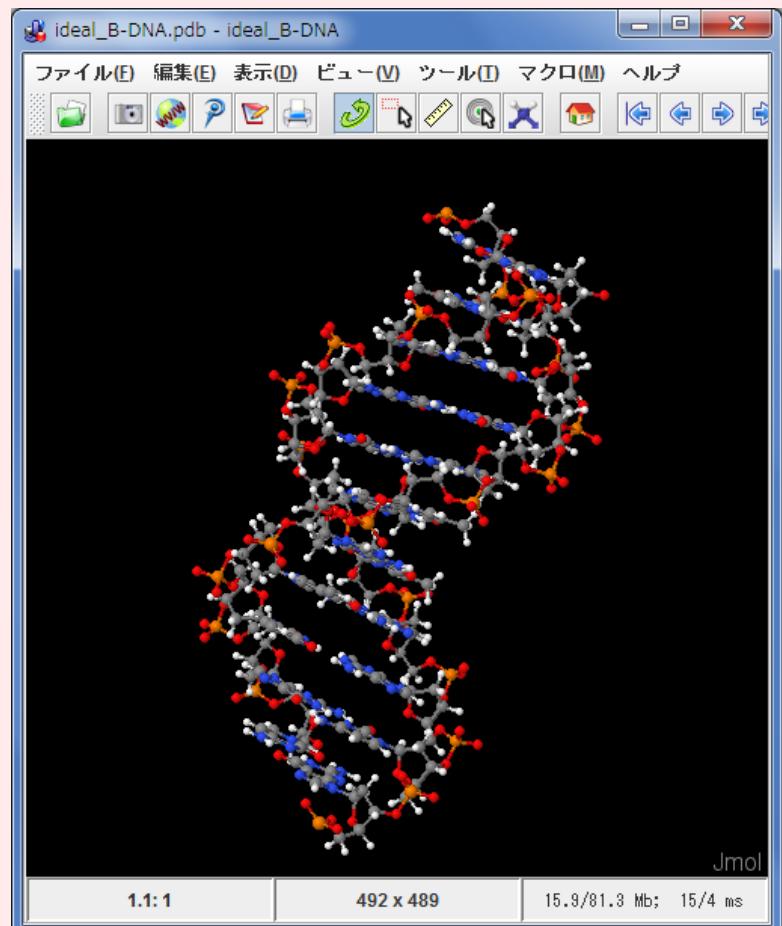


一般的な化学ソフトウェア
オープンソース！

Javaベース：クロスプラットフォーム！



movie15 パッケージ：3D モデル



IDTF 形式 + L^AT_EX ソース

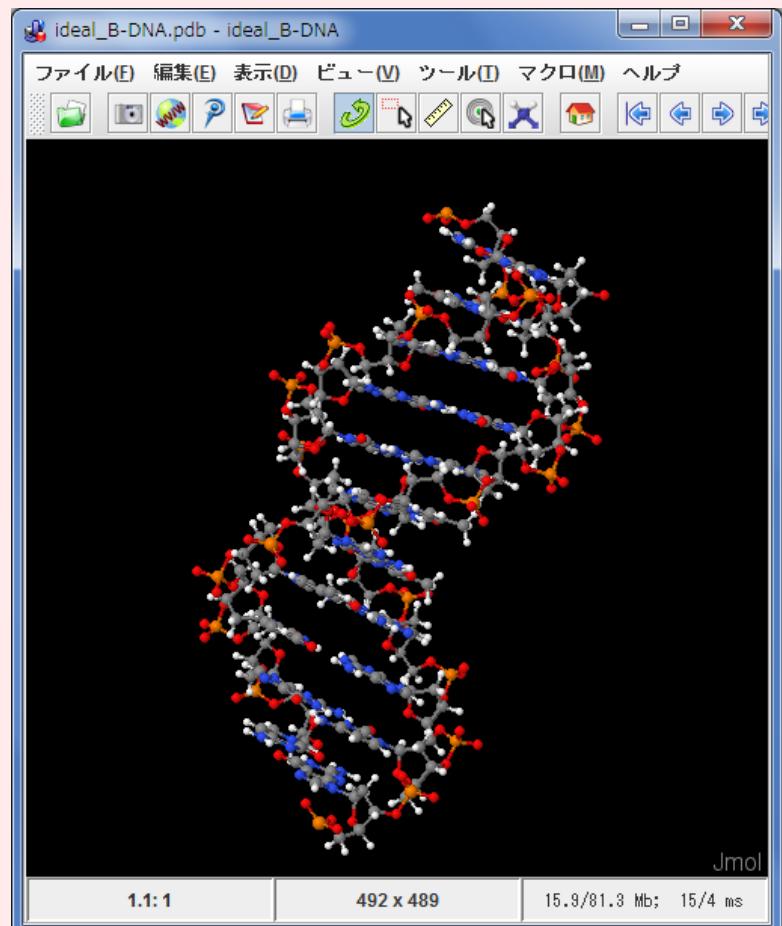
(Intermediate Data Text Format)

出力可能

```
$ write C:/Users/ユーザ名/DNA.idtf
```



movie15 パッケージ：3D モデル



IDTF → U3D は容易

(Universal 3D Format)

オープンソース！

```
$ write C:/Users/ユーザ名/DNA.idtf
```



movie15 パッケージ：3D モデル

T_EX ソースファイル

```
\usepackage[dvipdfmx,3D]{movie15_dvipdfmx}
\begin{document}
\includemovie[
  label=<label>,3Droo=<radius>,3Dcoo=<center>,
  3Dc2c=<camera center>,3Daac=<camera angle>,
  3Droll=<camerar roll>,3Dbg=<rgb>,
  3Dlights=<lighting>,3Drender=<render mode>
]{<width>}{<height>}{model.u3d}
\end{document}
```



movie15 パッケージ：3D モデル

TeX ソースファイル

```
\usepackage[dvipdfmx,3D]{movie15_dvipdfmx}
\begin{document}
\includemovie[
  label=<label>,3Droo=<radius>,3Dcoo=<center>,
  3Dc2c=<camera center>,3Daac=<camera angle>,
  3Droll=<camerar roll>,3Dbg=<rgb>,
  3Dlights=<lighting>,3Drender=<render mode>
]{<width>}{<height>}{model.u3d}
\end{document}
```

TeX ソース (media9) は Jmol が自動生成：あとは手直し



4 化学と \LaTeX

化学系の人間にとて構造式を描くのは重要

4 化学と \LaTeX

化学系の人間にとて構造式を描くのは重要

- X²MT_EXあるいはマクロ作成

4 化学と \LaTeX

化学系の人間にとて構造式を描くのは重要

- \XeMTEx あるいはマクロ作成
: 敷居が高い (非直感的)

4 化学と \LaTeX

化学系の人間にとて構造式を描くのは重要

- X^{tex}M_EXあるいはマクロ作成
: 敷居が高い (非直感的)
- ChemDraw + PDF の \includegraphics

4 化学と \LaTeX

化学系の人間にとて構造式を描くのは重要

- \XeLaTeX あるいはマクロ作成
: 敷居が高い (非直感的)
- ChemDraw + PDF の \includegraphics
: 面倒 (Word なら貼った後でも再編集できるぞ?)

4 化学と \LaTeX

化学系の人間にとて構造式を描くのは重要

- \XeLaTeX あるいはマクロ作成
: 敷居が高い (非直感的)
- ChemDraw + PDF の `\includegraphics`
: 面倒 (Word なら貼った後でも再編集できるぞ?)

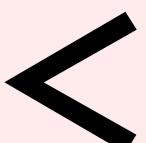
しかも、ChemDrawなら
構造最適化、物性値計算、化合物命名、etc.

4 化学と \LaTeX

結局、

「 \TeX , \LaTeX なんかいらない！」

美しさ
組版



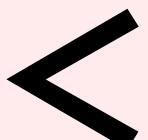
実用性
機能性

4 化学と \LaTeX

結局、

「 \TeX , \LaTeX なんかいらない！」

美しさ
組版



実用性
機能性

描くだけじゃ足りない！ 手軽に再編集したい！

၁၈



**LATEXでも化学のハナシ、
できましたよね？**



**LATEXでも化学のハナシ、
できましたよね？**

使い方次第！ツールの使い分け。



最適な方法：1つの案

- 構造式は化学用ソフトウェアを使う
オープンソースでも Open Babel なら自動生成、 \TeX への取り込み可能！
- マルチメディアも必要に応じて活用
オープンソースでも \TeX ならアニメーションや動画、3D に対応！

最適な方法：1つの案

- 構造式は化学用ソフトウェアを使う
オープンソースでも Open Babel なら自動生成、 \TeX への取り込み可能！
- マルチメディアも必要に応じて活用
オープンソースでも \TeX ならアニメーションや動画、3D に対応！

→ 他分野でも応用可能

専門ツールの活用

- その分野で扱いや
すい操作性
- 専門用途にも対応
している信頼性

専門ツールの活用

- その分野で扱いや
すい操作性
- 専門用途にも対応
している信頼性

PDF のメリット

- 本質を伝えるシン
プルな見やすさ
- 汎用性・環境非依
存の再現性

専門ツールの活用

- その分野で扱いや
すい操作性
- 専門用途にも対応
している信頼性

PDF のメリット

- 本質を伝えるシン
プルな見やすさ
- 汎用性・環境非依
存の再現性

多くの人に伝わる
見やすい文書作成



改めて…

今日の「本当の」目的

改めて…

今日の「本当の」目的

- \LaTeX とマルチメディア
：扱い方の技術発表
- 化学に少しでも触れていただく
：裾野と視野を広げよう

改めて…

今日の「本当の」目的

- L^AT_EXとマルチメディア
：扱い方の技術発表
- 化学に少しでも触れていただく
：裾野と視野を広げよう

→ 双方向での
T_EX (L^AT_EX) ユーザ層の拡大

ありがとうございました！

TeXソースファイル

```
\usepackage{media9}
\begin{document}
  \addmediapath{./}
  \includemedia[
    label=<label>,width=<width>,height=<height>,
    activate=pageopen,deactivate=pageclose,
    3Dtoolbar=false,3Dnavpane=false,3Dmenu,
    3Droo=<radius>,3Dcoo=<center>,
    3Dc2c=<camera center>,3Daac=<camera angle>,
    3Droll=<camera roll>,3Dbg=<rgb>,
    transparent=false,
    3Dlights=<lighting>,3Drender=<render mode>,
    3Dpartsattrs=restore,
  ]{}{model.u3d}
\end{document}
```

TeXソースファイル

```
\usepackage[dvipdfmx,3D]{movie15_dvipdfmx}
\begin{document}
  \addmediapath{./}
  \includemovie[
    label=<label>,width=<width>,height=<height>,
    activate=pageopen,deactivate=pageclose,
    3Dtoolbar=false,3Dnavpane=false,3Dmenu,
    3Droo=<radius>,3Dcoo=<center>,
    3Dc2c=<camera center>,3Daac=<camera angle>,
    3Droll=<camera roll>,3Dbg=<rgb>,
    transparent=false,
    3Dlights=<lighting>,3Drender=<render mode>,
    3Dpartsattrs=restore,
  ]{<width>}{<height>}{model.u3d}
\end{document}
```

生物に近い化学よりも
構造式の美しさに惹かれる方へ：

生物に近い化学よりも
構造式の美しさに惹かれる方へ：

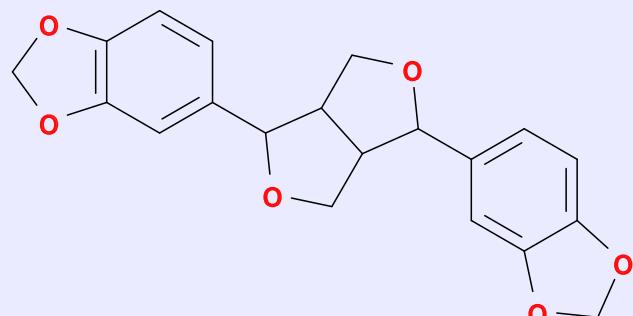


化学屋

生物に近い化学よりも
構造式の美しさに惹かれる方へ：

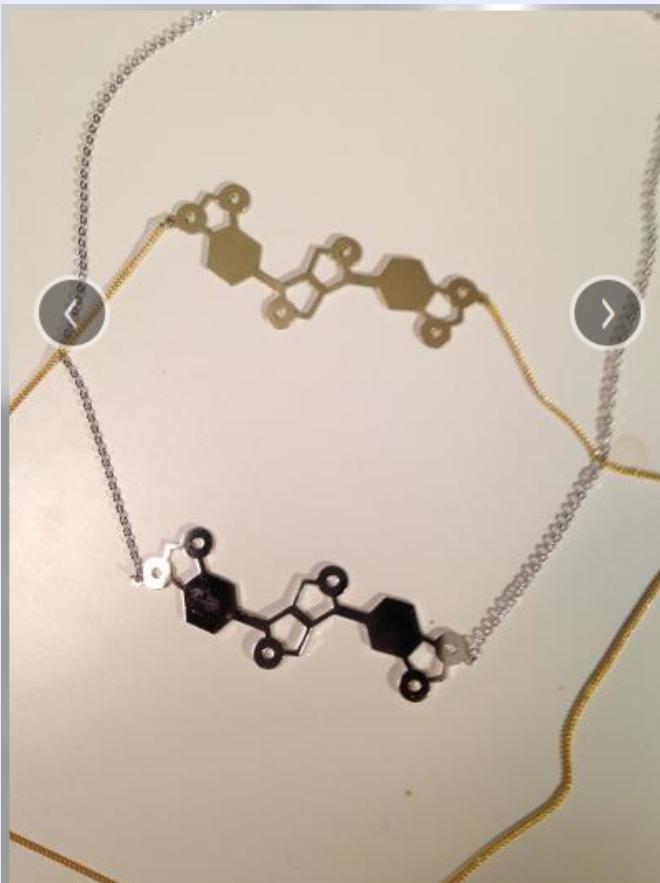


おすすめ：セサミン



美しい構造式が
そのままアクセサリーに！

Website: kagakuya.com



セサミン(sesamin)

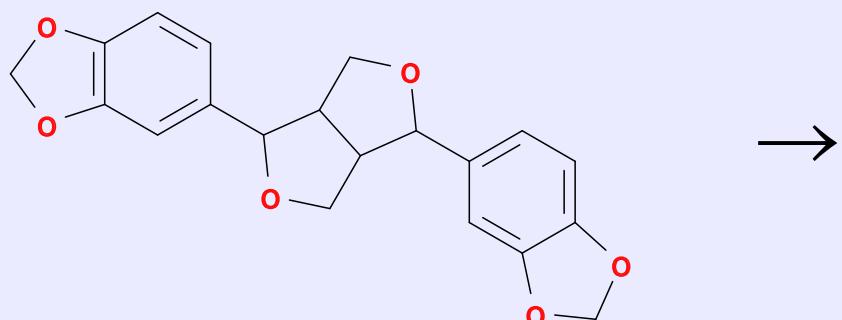
★Available

ゴマの成分やセサミ油でおなじみの物質。
肝臓の調子を整え、美肌効果もあるとか。 © Kagakuya 2012



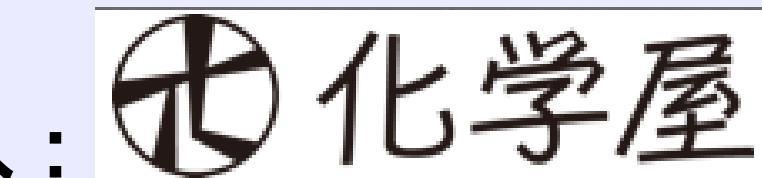
生物に近い化学よりも
構造式の美しさに惹かれる方へ：

おすすめ：セサミン



美しい構造式が
そのままアクセサリーに！

Twitter: @misstodai2014_2



Twitterを Q アカウントをお持ちの場合は ログイン ▾

フォロー

小林里瑳 @misstodai2014_2

質問があったので...昨日の写真で着けていた
アクセサリーは、化学屋(kagakuya.com)の
もの。
セサミンの化学式のネックレス、
手持ちのどんな服にも合うので、お気に入り
なんですよ。



24 リツイート 88 お気に入り

6:40 - 2014年7月27日

PDF のメリット

凝ったエフェクト

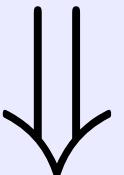
or

背景画像

PDF のメリット

凝ったエフェクト

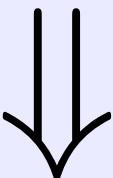
背景画像



PDF のメリット

凝ったエフェクト

背景画像



本質を伝えるための
シンプルな見やすさ

PDF のメリット

- 本質を伝えるシンプルな見やすさ

PDF のメリット

- 本質を伝えるシンプルな見やすさ

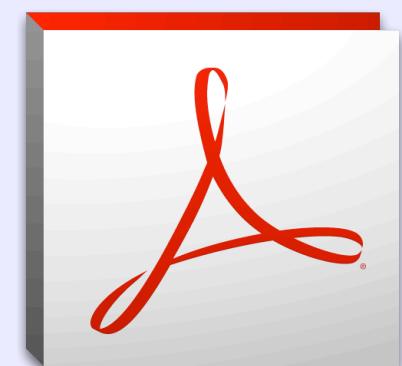
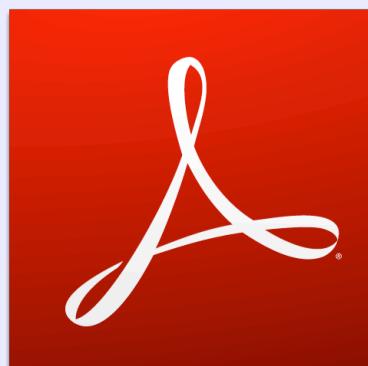
汎用性・再現性

PDF のメリット

- 本質を伝えるシンプルな見やすさ

汎用性・再現性

- レイアウト固定



- 必要なのは Adobe Reader だけ！

使用した素材

「まずは身近なところから（デンプンと糖、ATP合成酵素）」

- Water Structure and Science: Amylose and Amylopectin (by Martin Chaplin, London South Bank University); Single helical amylose & Amylopectin PDB files
- ChemSpider ID: 71358 (α -D-Glucopyranose) MDL MOL file
- Protein Data Bank (PDB) ID: 3OAA (F_1 -ATP synthase)
- Animation Movies of ATP Synthase (by Hongyun Wang and George Oster, University of California); F1_3d_sp_2.mov
- Wikipedia “Electric motor”; ‘Various electric motors, compared to 9 V battery’

使用した素材

「よく知られている例（DNAの構造とその複製）」

- Teaching Resources in Biochemistry (by Jason Kahn, University of Maryland College Park): Ideal B-DNA PDB file
- Molecular Biology of the Cell, 5th edition (by Bruce Alberts, Alexander Johnson, Julian Lewis, Martin Raff, Keith Roberts, Peter Walter; Garland Science 2007): DNA replication from Media DVD-ROM

その他の写真

- 化学屋主宰のゆづるさん提供
- 研究室および実験室内で撮影

使用したソフトウェア

なるべく多くのソフトウェアを使い、特に Windows, Mac という OS 以外はフリー（可能な限りオープンソース）のツールを用いるように心がけました。

注：オープンソースでないソフトウェアには - という記号を付けました。

化学的な専門的操作

- ChemSketch
- Discovery Studio Visualizer
- Jmol
- Open Babel

使用したソフトウェア

化学以外の編集とファイル形式変換操作

- Inkscape
- Universal 3D Sample Software (U3D Tools)
- ImageMagick
- ffmpeg
- pdftk

TeXまわりの作業簡略化

- TeXworks, TeXShop (Mac)
- TeX2img (Win/Mac)
- highlight

ソフトウェアに関するヒント

基本的な処理として

1. 全体的な構成を \LaTeX で作成し、PDF 出力 (TeXworks あるいは TeXShop を使用) : in.pdf
2. Inkscape で模様 (今回の場合は上下の帯とロゴ) を作図して、PDF 出力 : stamp.pdf
3. pdftk で透かし挿入機能を用いて2つを組み合わせる。

```
pdftk in.pdf multistamp stamp.pdf output out.pdf
```

という処理が確実で楽である。今回のようなマルチメディア埋め込み PDFでも、pdftk なら正常に透かしを埋め込むことができる (ただし、マルチメディア入り PDF を in.pdf に指定しなければならない)。もっと詳しくは後ほどはてなブログで紹介する。