

演 題	一軸方向を縮小した3次元分子模型の切削加工について	
発 表 者 (所 属)	長尾輝夫(函館高専)	
連 絡 先	〒042-8501 函館市戸倉町 14-1 函館工業高等専門学校 物質工学科 TEL & FAX 0138-59-6466 E-mail: nagao@hakodate-ct.ac.jp	
キ ー ワ ー ド	分子模型、3次元プロッタ、切削加工	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	3次元プロッタ「モデラ」を用いて、空間充填模型や棒球模型などで表示された物質の微視構造を正確に造形・再現し(コンピュータ上のバーチャルイメージを実体あるものにし)教育面や研究面での新しい教材の作成を目的とする。今回、切削加工において、一軸方向からの切削による制限で嵩張っている分子構造の造形は難しかったが、一方向の正確さを犠牲にして、縮小することにより、造形可能となり、対象分子の拡張を考えた。	
環 境	適 応 機 種 名	D O S / V
	OS 名	Windows95、98、Me、Windows NT4.0、2000、XP
	ソース言語	
	周 辺 機 器	ロ-ラ-ト・デ-ィ-ジ-製 3D プ-ロ-ッタ「MODELA」model MDX-20
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い)	・日本コンピュータ化学会の無償利用 ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 未定	具 体 的 方 法

1. はじめに

最近ではナノワールドと言われるナノレベルの微視的材料の開発や関連技術の発展に目を見張るものがある。この微視的对象物を人間が観察するには、パソコンを含めたコンピュータ上(モニター画面上)で観察することしか他に方法がない。これらは、あくまでも画面上に存在する仮想現実的な物であり、写真や印刷のような形でのみ実体化している。また、ナノレベル(あるいはこれ以下の)物質の微視的構造を再現するためには、一般に、各種分子模型の表示が利用されている。本研究は、教育、研究面で、これら物質の微視的構造の表現を理解する上で役立つ、拡大した実体のある物(教材)として再現する方法の確立を目的とし、既報¹⁾のように工業分野での種々の造形方法を用いて、物質の微視的構造を拡大した造形物として再現してきた。今回、正確さは犠牲になるが、切削加工法での一方向からの切削による制約をその方向の形状を縮小して対応した。その結果、造形対象範囲を拡げることができた。

2. システム構成

ハード構成： DOS/V マシン、OS：MS Windows 95/98、Me、NT4.0、2000、XP

・ 3次元切削加工機： ローランドディー・ジー・(株)製、「MODELA」model MDX-20

・ 3次元切削ソフト： 同上製、MODELA PLAYER ver.3.6, MODELA DRIVER

ソフト構成： 分子モデリング、分子表示、3DCAD・3DCG各ソフト

・ 分子モデリング： Hypercube Inc.、「HyperChem Pro 6.0」

・ 3DCAD： IMSI、「TurboCAD v6 Professional」、3DCG： Autodesk Inc.、「3ds max 4.2」

・ 分子表示ソフト： accelrys Inc.、「ViewerLite 5.0 and 4.0」

3. 製作方法

造形対象分子は HyperChem などを用いて、構造を最適化し、MOL 形式や PDB 形式の分子データとして保存する。次に ViewerLite を用いて、任意の分子模型で表示し、VRML(Virtual Reality Modeling Language)データとして保存する。さらに、TurboCAD や 3ds max などの 3DCAD や CG ソフトを用いて、DXF(Drawing Interchange File)へ変換する。この時、1軸方向のみ、縮小し、造形データ(DXF)として、3次元切削ソフトに受け渡す。MODELA に、ケミカルウッド(サンモジュール)あるいはロストワックスなどの材料をセットし、径 1mm、刃長 6mm や径 3mm、刃長 30mm のエンドミルを用いて切削加工した。

4. 結果と考察

枝分かれした構造の分子や原子の数の多い分子は、蛋白質など簡略模型でも嵩張っていて造形が難しかったが、下の図(図1~図6)のように造形できた。2.5次元CADで言われるもの(平面図形の押し出し)とは異なり、一方向の縮小のため正確さは犠牲になったが立体感ある形で造形できた。



図 1 Cubane



図 2 Zeolite (TON)



図 3 C60 (Crystal)

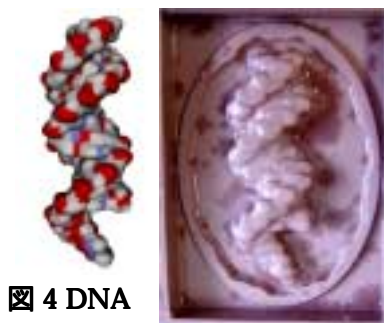


図 4 DNA



図 5 Porin



図 6 Crambin

参考文献

1) 化学ソフトウェア学会 '98 研究討論会講演要旨集、209、p60-61、'99 同、202、p44-45

日本コンピュータ化学会 2000 秋季年会講演予稿集、308、p92-93、'2001 同、112、p48-49、'2002 同、202、p40-41