

3D プリンタで空間に分布する物理量を可視化する技術を開発 ～分子の中の電子密度分布を透明樹脂の中に描写～

1. 発表者：

山崎 淳（東京大学物性研究所附属計算物質科学研究センター 技術専門職員）

古宇田 光（東京大学物性研究所附属計算物質科学研究センター 特任研究員）

長代 新治（株式会社クロスアビリティ）

千田 範夫（株式会社クロスアビリティ 取締役）

古賀 良太（株式会社クロスアビリティ 代表取締役）

2. 発表のポイント：

- ◆3D プリンタを用い、空間に分布する物理量（例えば密度、温度、電場、磁場、流速、強度など）を透明樹脂の中に形状制御された微小粒子（ドット）で描写する技術を開発した。
- ◆透明な樹脂中に電子雲をドットで描写する分子模型の制作が可能ばかりでなく、雲、銀河、建物や車の周囲の気流などをドットで描写することも可能である。
- ◆分子中の電子状態の理解が深まり、新機能分子の開発や教育等に役立つことが期待される。

3. 発表概要：

東京大学物性研究所の山崎らと株式会社クロスアビリティの長代らは、空間に分布する物理量を、3D プリンタで出力可能なドットデータに変換するプログラムを開発しました。このプログラムを用い、コンピュータで計算した分子を構成する原子間の結合を担う電子密度分布のデータを、ドットデータに変換しました。このデータをインクジェット型 3D プリンタ（注1）に入力することで、透明な樹脂の中に電子雲を描写した分子模型の制作が可能となりました。この分子模型により、分子中の電子状態の理解が深まり、電子が関与する新機能分子の開発等に役立てることが可能となります。さらに、電子雲を含む分子模型を教育ツールとして利用することで、モニタ上だけで表示するのに比べ、物質の構造や機能と電子密度の関連の理解を深めることが可能となります。また、この技術は、分子以外に雲、銀河、建物や車の周囲の気流などを描写することも可能であり、幅広い領域での応用が期待されます。

従来、分子模型は原子間結合を棒形状で示すボールスティックタイプが主として用いられており、電子密度分布と結合や機能の関係を理解することが困難でした。

尚、11月30日（水）から、株式会社クロスアビリティにおいて、本技術（特許出願済）を適用した分子模型の制作の受注を開始します。

4. 発表内容：

コンピュータとプログラムの発展に伴い、多数の原子からなり複雑な構造を持つ分子構造のシミュレーションが可能となっています。分子構造と分子機能の関係を検討する場合、分子を構成する原子間の結合を担う電子密度分布（電子雲）が重要なカギを握っています。シミュレーションで得られた電子雲のデータはモニタ上では示すことができますが、より電子の役割の理解を深めるためには電子雲を描写した分子模型を製作することが理想的です。ガラスの中にレーザダメージでドットを形成し、電子雲を描写する技術が開発されていますが（注2）、ドットの形状や色の制御ができず、課題が残っていました。

この課題を解決するため、電子雲のように、空間に分散する物理量（この場合は電子密度）を、3Dプリンタで出力可能なデータに変換するプログラムを開発しました。このプログラムにより、インクジェット型の3Dプリンタを用いて、容易に電子雲を透明プラスチック中に描写することが可能となりました。

具体例として、フラレン (C_{60}) の場合を示します。まず、密度汎関数法 (DFT) による分子シミュレーション計算により、フラレン分子の電子密度分布を計算します。つぎに、計算結果から得る電子密度等のデータを、分子モデリング・可視化ソフトウェア Winmostar™ (注3) を用い、3次元グリッド中の物理量を定義するためのフォーマットである cube ファイルに変換します。この cube ファイルを、3Dプリンタ出力に必要な STL (Standard Triangulated Language) ファイルに直接変換するプログラムを新たに開発しました。このプログラムは3次元の各グリッド中の物理量を3Dプリンタで形成可能なドット形状と密度に変換することができます。変換した STL ファイルを用い、インクジェット型3Dプリンタで分子模型を製作しました。制作に用いた電子データの3次元図面を図1に示します。このデータにより作成した分子模型を図2に示します。下半分は、従来の原子の球と原子間結合を示す棒で示すボールスティックタイプの分子模型を電子雲と重ねて制作しました。上半分は電子雲だけで制作しました。本分子模型により、従来のボールスティックタイプでは表現できなかった「原子間の結合は原子核間に分布している電子が関与しており、特定の原子間の結合場所に2重結合があるわけではない」という概念を容易に理解することが可能となります。

今後、複雑な結晶構造を持つ磁石や超伝導材料などの3D電子雲模型を制作し、より高い性能を持つ材料開発に活用していく予定です。また、本分子模型を教育に用いることで、分子中の電子の役割の理解を促すことが可能となります。さらに、この技術は、分子以外に雲、銀河、建物や車の周囲の気流などを描写することも可能であり、今後、幅広い領域での応用が期待されます。

本研究は、文部科学省「HPCI戦略プログラム：分野2新物質・エネルギー創成」(注4)で取り組んだスーパーコンピュータ「京」の計算結果を3Dプリンタで可視化する基本技術を、現在、取り組んでいる文科省「ポスト「京」重点課題「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」(注5)と、「元素戦略磁性材料研究拠点：基盤的計算機シミュレーション手法の検討」(注6)のプロジェクト間連携で応用技術に発展させる研究として得られた成果です。

5. 発表学会：

学会名：第30回分子シミュレーション討論会

開催場所：大阪大学基礎工学国際棟 シグマホール (大阪大学豊中キャンパス)

発表日時：2016年11月30日 (水) 16:30~16:45 (112S 口頭発表)

12月1日 (木) 11:00~12:00 (203P ポスター)

11月30日 (水) ~12月2日 (金) (企業展示)

タイトル：量子化学計算による電子雲の3Dプリンタ出力用コード開発

共同発表者：山崎淳*、古宇田光、長代新治*、千田範夫、古賀良太

6. 注意事項：

上記学会での企業展示開始をもって解禁となります。日本時間11月30日（水）10：00以前の公表は禁じられています。

7. 用語解説：

注1：インクジェット型3Dプリンタ

紫外線で硬化する樹脂でできたインクを面状に塗り重ねていく方式。今回の試作はStratasysLtd.社製Objet500Connex3（代理店：丸紅情報システムズ株式会社）で作成した。

注2：ガラスの中にレーザダメージでドットを形成し電子雲を描写する技術

ガラス中に高強度のレーザ光線をフォーカスすることでダメージを生じさせ、そのダメージをドットとして電子雲を描写する技術。詳しくは、下記論文を参照。

「時田澄男, J.Comput.Chem.Jpn., Vol.14, No.2, ppA17-A20(2015).」

注3：分子モデリング・可視化ソフトウェア Winmostar™

株式会社クロスアビリティで開発、販売している量子化学、分子動力学、固体物理計算に対応した分子モデリング・可視化ソフトウェア。詳しくは下記WEBページを参照。

株式会社クロスアビリティ「Winmostar™」：<https://winmostar.com/>

注4：文科省「HPCI戦略プログラム：分野2新物質・エネルギー創成」

略称CMSI。H23～27年度に実施した、コンピュータ「京」を用いた計算科学のプロジェクト。東京大学物性研究所と自然科学研究機構、東北大学金属材料研究所が戦略機関として参画。物質科学全般の研究開発と大規模並列計算による分野振興活動を実施した。

注5：文科省「ポスト「京」重点課題「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」

略称CDMSI。H27～31年度実施。東京大学物性研究所が代表機関として実施している。各種の材料デバイスのシミュレーションを「京」やポスト「京」を用いて実施し、新規材料を提案することを目的としている。

注6：「元素戦略磁性材料研究拠点：基盤的計算機シミュレーション手法の検討」

略称ESICMM。H24～33年度実施。NIMS（物質・材料研究機構）を中核に希少元素によらない新規高性能永久磁石材料を研究開発する世界的な拠点。東京大学物性研究所はNIMSからの再委託を受けて、磁石シミュレーターを中心とする基盤的計算機シミュレーション手法の研究開発を実施している。

8. 添付資料：

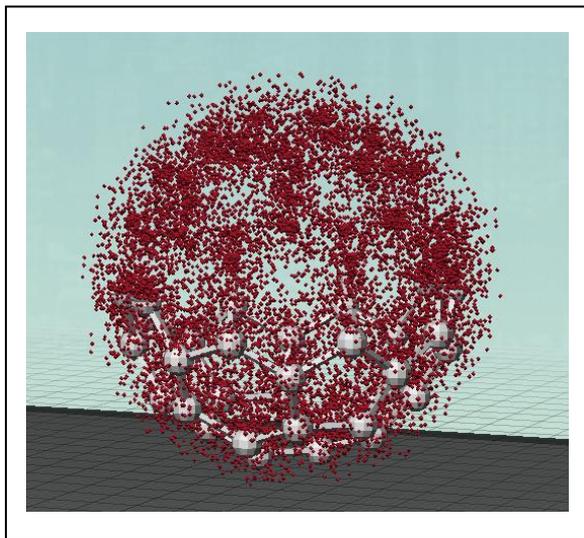


図1 Winmostar™で出力したフラーレンの電子雲シミュレーション結果。上半分は電子雲だけ、下半分は、従来のボールスティックタイプの分子模型も重ねて表記している。



図2 3Dプリンタで透明樹脂中に形成した、フラーレン(C₆₀)の電子雲を描写した分子模型(5cm角)。ドットが電子雲。下半分は従来のボールスティックタイプの分子模型(ボールが炭素原子、スティックが原子間結合)を電子雲に重ねて描写している。フラーレン(C₆₀)は炭素の12個の5員環と20個の6員環から成り立っており、6員環の3辺は2重結合であると説明されているが、実際の電子雲は各炭素原子核周囲に均等に分散していることが本模型より理解できる。