

化学構造式フィルタープラグイン ChemJaxV2の開発

2019.02.28

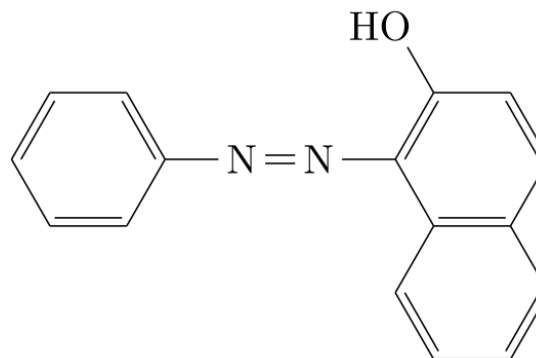
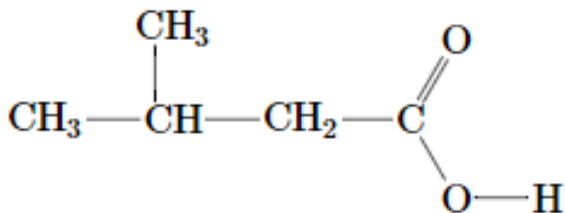
元東京家政大学 三浦 謙一
東京家政大学 松木 孝幸

はじめに

- * ChemJax **V2** – とは

- * ChemJax の拡張版

- * 化学構造式を描画するMoodle Plugin



はじめに

- * **ChemJax — とは**
- * **主な機能：**
- * **普通の化学式や化学反応式**
- * **枝分かれのある構造式や環状構造式を描画できる**

ChemJaxV2

ChemJax V2 とは

化学構造式フィルタープラグイン

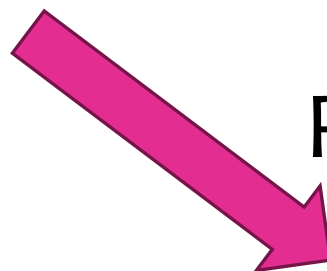
ChemJax

ユーザ支援



IE対応
書き方ページ

Preview機能



Attoエディタプラグイン

ChemJaxPV

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`

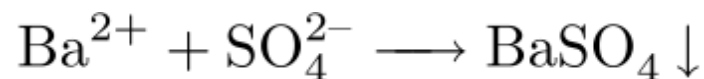
Moodleにおける化学式記述

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

¥ce{Ba^2+ + SO4^2- > BaSO4 v}



MathJax Extension

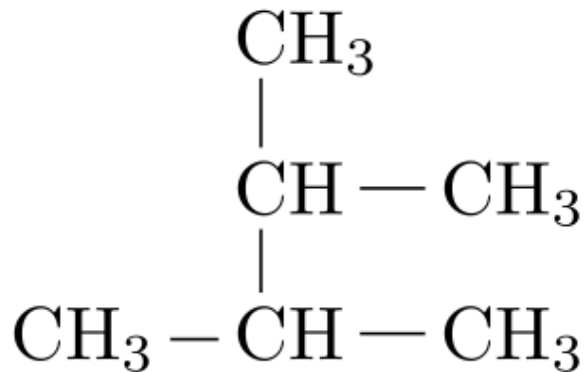
- * MathJaxの拡張として： JavaScriptライブラリ
 - * Third Party Extensions
 - * <https://github.com/mathjax/MathJax-third-party-extensions>
 - * mhchem.js
 - * <https://github.com/mhchem/MathJax-mhchem/blob/master/mhchem.js>
 - * xypic.js
 - * <https://github.com/sonoisa/XyJax/blob/master/extensions/TeX/xypic.js>

ChemJax登場

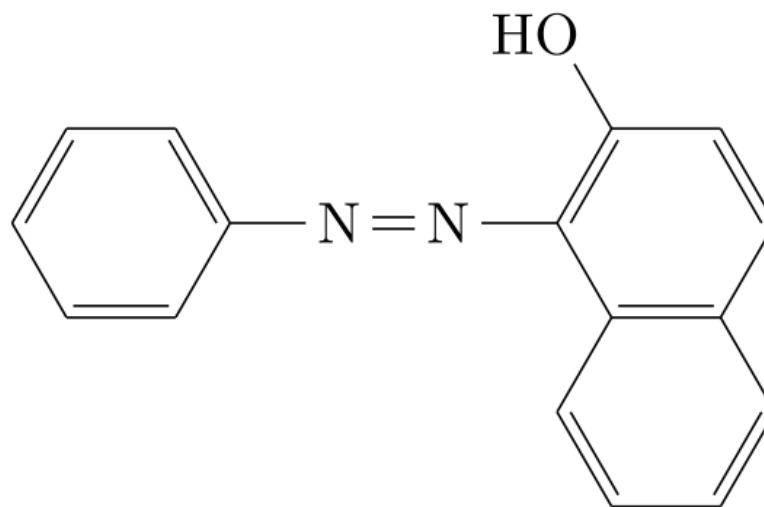
- * 複雑な化学構造式を描画するためのMathJax拡張タイプの Moodle Plugin
- * (1) Plugin 名 : ChemJaxプラグイン `filter_chemjax`
- * (2) Plugin タイプ : テキストフィルタ
- * (3) 主な機能 :
 - * 普通の化学式や化学反応式に加え、
 - * 従来難しかった枝分かれのある構造式や環状構造式を描画できる

ChemJax登場

* 枝分かれのある構造式



* 環状構造式



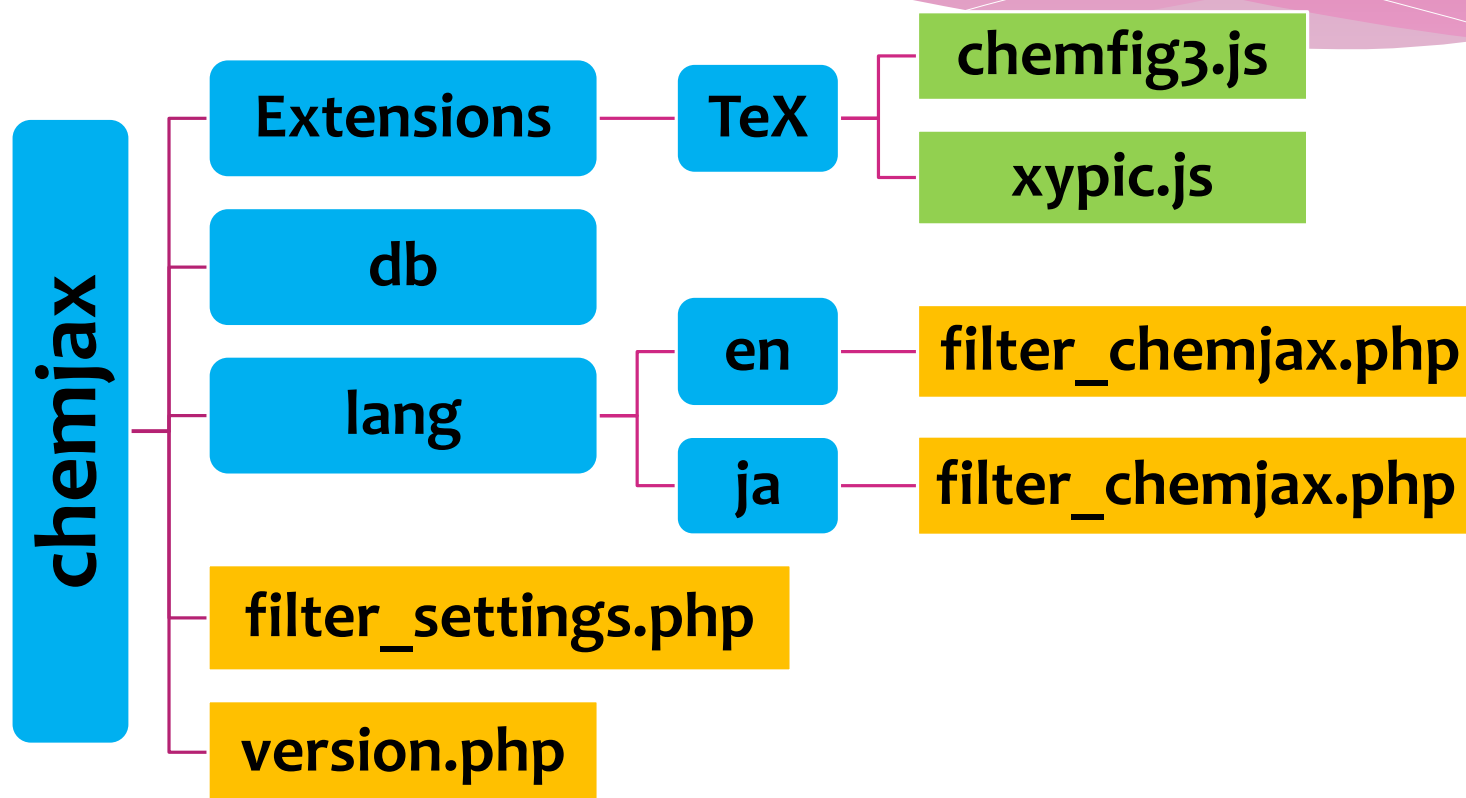
ChemJax登場

- * 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

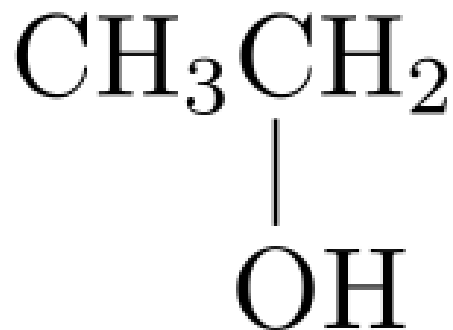
省略: 0°

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 \equiv : $\#$ or \sim

ChemJax コマンド

結合のオプション

* 角度の指定

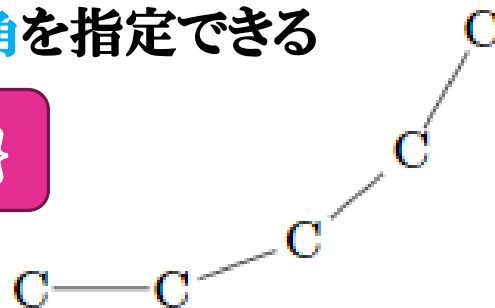
* 45° の倍数 : `-[2]` 45° の何倍方向か 0~7

* 絶対角度 : `-[:60]` $\Rightarrow 60^\circ$ `-[:-90]` $\Rightarrow -90^\circ$

* 相対角度 : `-[:20]`

* そこまでの結合角からの相対的な回転角を指定できる

`¥cjx{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

* CH3 ➡ CH₃

* H2O ➡ 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⁻

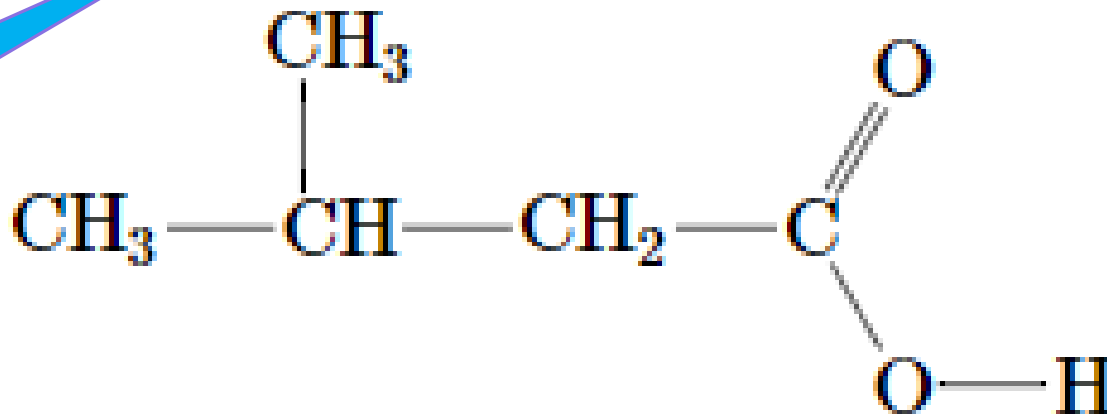
省略可

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

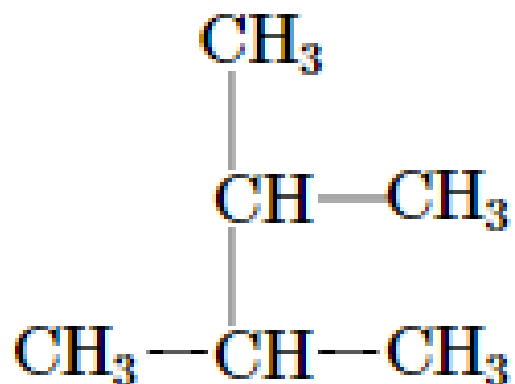
CH₂でOKCH₃でOK

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

* ¥cjsx{CH₃_-CH_(-[2]CH_(-CH₃)_-[2]CH₃)_-CH₃}

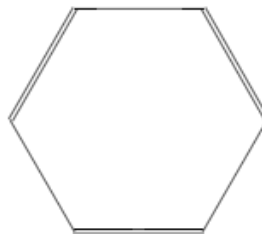
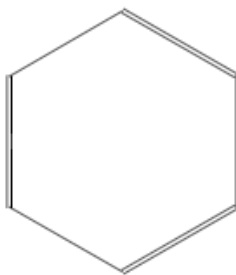


化学構造式の例

* 環状構造

* $\forall c j x \{ -[: -30] _ = [::60] _ - [::60] _ = [::60] _ - [::60] _ = [::60] \}$

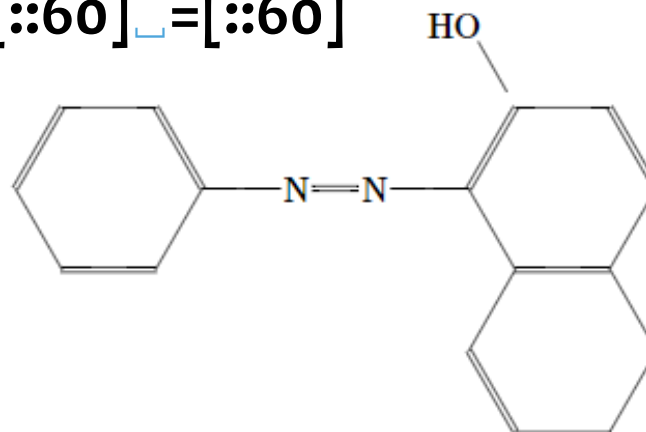
* $\forall c j x \{ -[: -30, 0] _ - [:: -30] _ = [::60] _ - [::60] _ = [::60] _ - [::60] _ = [::60] \}$



化学構造式の例

* 環から環や枝を伸ばす

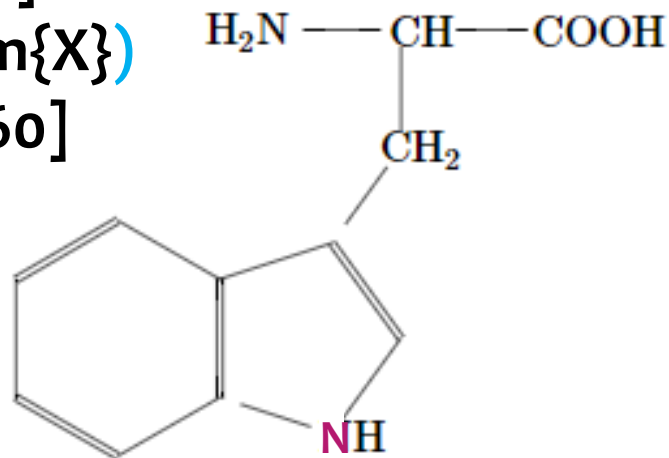
```
* \cjkx{\vphantom{X}}_=[:0]_-[::60]_(-[::-
60,0.7]N_=[,0.5]N _-[,0.7]_-[::-60]_(-[::-60]_=[::60]_
-[::60]_-[::60]_-[::60]) _=[::60]_-[::60]_=[::60]
_-[::60]_(-[::-60,,2]HO)
_=[::60])_=[::60]_-[::60]
_=[::60]_-[::60]}
```



化学構造式の例

* 環上の原子を明示する

```
* %c{x}%vphantom{X}_=[:-30]_-[::60]_(-[:-18]NH
_-[::72,,1]_=[::72]_(-[::72]CH2_-[2]CH
_(-[4]H2N%vphantom{X}%vphantom{X})
_-[0]COOH)_-[::72])_=[::60]_-[:60]
_=[::60]_-[:60]}
```



ChemJax Config

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

Chemjax
directory 指定

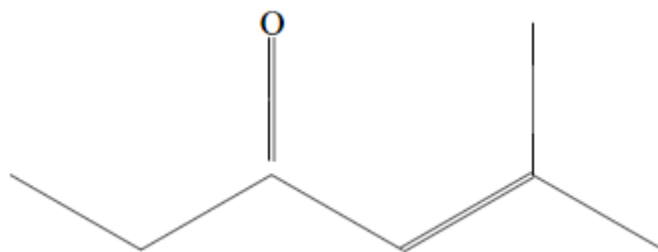
- * `MathJax.Ajax.config.path["ChemJax"] = "http://Your Moodle Site/filter/chemjax/unpacked/extensions/TeX";`
- * `MathJax.Hub.Config({`
- * `config: ["Accessible.js", "Safe.js"],`
- * `errorSettings: { message: ["!"] },`
- * `skipStartupTypeset: true,`
- * `messageStyle: "none",`
- * `TeX: {`
- * `extensions: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

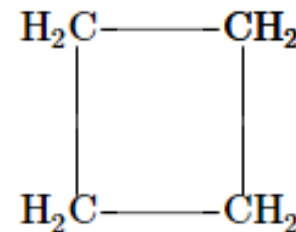
- * 大学以降の化学で標準的に用いられる、骨格のみで表した構造式
- * CC(=O)C=C(C)C



化学式描画 その他例

* 環状構造の記述

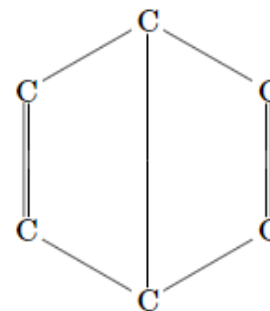
* ¥cjsx{H2C (-[-2,,2,2]H2C -[0]CH2 -[2]CH2) -CH2}



* 複数の環状構造を持つ分子

* デュワーベンゼンの例

* ¥cjsx{C =[6]C -[::60]C -[::60]C =[::60]C -[::60]C (-[-2,2]¥phantom{X}) -[::60]¥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

`\cjax{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>

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>

ChemJaxV2

さいごに

*Thank you
for your time!*

Contact : kenmiu3@gmail.com

matsuki@tokyo-kasei.ac.jp