

Unity による分子描画ライブラリ Galahad とそれを用いた VR 化学教育コンテンツにおけるユーザーインターフェースの検討

川嶋裕介^{†1} 水谷祥佑^{†1} 田雨時^{†1} 見取英明^{†2} 高木達也^{†1}

概要：近年、仮想現実 (Virtual Reality, VR) や拡張現実 (Augment Reality, AR) に対応するデバイスが種々開発され入手しやすくなったことに伴い、様々な分野で教育や研究のためのコンテンツが開発されている。これらは、化学研究や化学教育においても利用が進められており、化合物の描画ソフトウェアが複数開発されている。しかし、それらのソフトウェアは設計上の理由から、新規化合物アプリケーションを作成するのに再利用しにくいことが多い。そこで我々は Unity による再利用性の高い分子描画ライブラリ Galahad の作成を行った。Galahad はドメイン駆動設計に基づいて実装を行うことで、ドメイン知識の実装とデバイス依存の実装を分離し、ドメインに関する機能追加を行いやすくした。また、クロスプラットフォームゲームエンジンである Unity 上で実装することで、作成した機能を各種デバイスに容易に実装できるようにした。応用例として、Galahad を用いた VR 化学教育コンテンツを作成し、大学祭において展示を行った。その時の所見からコンテンツの操作時におけるユーザーインターフェースの検討を行った。

キーワード：分子描画ソフトウェア、化学教育、Unity、ドメイン駆動設計、仮想現実

1. 背景

有機化学は理工学の一大分野のひとつであり理学工学薬学など様々な分野にわたって研究が行われている。薬学分野では有機化学は有機低分子化合物創薬のための花形として研究が行われてきた。また、有機化学の基礎的な理論である有機電子論は、反応性の説明や設計指針、化合物の物性、化学反応の集合としての生命現象を理解するための手段として利用されている。そのため、有機化学は薬学において必須科目として教育されている。

しかし、有機化学に関連する諸概念（化学結合論、化学反応速度論、電子軌道論など）はその複雑性から理解するのに時間がかかることが多い。例えば、ある概念に対しての前提知識（熱力学、統計力学、量子化学など）や、類推による概念の拡張（オクテット則、18 電子則など）が必要になることが多く、また、同じ名前概念と対象が文脈によって別の役割で使われる（ルイス酸、ポテンシャルなど）ので混乱を招くことが多い。そのため、初学者が躓く点が多く存在する。最終的な教育目標として、化合物の性質や相互作用について有機化学に基づいてメカニズム的に正しく理解し運用出来ることが求められているが、これを達成するためには単に覚えてしまうだけでなく、その実践の場を設けて理解することが必要である。

上記のような理由から、化学教育に対して様々な研究が行われている。教育対象の化学の概念も多岐にわたり、化学反応、NMR スペクトル、IR スペクトル、化学反応速度論、共鳴などに対する教育方法が研究されている [1][2][3][4][5][6]。また、教育の方法論のみならず、ゲーム性を取り入れた教育コンテンツとして、構造から物性を予測するカルタや反応経路のカードなどを用いた研究も行わ

れている [4][7]。紙ベースのゲーム以外にもメディアとしてアニメーションなどを用いた教育についても研究が行われている [8]。さらに近年、様々な視覚デバイスが開発されたことに伴い表現手法が多様になり教育コンテンツにおける Virtual Reality, VR の利用なども行われている [9][10][11][12]。

化合物に対する分子描画ソフトウェア自体は分子モデリングソフトウェアとして VR での実装を含め、様々なソフトウェアがすでに開発されている [13][14][15][16]。しかし、これらのソフトウェアはデバイス依存性やプログラミング言語的な制約、ソースコード開示状況、ライセンスなどの理由で、新規の研究・教育用アプリケーションへの再利用が困難である。そのため、毎年のように新規デバイスが世に出ているにも関わらず、分子描画ソフトウェアの開発はそれに追いついていないのが現状である。この問題を解決するため、化合物に関する新規アプリケーションの開発に適するライブラリが求められている。

2. 目的

本プロジェクトでは、化学教育、情報化学などに応用可能な分子描画ライブラリ Galahad [17] を作成することを試み、その試験公開によって得られたデータからのユーザーインターフェース (UI) に関する検討を行うことを目的とする。

Galahad の作成においては、ドメイン駆動設計 (Domain Driven Design, DDD) を行うことで、ドメイン知識を中心に据える。また、クロスプラットフォームゲームエンジンである Unity 上で作成することにより、種々のデバイスでの実装を容易に行えるようにする。

また、Galahad を利用して化学教育コンテンツを作成し、中高生に試用してもらい、中高生が当該コンテンツを利用

^{†1} 大阪大学大学院薬学研究科
^{†2} 株式会社マイスター・ギルド

する際、どのようなUIが必要になるか検討を行なう。

3. ソフトウェア開発指針

3.1 Unityによるソフトウェア開発

Unity はゲームエンジンであるが、建築分野や医療分野など様々な分野で応用されており、VR や AR などを用いたアプリケーションの開発が近年目覚ましい[18][19][20]。また、教育用のコンテンツの開発でも、Unity は開発エンジンとして利用されている[21][22][23]。Unity はクロスプラットフォームでのビルドができるよう様々なデバイスに対するサポートが行われているため、Unity 上でソフトウェアを開発すれば、容易に異なるデバイスに実装することが可能である。また、定期的に新しいバージョンに更新されており、それに伴い新しい技術の利用を容易にしている。

加えて、Unity 以外の開発者によるプラグインの開発・販売も Unity Asset Store 上で行われており、これらを使うことで必要な機能を取り入れやすくなる。今回は分子描画ライブラリ Galahad と、Galahad を用いた教育用コンテンツという、二つのソフトウェアを作成している。Galahad は OSS での開発を指向して作成されているため Unity Asset Store 上のアセットの中でも公開ライセンスのものを利用しているが、教育プログラムに関しては有料のアセットも使用している。このように、Unity Asset Store を使用することにより、目的に応じて、別の開発者が Unity 上で開発した優れたコンテンツを容易に取り入れることが可能となる利点がある。

3.2 ドメイン駆動設計

ドメイン駆動設計 (DDD) は Evans[24]によって提唱された、プロジェクトの中心をドメイン側の知識を元に構築するという設計手法である。ここでいうドメインとは、プログラミングによって効率化や描画を行いたい対象であり、業務効率化ソフトウェアでは対象となる業務のことになる。通常、ドメイン知識に対する実装が複雑になることが多いので、ドメイン知識を中心に添えることで、ドメイン知識がなくとも自然と実行可能なUIを実装することができる。また、ドメイン知識やその専門用語を元に設計することで、問題に対してプログラマ側とドメインエキスパート側で議論を、用語を統一した上で行うことができる。ドメインエキスパート側の用語を開発に用いるようにすることが DDD の特徴であり、このときに用いられるドメインエキスパート側の用語をユビキタス言語と呼ぶ。DDD においては、初めにドメインエキスパートと議論してドメイン上のコンテキストを考えることを推奨している。このドメイン上の幾つかのコンテキストに分けることで、それぞれのコンテキストごとに独立して議論を行うことができ、また必要な実装を絞った開発を行うことができる。コンテキスト内には事柄を表すエンティティと、性質を表す値オブジェクト

が定義され、両者の関係や働きが、ドメイン知識に基づいて実装される。また、これらの関係の中で必要な整合性の単位として、集約を定義する。以上で、ドメイン上で必要なルールを実装可能とすることができる。

今回我々は、DDD による設計を、有機化合物に対して行なった。Galahad では、分子の描画 (MoleculeViewer) が一つのドメイン上のコンテキストになる。このコンテキスト内において、ドメイン的な観点からの集約として「分子」(Molecule) を設定した。「分子」は、全電荷の不変性や原子の数の不変性を示す整合性の最小単位 (この単位は分子が担保するのが自然であるため、「分子」と呼んだ) で、エンティティとしては「分子」(Molecule) と「原子」(Atom)、「化学結合」(IChemicalBond) が対象となる。値オブジェクトとしては「形式電荷」(FormalCharge) や「原子番号」(AtomicNumber)、「結合次数」(BondOrder)などを定義した。分子のエンティティは集約ルートとしてこれらのエンティティや値オブジェクトをまとめる。DDD では集約に対してインスタンスを保持する場所をリポジトリとして作成する。今回はリポジトリとして Unity のスクリプタブルオブジェクトを利用した。

3.3 MVP (Model View Presenter) パターン

以上のドメインモデルを元に、MVP パターンを用いて Galahad 及びそのコンテンツの実装を行なった[25]。この手法は、プログラムをモデルとビューとプレゼンターに分けて設計する方法である。これによって、ドメインモデルとレンダリングに対して独立性の高い設計が行える。

モデルは、ドメインのデータ保持、データの書き換えロジックをメソッドとして公開、データが書き換えられた時、通知を発行する、と3通りの働きを受け持つ。ビューはユーザーへの表示やユーザーの操作の通知などの働きを受け持つ。プレゼンターはモデルからイベントの通知があれば、適切にビューに渡しレンダリングを行わせ、逆にビューからユーザーの操作としてイベント通知があった場合、それに応じた操作をモデルに対して行う。

なお、MVP パターンは、先述の DDD との併用を自然に行うことが可能である利点を持つ。

4. アプリケーション・考察

4.1 分子描画ライブラリ Galahad

先述のように、Galahad の開発指針としては、DDD による実装とドメイン知識の分離である。この指針に沿って、ドメイン側の開発とデバイス依存のアプリケーション実装、分離を行なった。また、コンテキスト毎に Grail として分けることで、独立性を保てるようにしている。基本的には、分子出力、処理エンジンとしてドメイン側の機能のみで新規性を目指す。

4.1.1 Unity Editor 上での利用

Galahad 単独では、Unity Editor 上での動作までの開発になる。ここでソフトウェアの開発を区切ること、OSS としての開発を容易に行えるようにする。Unity では開発したアプリケーションを Unity Editor 上で動作させることが可能であり、これによって Unity Editor 上でドメインに関わるほとんどの機能を利用できる。その一方で、Unity Editor への実装自体がアプリケーションの実装例となるため、新規にコンテンツを作成する際や機能を追加する際の助けになる。

ドメイン上の機能追加は主に Galahad で行うことになる。Galahad 開発時には、Unity Editor 上での利用を目的とするアプリケーションの開発で区切られるため、実機ビルドなどの時間を省略することができる。図 1 は、Galahad を用いた分子の描画を Unity Editor 上で行なったものである。

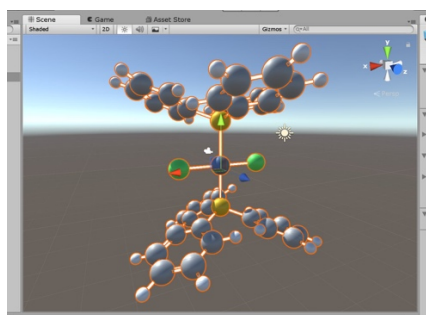


図 1 Galahad による分子の描画

外部ソフトウェアからの WebAPI を介した連携も Unity Editor 上で行える。例えば、分子計算ソフトの一つである RDKit[26]との連携をすることで、別のソフトウェア上で生成された分子データを Unity Editor 上で視覚化することができる。今後、分子記述子計算ソフトウェア Mordred やフィンガープリント計算ソフトウェア Avalon[26], Morgan[26]との連携を行なって、結果の表示などを実装する予定である。

4.1.2 異なるデバイスへの対応

Galahad を用いて Unity Editor 上以外の別デバイスへの展開も可能である。DDD では、アプリケーション層からのドメインの機能は利用できるため、デバイスごとに適切に実装を行うことで別デバイスへのビルドも可能である。図 2, 図 3 は Microsoft HoloLens[27]と Oculus Go[28]で、Galahad を用いたソフトウェアを実装した時の画像である。前者は AR, 後者は VR であるため、デバイスによって性能や求められる UI は異なる。しかし、MVP パターンを用いて設計することで、実装者はドメイン知識から独立してユーザーインターフェースやレンダリングの最適化を行うことができる。

このように種々のデバイスでの開発を行う際は、Galahad を用いた別のアプリケーションの開発という形にすることで、独立したプロジェクトとして扱える。

今後の方針としては各種デバイス毎の分子表示に有効なインタラクションの考慮や、化学教育などでの利用を行う予定である。インタラクションや教育は、DDD ドメインの別コンテキストとして見る事が可能であるため、各々から見て十分に興味深い対象になる場合は、インタラクション又は化学教育を DDD 的な手法を用いて分離させることで、これら自体も分子描画コンテキストやデバイスの種類から独立して研究・開発を行うことができる。

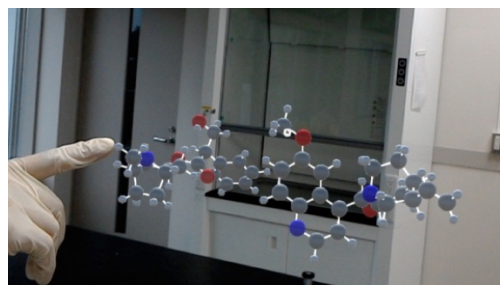


図 2 HoloLens による分子の描画

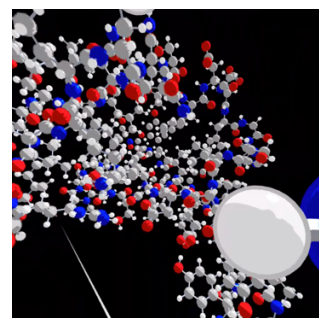


図 3 Oculus Go による分子の描画

4.1.3 化学反応機構への展開

Galahad の更なる展開として、曲がった矢印形式の実装を DDD における別コンテキスト上で行なった。有機合成において有機電子論は重要な役割を果たしているが、有機電子論では曲がった矢印形式を用いて、化学反応等が表されることが多い。従って、曲がった矢印形式による表現を元に電子の流れを定義し、反応についてのメカニズムの解釈を行ったりして、目的の化合物の設計に資することができる。このため、曲がった矢印形式による化学表現の DDD に基づく実装を行った。

図 4 は酸性アルコール条件下でのアセトアルデヒドとメタノールの反応における電子の流れを、曲がった矢印の形式で表したものである。アルコールとアルデヒドの反応であるが、この反応はアルコールの酸素原子上に存在する電子対がアルファ炭素上に求核攻撃し、(有機電子論的には)結合上にある電子がアルデヒド上の酸素原子上に移動し、近くの水素イオンと結合を生成する。これによってヘミアセタールが生成するが、可逆反応であるため、何も起こらなると左矢印の反応のように、元のアルデヒドとアルコールに戻る。これを図 5 のように Unity Editor 上で描画でき

るようにした。

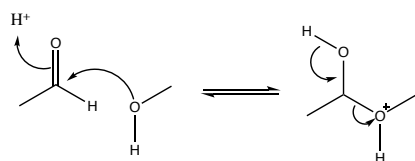


図 4 酸性条件下のアルデヒドとメタノールの反応

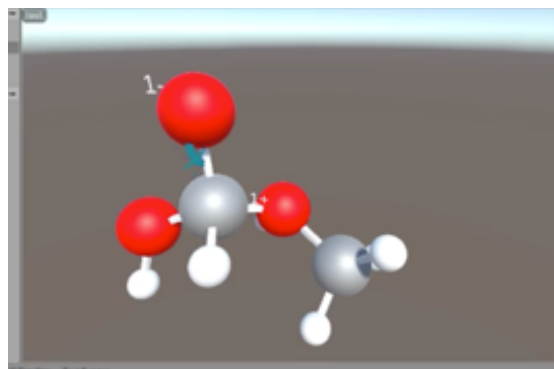


図 5 Unity Editor 上での曲がった矢印形式の表示

今後、このコンテキストの UI についての実装を行っていく予定である。例えば、電子の流れを VR 空間上、レーザーポインタで結合していくことで、別の化合物を生成する機能を実装したい。ただ、分子同士の向きが適切な配置でなかったりして、矢印の流れが奥行きも含め三次元に渡って連なっていると操作が困難である。これらについての設計方針に関しては、インタラクションの専門家の協力を仰ぐことができれば幸いと考えている。

4.2 応用例 VR 化学教育コンテンツ

教育コンテンツとして、Galahad を用いて VR による化合物のゲーム「化合物ストラックアウト」を作成した。VR デバイスは Oculus Go を用いた。Oculus Go は廉価なスタンドアロン型の Head Mount Display, HMD であり、ユーザーは図 6 のようなコントローラーを用いて仮想空間中のオブジェクトを操作することができる。



図 6 Oculus Go とそのコントローラー [27]

4.2.1 教育目的

今回、対象を非薬学領域の一般の小中高生と大人に定めた。このため、学習目的と学習目標を表 1 の通りに設定した。

表 1 学習目的と学習目標

内容	詳細
学習目的	有機低分子の構造を理解する
学習目標	低分子薬に立体構造があることを理解する
	低分子の二次元構造と三次元構造の対応をつけることができる (一般の人は薬の 3 次元構造に馴染みがない)
	有機分子が少数の原子で構成されていることを理解する (原子の種類ではなく、分子の形が重要)

これらの学習目標を達成するために、化合物ストラックアウトを作成した。化合物ストラックアウトでは、図 7 のように、ランダムに生成する化合物の二次元構造の的に対して、対応する三次元構造の化合物を投擲することで得点を得るゲームである。化合物はコントローラーと動きが同期する仮想空間上のレーザーポインタを当てた状態で、ボタンを押すと掴むことができ、ボタンを離すと放つことができる。化合物と的の生成の仕方は、図 8 の左側画像のような二次元の構造が描かれた的と右側の画像のような化合物の三次元のオブジェクトが、5 秒ごとに同時に追加生成されていく。

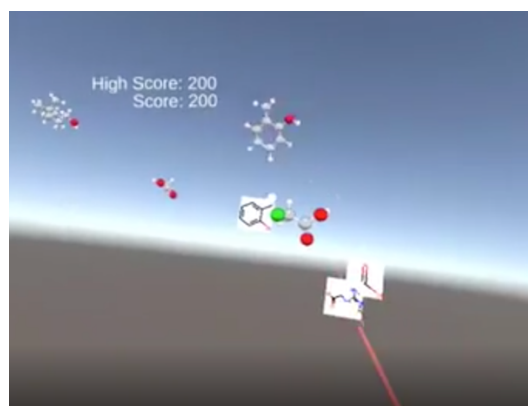


図 7 ゲーム画面

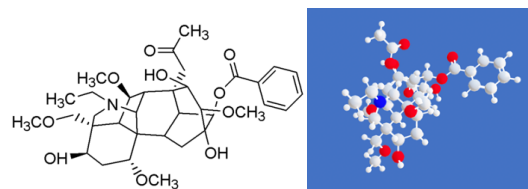


図 8 アトロピン の二次元構造と三次元構造

このゲームを行い高得点が取れるようになるまでプレイすることによって、学習目標の一つである、「低分子の二次元構造と三次元構造の対応をつけることができる」を達成することができる。また、二次元構造と対応しているかどうか確認するため、投げつける前に三次元構造を任意の方向から仮想空間上で確認できるようにすることで、「低分子

薬に立体構造があることを理解する」は容易に達成することができる。

4.2.2 操作性

ここでは今回作成した化学教育用コンテンツの操作性について言及する。今回の場合、化合物を投げつけることそのものは重要でない。なぜなら、目的は二次元構造と三次元構造を対応させることであるためである。すなわち、ある標的に描かれている二次元構造に対応する三次元構造を持つ化合物を適切に投げることができるかが重要であり、これが得点を得る上で最も高いファクターになるべきである。そのため、単純に操作が拙いことによる得点の減少はできる限り避けるべきと考えた。高得点圏においてはこの限りでない。

以上、操作性に関する二つの操作方法を表 2 の通り実装した。

表 2 化合物に対する操作の実装方法

実装方法	詳細
補助なし	二フレームの速度の平均を用いて、直線的に投擲させる（重力なし）
補助あり	照準上の的に対して、放物線状に投擲され、ぶつかる（重力あり）

表 2 に関して、研究室内のメンバーが試みたところ、補助有りの方が格段に楽しめるとのフィードバックが得られた。補助無しの実装については、複数回行なっても、一つも的にあてることのできないなどのメンバーが散見された。また、化合物を的に当てるのを諦めて、無限遠に飛ばして遊ぶなど、本来の楽しみ方と異なる遊び方をするメンバーもいた。教育用ゲームについての観点から見ると、本来の遊び方以外の遊び方では教育効果が減弱すると考えられるので、正しい遊び方を導けるようなインタラクションを提供することが重要であると考えられる。一方、補助有りの場合は、実装としての的に照準が合っていない限り、化合物を投擲できない実装であったので、先のような本来の楽しみ方と異なる遊び方を防ぐことができた。

4.2.3 大学祭での展示

このようなフィードバックの後、大阪大学の大学祭の一つである 2019 年度いちょう祭の薬学部棟の催しにおいて補助有りのコンテンツについて公開した。

Oculus Go は二台用意し、両方とも他のデバイスで装着者の映像を外側から見るようにした。主な参加者は小・中学生の子供連れの家族や高校生であった。この時、7 歳以上 13 歳未満の子供に対しては保護者の同意を取ってから提供を行なった。7 歳未満の子供には利用させなかった。

展示の仕方は、展示者（1 名）が参加者（最大 2 名）と

テーブルを挟む形式だった。大まかな流れとしては、コンテンツの目的と操作方法を手短かに説明した後、片方の参加者に HMD を装着してもらい、適切に操作出来るようになるまで外部のディスプレイで確認しながらアドバイスをするという方式をとった。

概ね説明していく中で要領を理解すると楽しんでもらった。ただ、いくつかの点で操作中に手間取ることが多く、最初の手短な説明のみでまったく躓かずに操作できた人は非常に少なかった。表 3 に、操作中に躓いていた要素と考えられる原因、対処法を示す。

表 3 操作中の躓きとその原因・対応

操作中の躓き	考えられる原因・対応
コントローラーの持ち方が違う	参加者が対象のデバイスに慣れていないため 展示者が参加者の手を取って直接持ち方を示した
ボタンの押し違い	参加者が対象のデバイスに慣れていないため 展示者が参加者の指に直接触れてどの指で押すべきか示した
レーザーポインタで画面上のボタンを押せない	画面上のボタンのどれを押すべきかわからないため 初見では距離感が掴めないため レーザーポインタが画面上のボタンの上に乗っているかどうかの判別がつかないため 実機のコントローラーと仮想空間上のレーザーポインタの向きがずれているため 展示者による声がけのみの指導を行なった 必要に応じて展示者が参加者の手を取ってボタンを押せる場所まで参加者の手を動かした
化合物をレーザーポインタで掴めない	レーザーポインタを扱えていないため 遠くにあるとレーザーポインタがのっているか視認できないため 何回も試すようアドバイスした
化合物をすぐ放してしまう	参加者にボタンを押し続けなければ掴めないということが伝わってなかったため ボタン押し続けるようアドバイスした
照準に気づかない	奥の方に照準を配置したので化合物の裏に隠れてしまったため 首を動かして視点に追従する真ん中の白い点を探そうアドバイスした
首を動かして狙いを定めることができない	参加者が首を動かしても物を見ないため 参加者にヘッドトラッキングできるという認識がなかったため 首で動かすことをアドバイスした
投擲するときに首が動いて照準から外れる	投げるときに首を止めるようアドバイスした
化合物が別の化合物にぶつかる	急いで投擲するようアドバイスした
音量が大きくて外からのアドバイスが聞こえない	音量を下げた

コントローラーの持ち方が違うことについては、参加者

が HMD を装着していることもあり、手元が見えないので、展示者が直接参加者の手を取って持ち方を変えてもらうように指導した。

ボタンの押し違いについては、正規の持ち方で持つよう指導した後、人差し指で押さえるよう指示した。操作できない場合、どの指にあるボタンを押すべきかを展示者が直接指で触って示した。

他の例として、通常のボタンで押して画面に変化がない時、驚いて違うボタンを押す参加者が見られた。これは投擲する際に視線が的からずれると何も動作が起こらないように見えるためと考えられる。ボタンを押すと何かしら反応が視認できるような UI を作るべきと考えられる。

化合物がレーザーポインタで掴めないことに関する主な理由としては、遠くに化合物があった場合、相対的に当たり判定が小さくなってしまふためと考えられる。そのため、遠くにある化合物を容易に掴めるようにするための UI が必要になると考えられる。

化合物を短時間で放してしまうことに関しては、今回の場合は展示者が声で指示したが、どのように対応すべきか今後の課題と思われる。

照準に気づかないことに関しては、照準が的と化合物の間にあることに起因して、化合物が増えると照準が見え難くなるためと考えられる。照準の描画レイヤーが常に手前に来るような UI を作ることで解決できると考えられる。

首を動かして狙いを定めることができないことに関しては、参加者がヘッドトラッキングに慣れていない、あるいは存在を知らないためと考えられる。VR を使う以上自明とも取れる機能だが、このような人に首を動かしてもらえよう UI をどう作るかも、今後の課題と捉えている。

投擲するときに首が動いてしまうことに関しては、照準をストックすることができるようにするなどの UI の改善方法が考えられる。

また、興味深い現象として、操作している人を見ていた参加者は、すぐに操作できるようになることが多かった。他人が HMD を被りながら説明を受けていたのを、装着者が見ている映像を含め外部から見ているためと考えられる。この状況をチュートリアルなどで擬似的に作成し、説明手法として利用できる可能性がある。

操作が上手な人の場合、視界の端にある化合物を掴んで投げるなどのトリッキーなプレイをすることがある。展示者が十分にゲームプレイに慣れていないと、このようなプレイに対して指導を入れるべきか分からなくなる恐れがある。今回は展示者が開発者だったため何をしているか分かったが、展示者が操作に慣れていない人だと説明できなかった可能性がある。これについても解決策を考える必要がある。

4.2.4 今後の指針

今後、教育対象や目的を変えて、それに合わせたコンテンツを作成していく予定である。それらの違いによって、求められる UI は異なり、設計方針も違うと考えられる。この点について、インタラクションの専門家の協力を仰ぎたいと考えている。

また、ドメイン側の実装としてイベントの保持などを行う予定。イベントは DDD の文脈で設計パターンになっており、これを利用することで、操作に対する情報をデータとして取ることができる。これらのデータを解析することで、インタラクションの設計の指針にする予定である。また、専用のイベントを実装すれば Unity が提供する機能を使って不特定多数のデータも取得することができるため、この機能の利用も考える。

5. まとめ

以上、本プロジェクトで開発した Unity による分子描画ソフトウェア Galahad について解説した。Galahad はドメイン駆動設計に基づいて設計されており、開発者はドメインエキスパートとの議論を含め、非常に短いサイクルで化合物に関する新規アプリケーションの開発を行えるようになると思われる。また同じく今回開発した、Galahad を用いた VR 化学教育プログラムについても解説した。今後、幾つかの操作において、インタラクション側の改善が必要と考えており、インタラクションの専門家との共同研究を考えている。

謝辞 この研究は株式会社マイスター・ギルドとの共同研究「複合現実を使用した分子構造の視覚化と共有」で行われた。

参考文献

- [1] Adbo, K.; Carulla, C. V. Designing Play-Based Learning Chemistry Activities in the Preschool Environment. **2019**. <https://doi.org/10.1039/c8rp00306h>.
- [2] Connor, M. C.; Finkstaedt-Quinn, S. A.; Shultz, G. V. Constraints on Organic Chemistry Students' Reasoning during IR and ¹H NMR Spectral Interpretation. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2019**. <https://doi.org/10.1039/C9RP00033J>.
- [3] Rodriguez, J.-M. G.; Bain, K.; Towns, M. H.; Elmgren, M.; Ho, F. M. Covariational Reasoning and Mathematical Narratives: Investigating Students' Understanding of Graphs in Chemical Kinetics. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2019**, *20* (1), 107–119. <https://doi.org/10.1039/C8RP00156A>.
- [4] Seavian, H.; Couture, S. Epistemic Games in Substance Characterization. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2018**, *19* (4), 1029–1054. <https://doi.org/10.1039/C8RP00047F>.
- [5] Emden, M.; Weber, K.; Sumfleth, E. Evaluating a Learning Progression on 'Transformation of Matter' on the Lower Secondary Level. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2018**, *19* (4), 1096–1116. <https://doi.org/10.1039/C8RP00137E>.
- [6] Caspari, I.; Kranz, D.; Graulich, N. Resolving the Complexity of

- Organic Chemistry Students' Reasoning through the Lens of a Mechanistic Framework. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2018**, *19* (4), 1117–1141. <https://doi.org/10.1039/C8RP00131F>.
- [7] Galloway, K. R.; Leung, M. W.; Flynn, A. B. Patterns of Reactions: A Card Sort Task to Investigate Students' Organization of Organic Chemistry Reactions. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2019**, *20* (1), 30–52. <https://doi.org/10.1039/C8RP00120K>.
- [8] Yaseen, Z. Using Student-Generated Animations: The Challenge of Dynamic Chemical Models in States of Matter and the Invisibility of the Particles. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2018**, *19* (4), 1166–1185. <https://doi.org/10.1039/C8RP00136G>.
- [9] Babilonia-Rosa, M. A.; Kuo, H. K.; Oliver-Hoyo, M. T. Using 3D Printed Physical Models to Monitor Knowledge Integration in Biochemistry. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2018**, *19* (4), 1199–1215. <https://doi.org/10.1039/C8RP00075A>.
- [10] <http://www.baaden.ibpc.fr/umol/>
- [11] <https://github.com/JBostrom/MolecularRiftv2>
- [12] Amabilino, S.; Bratholm, L. A.; Bennie, S. J.; Vaucher, A. C.; Reiher, M.; Glowacki, D. R. Training Neural Nets to Learn Reactive Potential Energy Surfaces Using Interactive Quantum Chemistry in Virtual Reality. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.9b01006>.
- [13] Gang, S.-M.; Choi, H.-W.; Kim, D.-R.; Choung, Y.-J. A Study on the Construction of the Unity 3D Engine Based on the WebGIS System for the Hydrological and Water Hazard Information Display. *Procedia Eng.* **2016**, *154*, 138–145. <https://doi.org/10.1016/J.PROENG.2016.07.431>.
- [14] <http://jmol.sourceforge.net/>
- [15] <https://pymol.org/2/>
- [16] <http://www.openrasmol.org/>
- [17] <https://github.com/kyusque/Galahad>
- [18] <https://www.hpc.co.jp/chem/software/gaussview/>
- [19] Abrar, T.; Mary, Q.; Hafiz, &; Ali, H. Integration of Oculus Rift Based Virtual Reality with Unity 3D in a Driving Simulator Internship Report Integration of Oculus Rift Based Virtual Reality with Unity 3D in a Driving Simulator. **2016**. <https://doi.org/10.13140/RG.2.1.5167.0648>.
- [20] IOP Conference Series: Earth and Environmental Science Using Game Engine for 3D Terrain Visualisation of GIS Data: A Review. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/20/1/012037>.
- [21] Pan, Z.; Cheok, A. D.; Yang, H.; Zhu, J.; Shi, J. Virtual Reality and Mixed Reality for Virtual Learning Environments. *Comput. Graph.* **2006**, *30* (1), 20–28. <https://doi.org/10.1016/J.CAG.2005.10.004>.
- [22] Wang, D. Gamified Learning through Unity 3D in Visualizing Environments. *Neural Comput. Appl.* **2018**, *29* (5), 1399–1404. <https://doi.org/10.1007/s00521-017-2928-5>.
- [23] Laine, T.; Laine, H., T. Mobile Educational Augmented Reality Games: A Systematic Literature Review and Two Case Studies. *Computers* **2018**, *7* (1), 19. <https://doi.org/10.3390/computers7010019>.
- [24] Evans, E. Domain-Driven Design: Tackling Complexity in the Heart of Software. Addison-Wesley **2004**
- [25] <https://www.martinfowler.com/eaDev/PresentationModel.html>
- [26] <https://www.rdkit.org/>
- [27] <https://www.microsoft.com/ja-jp/p/microsoft-hololens-development-edition/8xf18pqz17ts>
- [28] <https://www.oculus.com/go/>