

3D プリント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～

附属計算物質科学研究センター 山崎 淳、古宇田 光

【背景】

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考えられます。すでに、透明なガラスの中にレーザダメージでドットを形成して、基本的な電子軌道に存在する電子雲を描写する技術が開発されていますが、複雑な電子構造の描写はできず、原子や原子間結合を示す構造体を同時に描写することはできませんでした。

【電子雲の可視化】

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を、3D プリントで出力可能なドット形状と密度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 プリント[1]を用いて、透明な樹脂中に物理量を描写することが可能となりました。[2]

具体例として、フラレーン(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、フラレー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[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[4]に変換します。この cube ファイルを、新たに開発したプログラムで 3D プリント出力に必要な STL(Standard Triangulated Language)ファイルに変換しました。この変換した STL ファイルを用い、インクジェット型 3D プリントでフラレーンの分子模型を製作しました。製作に用いた STL データを可視化した図面を図 1 に、3D プリントで作製した分子模型を図 2 に示します。上半分は電子雲、下半分は、電子雲に炭素原子の球と炭素原子間結合を示す棒(ボールスティックタイプ)の分子模型を重ねて作製しました。本分子模型により、「結合の手の数合わせのために、炭素原子間の特定の結合部分に示されていた 2 重結合は、実際には結合部分に電子密度の差があるわけではない」といった概念を直感的に理解することが可能となります。

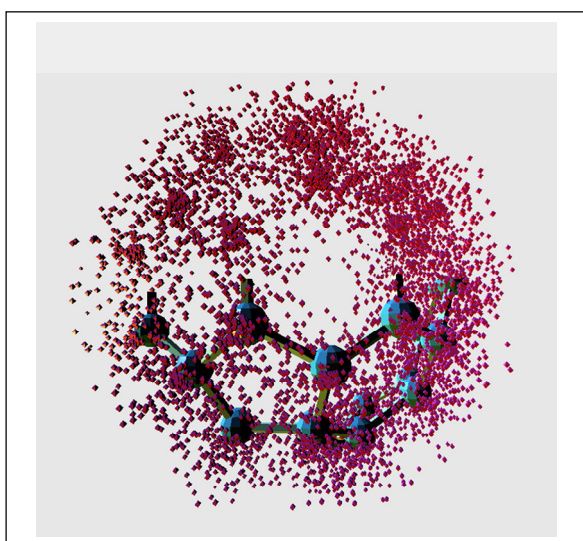


図1 STL ファイルを可視化ソフトで出力したフラレーンの電子雲シミュレーション結果。上半分は電子雲、下半分は電子雲にボールスティックタイプの炭素原子模型を重ねている。



図2 3D プリントで透明樹脂中に形成した、フラレーン(C_{60})の電子雲を描写した分子模型(5cm 角)。図 1 のデータを用いて作製した。

【応用】

スーパーコンピュータによる高度な計算により、複雑な結晶構造を持つ磁石や超伝導物質の中の電子雲の状態と特性の関係が明らかになってきています。それらの複雑な結晶構造と電子雲の模型を本技術により 3D プリンタで可視化し、より高い性能を持つ材料開発のアイデア創出に活用しています。また、学会発表や研究会、授業等での説明の補助ツールとして、電子を可視化した本分子模型を用いることで、分子の中の電子の役割の理解を促すことが可能です。また、本技術は、電子密度以外に、温度、電場、磁場、強度等の空間分布、建物や車の周囲の気流、空に浮かぶ雲、宇宙に広がる銀河などを透明樹脂中に描写することも可能であり、今後、CAE(Computer Aided Engineering)を含めた幅広い領域での応用が期待されます。

【謝辞】

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」(H23-27)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」(H27-31)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」(H24-33)のプロジェクト間連携で、応用技術に発展させた成果です。また、株式会社クロスアビリティの長代新治様、千田範夫様、古川祐貴様、古賀良太様との共同研究として実施されています。

<参考>

- [1] 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。
- [2] 山崎淳、古宇田光、長代新治、千田範夫、古賀良太、月刊化学(2017.3)、39-42.
- [3] 分子モデリング・可視化ソフトウェアは Winmostar™ (株式会社クロスアビリティ製)を利用。
- [4] cube ファイルは量子化学計算ソフト Gaussian(<http://gaussian.com/>)で使われるデータ出力形式。