

3D プリンタによる電子雲を含む分子模型の作製

3D printing molecular models incorporated with electron clouds

○山崎 淳¹、古宇田 光¹、長代新治²、千田範夫²、古賀良太²

(1. 東大物性研、2. (株)クロスアビリティ)

○Jun Yamazaki¹, Hikaru Kouta¹, Shinji Nagashiro², Norio Senda², Ryota Koga²

(1.ISSP.Univ Tokyo., 2.X-Ability Co., LTD.)

E-mail: yamazaki@issp.u-tokyo.ac.jp

コンピュータで計算した分子や結晶の構造模型を市販のボールスティックタイプで作製する場合、形状はボールやスティックの種類に制約されてしまう。この制約は、3D プリンタにより解消され、複雑な分子や結晶の構造模型が作製されている[1]。分子や結晶の構造がもたらす物性の理解を深めるためには、分子軌道や電子密度分布(電子雲)の可視化が有効である。そこで、フルカラー3D プリンタを使い、透明な樹脂の中に電子雲含む分子模型の作製方法を開発したので報告する。

分子軌道や電子密度分布などの物理量は、密度汎関数法(DFT)などで計算される。計算結果は、可視化用の“CUBE (Gaussianの可視化ユーティリティ cubegenに由来)”と呼ぶフォーマット(電子密度等をグリッド上の物理量として定義)に変換可能である。しかし、3D プリンタで作製するためには、“STL (Standard Triangulated Language)”とよばれる、三角格子点の集合(メッシュ)により定義されたファイルフォーマットを用いる必要がある。そこで、“CUBE”ファイルを“STL”ファイルに直接変換するコードを新規に開発した(特許出願中)[2]。このコードは各グリッド上の物理量を微小粒子に置き換え、その粒子に対してメッシュをきる機能を持つ。このコードを用いた例として、フラーレン分子の電子

雲をDFTで計算し、その結果をSTLファイルに変換し、3Dプリンタによる作製を実施した。その結果を図1に示す。上半分は電子雲だけ、下半分はボールスティックタイプの模型に電子雲を重ねた分子模型の作製に成功した。

今回開発した技術は、ナノテクノロジーの次を担う、量子テクノロジーの研究開発や、教育活動の支援ツールとしての活用が期待される。



図1 透明樹脂の中に形成されたフラーレン分子の電子雲の模型。下半分は従来のボールスティック模型に電子雲を重ねて作製している。

[1]山崎淳 他、3D プリンターをつかった Ne-Fe-B 系界面構造のモデリング、第 63 回応用物理学会春季学術講演会 講演予稿集、21a-P3-5 (2016) .

[2] 山崎淳 他、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、第 30 回分子シミュレーション討論会 講演予稿集、112S+203P (2016) .