

分子構造模型表示の造形について

On Molding of the Display of Molecular Structure Models

長尾輝夫

Teruo Nagao

E-mail:nagao@hakodate-ct.ac.jp

函館工業高等専門学校 物質工学科

Department of Material and Environmental Engineering

Hakodate National College of Technology

概要：化学系の分野で、教育・研究面で物質の微視的構造をコンピュータ上で観察することが多く、ステレオ表示などで、より立体的に表現できる有効な手段である。しかし、物質の構造を学ぶ者にとって、実体のない仮想現実のものであるため、実際に手にとり、観察できる造形物の方が、なお一層、物質の微視的構造を理解できると思われる。そこで、本研究では、製造業で物作りに利用されている最新の3次元造形法を用いて、現状ではまだ中低分子や簡略化した物質（分子）構造の模型表示の造形（再現）ではあるが、正確な物質の構造を造形し、教育・研究面で有効な教材を提供する新しい方法を紹介する。

キーワード：分子模型、光造形、積層造形、切削加工、レーザー彫刻、3次元造形

1. はじめに

現在、環境・生物・材料など多くの化学系の分野では、日常的に、空間充填模型をはじめとした分子模型が利用されている。特に、パソコンの急速な発展によって、コンピュータ上に分子模型を表示して、分子（物質）の構造の理解を深めることができ、さらに、ステレオ表示により、より立体的に構造を表現できるようになってきた。フリーの優れた分子表示ソフト（文献1）も増えてきたので、身近に、安価に分子の構造を観察することができる。しかし、これら表現方法は、あくまでも実体のない仮想現実なものである。一方で、丸善のHGS分子構造模型（文献2）、発泡スチロールの分子模型（文献3）、折り紙の分子模型（文献4）など実体のある模型による近似表現は、その需要をみても、物質の構造を学ぶ者や研究者にとって、物事を理解する上で、視覚だけでなく、触感など他の感覚も同時に使うことが重要である。（開発者や設計者が模型やミニチュアを作成し、対象物をイメージする行為は、物作りに携わるとその重要性は十分理解できる）また、最近の先端分野の研究開発において、ナノレベルの材料開発が盛んに行われ、物質の構造を認識するため、微視的構造をコンピュータ上で、分子の模型表示や量子化学計算による全電子密度表示などで表現することも頻繁に行われている。いずれも、ナノレベルの微視構造を人間の視覚レベルに正確に拡大して理解する方法で、人間が理解する上で重要な手段であるが、従来、これらを系統的に造形し、実体化した例はみられない。

本研究は、物質の微視的構造表現を視覚レベルに拡大して、数～数十 cm の可視的な実体物とするため、製造業やアートの分野でよく用いられている最新の3次元造形手法（光造形法、積層式造形法、切削加工法、レーザー彫刻法など）を用いて、正確に造形（再現）する方法で、従来行われていない新しい教材を提供する試みである。

2. 分子模型表示

分子（構成する原子）の模型表示には、原子を van der Waals 半径の球とした、球の集まりで近似した代表的な空間充填模型や結合を棒で表した棒球模型があるが、その他にも、針金模型、棒模型がある。また、生化学などで複雑な蛋白質などは、簡略化したリボン模型、蛇状模型、矢状模型、円柱状模型などがあり、さらに、金属、無機結晶や錯体化学などでは金属原子などの配位状態を理解するため多面体模型が用いられる。分子軌道法を用いて計算された全電子密度の等値面の表示は、模型表示とは異なる分子表面を表している。分子模型表示はあくまでも人間にとって、理解の手助けする手段で、原子毎の色分も任意なもので、原子に色がついているわけではないことも十分認識しておく必要がある。

これらの分子模型や全電子密度の等値面を表示するには、分子の座標データが必要で、分子軌道法や分子力学法を用いて構造を最適化した正確な座標データ（最近の多くの分子モデリングソフト（文献 5）にはいずれかあるいは両方法が含まれている）を作成するか、公開されている蛋白質立体構造データ Protein Data Bank（文献 6）を利用する。また、最近では、分子座標データとして、ネット上でも有機・無機分子など数多くが公開されている。（文献 7）これらを用いて表示することができる。

3. 表示から造形への変換

分子の模型表示した構造のデータ（球、棒、針金、リボン、矢、円柱、多面体など）は、コンピュータグラフィックス（CG）系のデータであり、一般的に分子模型表示ソフトは、表示できれば役割は果たされるため、表示機能と分子座標データの保存機能、ソフトによっては、画像データ（bmp ファイル）の保存機能はあるが、CG 系データや造形データの保存機能は持っていない。最近、パソコンでも優れた表示機能を持った CG ソフトが増えてきたため、特定の分子座標データファイルから 3 次元造形データに変換するソフトが現れ、その一つに、McNicols 氏の“MoIDXFw”ソフト（文献 8）や Walker 氏の“CINECHEM”ソフト（文献 9）などがある。棒球模型と空間充填模型に対応し、それぞれ PDB 形式の座標データから DXF 形式（オートデスク（株）の標準的な CAD データ）の造形データへ変換し、また、HIN 形式（“HyperChem”のデータ）の座標データから 3DS 形式（オートデスク（株）の“3D Studio”のデータ）の造形データに変換する。この他に、現在、最も優れた変換ソフトとして、旧 Molecular Simulations Inc. の“WebLab ViewerLite”無償ソフト（現在は、Accelrys Inc. で“DS ViewerPro”で販売されている）がある。（文献 10）PDB、mol、csd 形式など多くの分子座標データ形式に対応し、その分子模型の表示を CG 系のデータである wrl データ（Virtual Reality Modeling Language：VRML 形式）に変換することが出来き、また、多くの分子模型表示に対応する。この後、任意の 3D CAD や 3D CG ソフト（文献 11）を用いて、3D CAD 系のデータ（DXF 形式データなど）に変換する。また、棒球模型と空間充填模型の wrl データへの変換機能は、吉田氏の“MOLDA”にもある。さらに、全電子密度の等値面や分子軌道の表示を wrl データへ変換するソフトには、Schaffenaar 氏の“MOLDEN”（文献 12）がある。これらのソフトによって、ディスプレイ上に描かれた様々な分子模型表示が CG 系のデータ（VRML 形式のデータ）を経由して、3D CAD 系の造形データ（DXF 形式データ）に変換することができる。ただし、空間充填模型などで、球が重なる場合、コンピュータ表示では、重なり部分は表示されないが、造形データではブーリアン演算の和の処理が必要である。

4. 造形方法

最近の製造業において、製品開発の時間短縮と低コストが生き残りをかけた重要な課題となり、ラピッドプロトタイピングと言われる積層造形法（試作品を高速に製造する技術で、3 次元 CAD により設

計した機械部品のデータから直接、種々の材料を薄い膜状に積層して機械部品を製造する技術である)が急速に発展してきた。また、造形法として、従来からの切削・研削加工法も広く用いられている。一方、材料の分野でも、マイクロテクノロジー、ナノテクノロジーと急速な発展により、従来の機械分野から化学系の分野も取り組んだ分子レベルの設計開発が必須になってきている。その開発手法として用いられている中で、切削加工法、最新の積層造形法(光造形法、インクジェット式造形法、インクジェット・粉末焼結造形法)、さらに、新しい表現法であるガラスへの3次元レーザーマーキング法について簡略に示す。

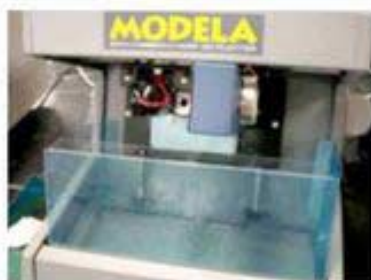
1) 切削加工法

切削加工には、ローランドディー・ジー・社より発売されている小型、安価な3軸同時制御可能な3Dプロッター「モデラ」(文献13)MDX-3およびMDX-20を用いた。MDX-3はモーターが5Wで、MDX-20より小さく、あまり硬い材料(アクリル樹脂や軽金属)の切削は難しい。切削に用いたエンドミルは、径1mm~6mm、有効刃先5mmから40mmであり、MDX-20の最大動作範囲:203.2mm(幅)、152.4mm(奥)、60.5mm(高さ)、MDX-3は、最大動作範囲:152.4mm(幅)、101.6mm(奥)、40.65mm(高さ)である。切削加工材料として、発泡スチロール、モデリングワックス、ケミカルウッド、木材、アクリル樹脂などを用いた。

また、切削加工した原型を用いて、石膏やシリコンゴムで鋳型を作り、複製も試みた。(文献14)



エンドミル



MDX - 3



MDX - 20

2) 積層造形法(光造形法)

光造形法は、紫外線硬化型の樹脂(感光性樹脂)へ対象物の立体形状をスライスした断面の形状に沿って、スキャンし、紫外線レーザーを照射して、樹脂を硬化し、積層していくことにより、対象物を再現していく方法である。ここでは、(有)「せかい」に依頼し、(株)メイコーの形状モデリングシステムLC-510を用いて造形した。(文献15)

3) 積層造形法(インクジェット式造形法)

対象物の立体形状をスライスした断面の形状に沿って、加熱溶融した熱可塑性樹脂をインクジェットのノズルから連続的に滴下し、堆積させて、固化する方法で、これを繰り返し走査し、積層させて、立体造形物を作成する。製作を依頼した豊田工機(株)販売(現在はDigital Integrator Companyとなった)のインクジェット式3次元造形機Model Maker-II(文献16)は、積層用樹脂とサポート用ワックスをノズルから噴射し、上面を超硬カッターで削り取り、適度の高さ平坦度を出しながら積層していく方法である。最後にサポートのワックスを除去して、完成する。

4) 積層造形法 (インクジェット・粉末焼結造形法)

この積層造形法は、薄く引き伸ばしたでんぷんや石膏ベースの粉末(今回は、石膏ベースの粉末)に、対象物の立体形状をスライスした断面の形状に沿って、シアン、マゼンタ、イエローの3色とクリアの4色を加えたインクジェットのノズルからバインダーを射出して、石膏ベースの粉末を固着する方式であり、3D カラープリンターと言える。製作は、豊田通商(株)(現在は Digital Integrator Company となった)に依頼した。用いた装置は、高速3次元プリンタ Z402C™System である。(文献 17)

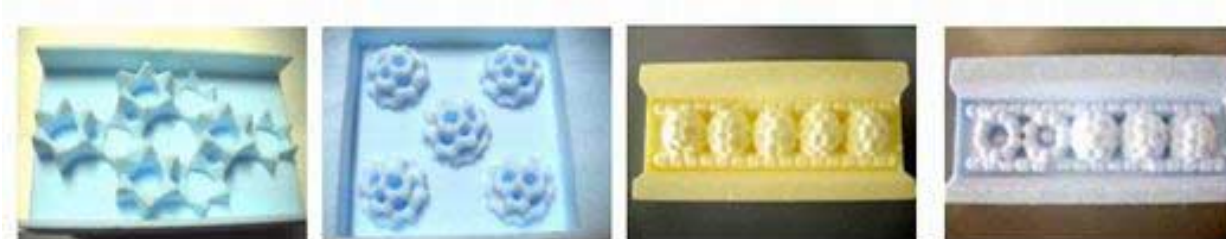
5) 3次元レーザーマーキング法

この方法は、他の造形法と異なり、透明な物質(ガラス等)内部にパルスレーザーを集光させて照射し、集光部にマイクロクラックを発生させ、ドットイメージで、立体形状を再現する方法である。標準的な解像度はX-Y面が約2.5dots/mm、Z面が約1.5dots/mmで、ワーク領域は70×70×80mmである。(文献 18) 製作は、(株)コスモテックに依頼した。装置は3D グラスマーキングシステム RSM OSC 10 である。(文献 19)

5. 造形例

1) 切削加工による造形例

切削材料として、発泡スチロールを用いた造形例で、一方向での切削という制限はある。(文献 14)



Zeolite (TH)

BuckyBall (Crystal)

(Gd@C₈₂)₅@SWNT

(Gd@C₈₂)₅@SWNT 一部切断

ロストワックス、ケミカルウッドの造形例である。



Dioxin (2,3,7,8-TECDD)

Dioxin (2,3,7,8-TECDF)

Nanotube (SF&BS Model)

これらの原型から、型取りし、樹脂や石膏で複製も試みた。

また、落雁などの和菓子の菓子型を想定して造形した例を示す。(文献 15)



Kekulene

Water

Triphenylene(砂糖での試作) porphyrin

本方法は、回転軸を有する装置もあるが、基本的に、エンドミルの1軸(Z軸)方向への切削のため、重なりが多く、嵩張った分子の場合、造形が難しく、芳香族などの扁平した分子が適している。

2) 光造形法による造形例

今回、ジュエリー用途の装置のため、あまり大きな物は造形できなかった。製作上、サポートを立てる必要があった。また、形状によりサポートの立て方に工夫が必要で、変形することがある。(文献 20)



Crambin(Rings & Arrows Model) Calcite

BuckyBall (C60)

Benzene

3) インクジェット式造形法による造形例

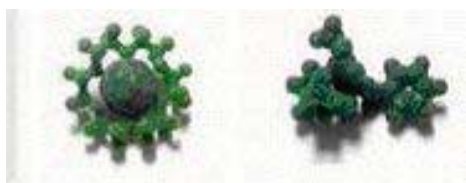
本装置もジュエリー製作をイメージしたため、小さな造形である。バッキーボールとベンゼンはサポート付の例である。光造形より、細かな造形に適している。棒球模型もきれいに再現している。ただ、消失模型のため、造形物は時間が経つとややもろくなる。(文献 21)



BuckyBall (C60)

Benzene

Cyclohexane



Crown Ether

Cocaine

4) 積層造形法(インクジェット・粉末焼結造形法)

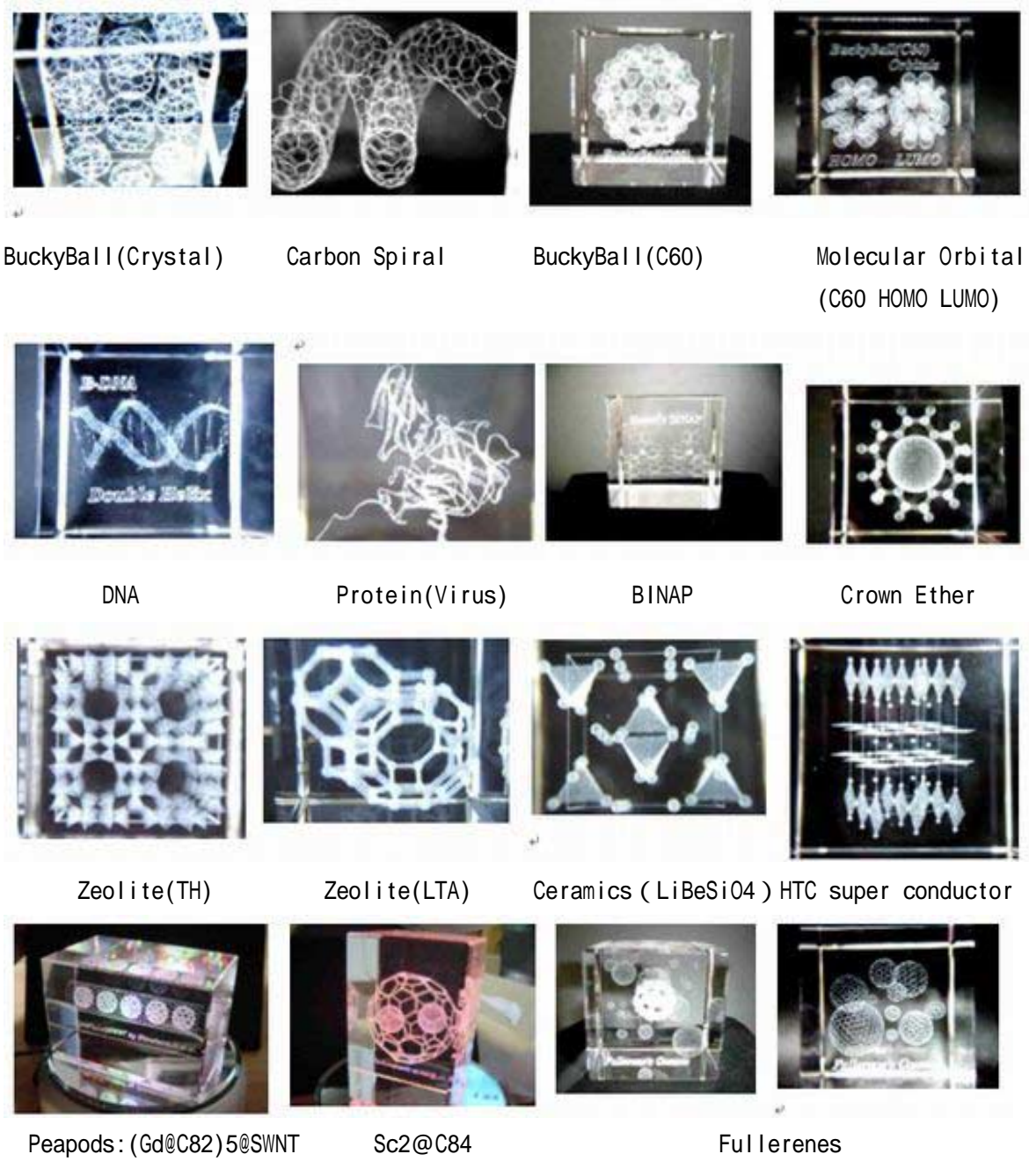
本装置は、唯一カラー造形ができ、1製作例のみであるが、原子毎の区別も明瞭で、模型としての表現力が優れている。ただ、棒球模型などの細かな細工は難しいと思われる。空間充填模型向きである。



Dioxin (2,3,7,8-TECDD)

5) 3次元レーザーマーキング法

本方法は、上記の他の方法と全く異なり、ガラスのような透明物質内に、対象物をドットイメージで再現する方法である。他の方法のように、原型を作成し、型取りして複製を作ることはできないが、サポートを立てずに、分離した原子や分子を正確に、その位置関係を保ったまま、数分で、ガラス内に再現できる特徴をもっている。針金模型をはじめ全ての各分子模型を造形できる。(文献 22) その造形例を示す。

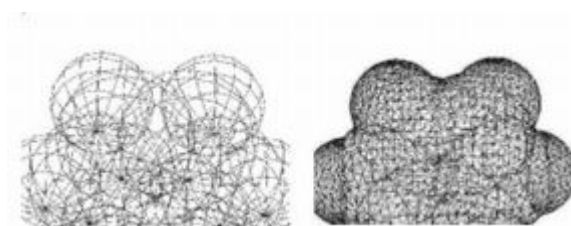


6 . おわりに

各分子構造模型の造形において、切削加工法は造形対象物の表面をなぞって切削していくため、空間充填模型の球(原子)と球の重なり部分は考慮する必要はないが、積層造形法やレーザーマーキング法ではブーリアン演算の和の処理を行わないと下図の左のように、球の集まりとして造形され、分子模型の表現としては不適である。他の模型表示も同様である。そこで、演算処理をすると重なり部分は除去

され、適正な模型表示として造形される。(下図の右)このように、コンピュータ上の表示(出力CG系データ)と造形用データは異なることが分かった。また、切削加工による方法では、C60の構造のような球形の分子の場合、内側の加工はできないが、他の造形方法では可能である。いずれの造形法においても、サポートを立てるなどの欠点はあるが、物質の構造模型を正確な位置関係を保って再現することができた。これらの方法の中で、特に、レーザーマーキング法は他の造形物とは異なり、サポートを立てないと造形できないような結晶構造や液体構造などの分離した原子や分子なども正確に造形ことができ、さらに、他の造形法では製作できない針金模型も作成できる特徴を持っている。現在は3次元のモノクロ表現であるが、従来のディスプレイや印刷物などの表現とはまったく異なる、新しい表現(出力)手段と考えられる。

最後に、HGS分子構造模型などの実体模型は残基などの回転や変形する長所はあるが、複雑な物質構造を表現するのは難しく、蛋白質の簡略表現などには対応できない。しかし、本造形法は、観測したい物質の微視構造を3次元コピーするように、正確に再現することができる特徴がある。現状の造形法では、蛋白質などの何千、何万個の原子数の分子や物質の構造を球の集まりである空間充填模型などで造形するためにはデータが膨大となり、コンピュータ処理と加工時間の点でまだ難しい面はあるが、将来は解決され、複雑な構造にも対応できると思われる。また、本造形法は、物質構造についての化学的知識や造形法の機械的な知識に興味があれば、容易に習得でき、マイクロ・ナノ材料開発の発展とともに、教育者、開発・研究者が正確な拡大模型(ミニチュア模型の逆)という新しい教材を用いて観察し、理解を高めていく手段になると考えられる。



未処理のケース ブーリアン演算処理

謝辞

造形に協力していただいた、(有)「せかい」、豊田工機(株)、豊田通商(株)、(株)コスモテック、各社に感謝します。また、PeapodsやSc₂@C84のデータを提供していただいた名古屋大学、篠原久典教授に感謝します。

参考文献

1. <http://www.umass.edu/microbio/rasmol/>、<http://www.molda.org/molda-j/welcome.htm> など
2. http://pub.maruzen.co.jp/cd_others/cdothers_top.html
3. 平尾二三夫・板倉 聖宣、「発泡スチロール球で分子模型をつくろう」、仮説社
田中一成、<http://homepage1.nifty.com/scilla/index.html>
4. 桃谷好英、「折り紙で広がる化学の世界」、化学同人
Bob Hanson : <http://www.stolaf.edu/people/hansonr/mo/>
5. 吉田 弘(MOLDA) : <http://www.molda.org/>
千田範夫(Winmostar) : <http://winmostar.com/>
HyperCube Inc. (Hyper Chem) : <http://www.hyper.com/>
CambridgeSoft Corporation (Chem3D) : <http://www.camsoft.com/>

6. The Research Collaboratory for Structural Bioinformatics :
<http://pdb.protein.osaka-u.ac.jp/pdb/index.html>
7. 本間善夫 (パソコンで見る動く分子事典):
http://www2d.biglobe.ne.jp/~chem_env/bunsi_all2w.html
Phillip Barak & Ed Nater : http://www.soils.wisc.edu/virtual_museum/alphaindex.html など
8. Matthew McNichols による MoIDXFw : 現在公開されていない。
9. John Walker (CINECHEM) : http://www.hyper.com/support/download/Other/other_index.html
10. Accelrys Inc. : http://www.accelrys.com/dstudio/ds_viewer/info/enhancements.html
11. CANON SYSTEM SOLUTIONS INC. (TURBOCAD) : <http://canon-sol.jp/product/tc/index.html>
Autodesk, Inc. (3ds Max) : http://www.discreet.jp/products/max5/index_max5.htm
12. G.Schaftenaar (MOLDEN) : <http://www.caos.kun.nl/~schaft/molden/molden.html>
13. Roland DG Corporation (MODELA) : <http://www.rolanddg.co.jp/index.html>
14. 化学ソフトウェア学会 ‘98 研究討論会講演要旨集、209、p60-61
化学ソフトウェア学会 ‘99 研究討論会講演要旨集、202、p44-45
15. ジュエリー工房 (有)「せかい」榊一男 : sekai@rose.ocn.ne.jp
MEIKO Co., Ltd : http://www.meiko-inc.co.jp/RP_JCAD3/hikari.htm
16. TOYODA MACHINE WORKS, LTD. (MM-II) : http://www.toyoda-kouki.co.jp/_pub_html/frame.htm
Digital Integrator Company : <http://www.toyotsu-digital.com/>
17. Digital Integrator Company (Z402C) : http://www.toyotsu-digital.com/z/z_top/z_top.html
18. ROFIN-BAASEL JAPAN CORPORATION (RSMOSC10) : <http://www.rofin-jpn.co.jp/products-3Dglass.htm>
19. (株) コスモテック : <http://www.cosumotec.co.jp/>
20. 日本コンピュータ化学会 2002 秋季年会講演予稿集、202、p40-41
21. 日本コンピュータ化学会 2000 秋季年会講演予稿集、308、p92-93
22. 日本コンピュータ化学会 2001 秋季年会講演予稿集、112、p48-49