

## 3D プリンターを用いた有機分子模型の製作

### 3D Printing of Organic Molecular Models

伊藤 克治

Katsuji ITO

大内 毅

Takeshi OHUCHI

長澤 五十六

Isoroku NAGASAWA

(福岡教育大学理科教育講座) (福岡教育大学技術教育講座) (福岡教育大学理科教育講座)

(平成29年9月29日受理)

#### 要 約

近年, 3D プリンターが入手容易な価格帯になったことから, 学校教育現場では教材作成への利用が注目されている。本研究では, 有機分子の三次元構造を直感的に理解する教材の開発として, 3D プリンターによる分子模型製作を行った。具体的には, 熱溶融造形法 (FDM) タイプによる空間充填モデルだけでなく, これまでに注目されていなかった光造形法 (SLA) タイプによる球棒モデルについても製作を行い, 各種条件下による加工精度をそれぞれ検証したので, その詳細について報告する。

キーワード: 3D プリンター, 有機分子模型, 熱溶融造形法, 光造形法

#### I. はじめに

平成20年3月に告示された現行の学習指導要領理科(化学領域)では, 「粒子」を柱として, 小・中・高等学校を通じた理科の内容の構造化が図られている。これまでに, 粒子概念形成に関する様々な理論研究や実践研究が行われているが, 学習者が直接手にすることができる分子模型は実感を伴った理解のために有効であることが言われている。しかし, 市販の分子模型は安価でなく, また, 分子模型の組み立てには時間がかかることや, 分子サイズが大きいものには適していないことから, 通常の授業の中で使うには難点がある。

一方, 近年では3Dプリンターが購入しやすい価格帯になってきたことから, これを用いた分子模型や実験道具の教材製作が注目されている。<sup>1,2)</sup> 特に, 分子生物学分野では対象とする分子サイズが大きくなるため, 3Dプリンターで製作する価値が高い。<sup>3)</sup> すなわち, 3Dプリンターで製作した分子模型は分解する危険性がないため, 分子サイズが大きいものも作りやすく, 手に持って動かしながら様々な角度から観察するのに適している。しかし, 実際の製作段階では3Dデータを作成するためにCADソフトを使う必要があるが, その使用は一般の教員にとってはハードルが高い。また, これまでの先行研究では空間充填モデルの製作が主流であり, 原子のつながりを観察しやすい球棒モデルの製作例は少ない。そこで本研究では, 3Dデータのより簡単な作成と共に, 空間充填モデルと球棒モデルの2つのタイプについて分子模型の製作を行うことにした。

#### II. 3D プリンターによる積層造形法について

3Dプリンターは小玉らによって1980年初頭に発明された。<sup>4)</sup> しかし, 実用レベルとして注目を浴びるようになったのは, その約30年後のことである。2013年になると, アメリカや日本で3Dプリンターを活用した物づくりに対する普及促進が行われ, 個人でも手に入る価格帯になった。3Dプリンターによる積層造形法については, 主に以下の8つに大別される。

##### ①熱溶解造形方式 (FDM)

リールに巻かれたワイヤ状の樹脂を熱で溶かし, ヘッドから押し出してプラットフォーム上に面状に積層する。

##### ②光造形方式 (SLA)

液体状の光硬化樹脂にレーザー光線や赤外線を当てて1層ずつ硬化させて積層する。

##### ③粉末焼結積層造形方式

セラミックや樹脂, 金属の粉末に強力なレーザーを照射して粉末を焼き付けて固め, 1層ずつ積層する。

##### ④インクジェット方式

液状化した樹脂をインクジェットプリンターのように吹き付けて成形する。

##### ⑤石膏パウダー方式

石膏の粉末にインクジェットヘッドからインクと固着剤を吹き付けて成形する。

##### ⑥シート成形方式

紙のようなシート状の素材を積み上げて糊で固めた後に, 切断して成形する。

##### ⑦フィルム転写イメージ積層方式



図1 左:熱溶解造形方式(FDM)(XYZ Printing社製, ダビンチ 1.0A), 右:光造形方式(SLA)(XYZ Printing社製, ノーベル 1.0)

液状プラスチックを透明フィルムの上ののせて紫外線を照射することで一部分を固め、これを繰り返して成形する。

#### ⑧金属光造形複合方式

③に切削加工の技術を組合せ、段差の部分削って成形する。

本研究では汎用性を考慮して廉価版3Dプリンターに最も良く使われている「熱溶解造形方式(FDM: Fused Deposition Modeling)」(図1左)に焦点を当てた。ただ、この方式では空間充填モデルの製作は先行事例もあって可能と考えられるが、球棒モデルのように骨組みを強調するようなモデルの製作には適していないと考えられた。そこで、「光造形方式(SLA: Stereolithography Apparatus)」(図1右)についても同時に検討することにして、各種条件下による加工精度をそれぞれ検証することにした。

### Ⅲ. 実際の分子模型製作と結果

#### 1. $\beta$ -D-グルコースの分子模型製作

実際の分子模型製作にあたっては、モデル化合物として $\beta$ -D-グルコースを選んだ。この構造は高等学校化学で学習するものであり、六員環構造のために比較的製作しやすい構造であると考えられる。

##### (1) 化学構造の描画と3Dデータへの変換

まず、化学構造式の描画ソフトとして広く知られているChemDrawを用いて、 $\beta$ -D-グルコースの構造式を描いた(図2上)。これをChem3Dで読み込むと、空間充填モデルあるいは球棒モデルに即座に変換される(図2左下, 右下)。3Dプリンターで作成するためには、さらにSTL(standard triangulated

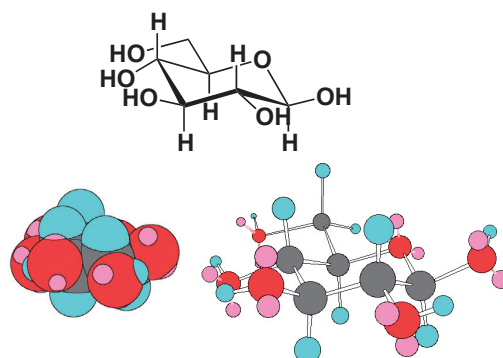


図2 ChemDrawによる化学構造式(上), Chem3Dによる空間充填モデル図(左下), および球棒モデル図(右下)

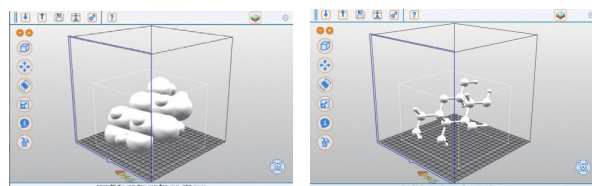


図3 3Dプリンター専用ソフトでの画面(左:空間充填モデル, 右:球棒モデル)

language)形式の3Dデータへ変換する必要がある。通常はCAD(computer-aided design)を使って三次元物体像のモデリングを行ってSTLファイルを作成するが、無償のCADソフトが提供されてはいるものの、扱いに慣れる必要がある。しかし、Chem3Dで読み込んだファイルのそれぞれのモデルからは、STLファイル形式で簡単に出力することができるため、特別な知識は必要ない。つまり、化学構造式を描くことができれば、STLファイルまで作成できる。

こうして作成したSTLファイルを3Dプリンター専用ソフトの画面で開くと、図3ようになる。この画面で正しい構造になっているか最終確認を行う。

##### (2) 熱溶解造形法(FDM)タイプによる製作

こうして得られたSTLファイルからFDMタイプの3Dプリンターによる出力を行った(図4)。まず、空間充填モデルについて行ったところ、直径1.75 mmのABS樹脂を用いた場合、内部充填密度10%、レイヤ高さ0.2 mm(積層ピッチ)の条件下であれば空間充填モデルが製作可能であることが分かった。

なお、今回の大きさ(38.72 × 35.10 × 31.75 mm)の場合、加工時間は約37分、ABS樹脂のコストは約42円という結果であった。

一方、球棒モデルの場合は、補助部分をかなり必要とするためか、積層中に支えることができず製作できなかった。

##### (3) 光造形法(SLA)タイプによる製作

FDMタイプによって空間充填モデルの製作が可能

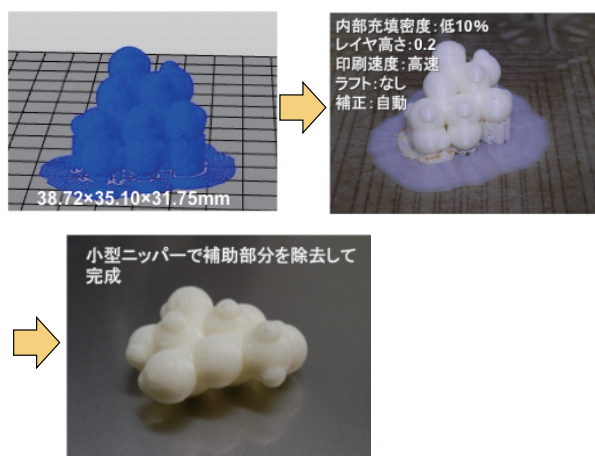


図 4 FDM タイプによる  $\beta$ -D-グルコースの製作工程

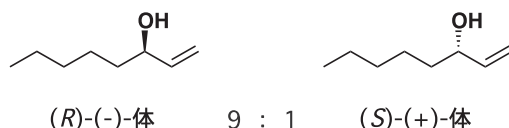


図6 1- オクテン -3- オールの両鏡像体の化学構造

になったので、次に SLA タイプの 3D プリンターを用いて、球棒モデルの製作を行った。

FDM タイプの時と同様、球棒モデルでは補助部分がかかなり必要となるが、SLA タイプの場合、印刷モードを高速、レイヤ高さ 0.1 mm の条件下で、問題なく出力をすることができた（実際の機械の中では吊り下げ式のため上から下に積層される）。最後に補助部分を小型ニッパーで注意深く取り除くことにより、目的の球棒モデルを製作することができた。

なお、今回の大きさ ( $37.43 \times 34.34 \times 25.16$  mm) の場合、加工時間は約 74 分、光硬化樹脂のコストは約 39 円という結果であった。

## 2. 1- オクテン -3- オールの分子模型製作

上記の検討により、空間充填モデルはFDMタイプを用いると製作可能であり、球棒モデルはSLAタイプを用いることで製作可能であることを明らかにできた。そこで、次に鎖状有機化合物として1-オクテン-3-オール（マツタケオール）に着目し、分子模型製作を行うことにした。

1-オクテン-3-オール（マツタケオール）には不斉炭素原子が1つ存在し、天然には *R* 体と *S* 体が約 9 : 1 の割合で含まれている（図 6）。*R* 体と *S* 体では匂いが全く異なるため、分子構造の違いを匂いの違いとして確認する化合物として適している。高等学校化学では鏡像異性体を学習するため、我々は実際に高大連

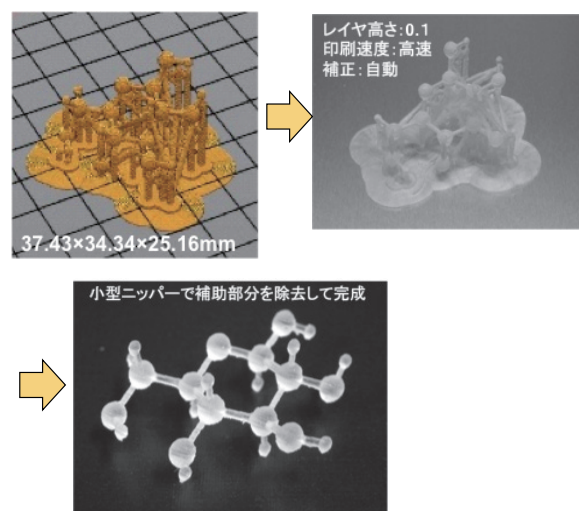


図5 SLAタイプによる $\beta$ -D-グルコースの製作工程

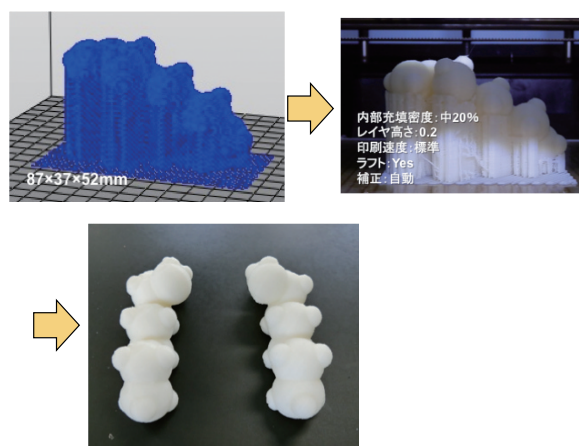


図7 FDM タイプによる 1- オクテン-3- オールの製  
作の工程

携の下でマツタケオール合成について実践研究を行い、その成果を報告している。<sup>5)</sup> この実践では市販の分子模型（球棒モデル）を使ってマツタケオールを組み立てたが、3D プリンターで製作した分子模型を手に入れることができれば、鏡像異性体を直感的に理解する教材としての有効性が高いと考えられる。また、大学の有機化学で不斉炭素の絶対配置について学習する際の教材としても有効である。

3D データについては、 $\beta$ -D-グルコースの際の流れに沿って  $R$  体と  $S$  体のそれぞれについて空間充填モデルと球棒モデルの合計 4 種類の作成を行った。

(1) 熱溶融造形法 (FDM) タイプによる製作

3D プリンターでの出力は、先の  $\beta$ -D-グルコースの製作の流れに沿って問題なく進めることができた(図7)。直径 1.75 mm の ABS 樹脂を用いたが、内部充填密度 20%、レイヤ高さ 0.2 mm の条件下で製作可能であることが分かった。そこで、この条件下で *R* 体と *S* 体の鏡像異性体についてそれぞれ製作した。



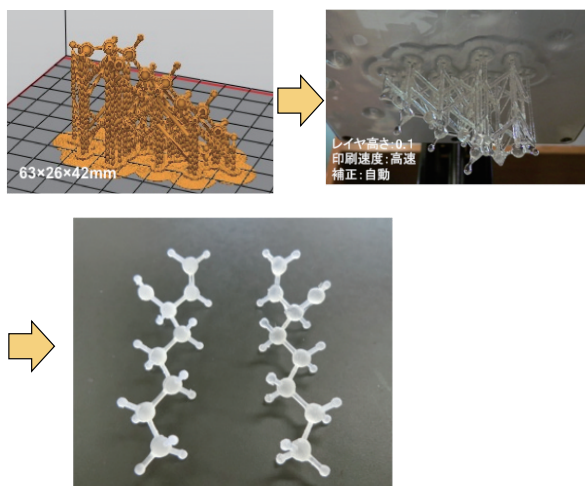


図8 SLAタイプによる1-オクテン-3-オール製作の工程

なお、今回の大きさ（87 × 37 × 52 mm）の場合、1つあたりの加工時間は約127分、ABS樹脂のコストは約110円という結果であった。

#### (2) 光造形法（SLA）タイプによる製作

次にSLAタイプを用いて、先のβ-D-グルコースの製作の流れに沿って行った。図8の2番目には製作途中段階の装置内の写真を載せているが、前述のようにSLAタイプの場合はFDMタイプとは逆に上から下に向かって積層されていき、補助部分が付いた球棒モデルが出来上がった。こうした流れでR体とS体の鏡像異性体についてそれぞれ製作した。

なお、今回の大きさ（63 × 26 × 42 mm）の場合、1つあたりの加工時間は約125分、光硬化樹脂のコストは約78円という結果であった。

#### IV. 考察

3Dプリンターの出力に必要なとなるSTLファイルは、前述の通りChemDrawで描いた化学構造式をChem3Dで読み込むことで、STLファイルとして簡単に出力できた。このため、構造式を描くソフトとしてChemDrawを使っている人にとっては、CADを使うよりもハードルが低いと言える。しかし、研究当初はiPad版のChemDrawが安価（1200円）で、しかもChem3Dは無料であったが、2017年9月現在はiPad版の販売・提供がされていない。今後、3Dデータを手軽で簡単に作成する手法を検討する必要がある。

実際の製作では、FDMタイプを用いた場合に空間充填モデルは何の問題もなく製作できたが、球棒モデルはうまく製作することができなかった。これは球棒モデルが“細い骨組み”であり、FDMタイプの特性に合っていないためであると言える。したがって、棒の太さをもっと太くすれば製作可能になると考えられるため、これについては、さらに検討の余地がある。

一方、SLAタイプでは球棒モデルも問題なく製作

することができた。光硬化樹脂で作ったものは、ABS樹脂で作ったものよりも柔軟性があることから、細い球棒モデルの製作に向いていると言える。しかし、現在のマーケットの流れとしては、SLAタイプよりもFDMタイプが主流になってきつつある。一般消費者としては、製作したものは一定の硬さがある方が、目的のために使い勝手が良いということであろう。

#### V. おわりに

本研究では、3Dプリンターを用いた有機分子模型の製作方法を確立することができた。実際に手に取り、三次元構造を直感的に理解できる有用性は、他の教材にも活かせるものと期待される。今回製作した分子模型は、実際の授業等での試行実施で成果が見え始めているので、今後、さらに実践を積んでいきたい。

#### 謝 辞

本研究の一部は、JSPS科研費（課題番号：15K12390「粒子概念育成のための三次元教材の開発と実践研究」、研究代表者：伊藤克治）およびJSPS科研費（課題番号：7H01988「科学の有用性」を实感し科学的能力と科学的態度の育成を目指す学習モデル研究」、研究代表者：後藤顕一）の助成を受けて行ったものです。また、物質・デバイス領域共同研究拠点における共同研究によるものです。ここに感謝申し上げます。

#### 参考文献

- 1) Scafani, V. F.; Vaid, T. P. 3D Printed Molecules and Extended Solid Models for Teaching Symmetry and Point Groups. *J. Chem. Educ.* **2014**, *91*, 1174-1180.
- 2) (a) 吉村忠与志, 吉村三智頼, “3Dプリンタ用の分子モデルの設計と作成”, *J. Tec. Educ.* **2014**, *21(1)*, 9-16; (b) 吉村忠与志, “3Dプリンタの現状と今後の展望—体感できる分子モデルの教材作り—”, *J. Tec. Educ.* **2014**, *21(2)*, 53-62.
- 3) (a) 川上 勝, “3Dプリンターを用いたタンパク質分子模型の製作とその利用”, 生物物理, 第55巻, 第2号, 104-107(2015); (b) Gardner, A.; Olson, A. 3D Printing of Molecular Models. *J. Biocommun.* **2016**, DOI: <http://dx.doi.org/10.5210/jbc.v40i1.6626>.
- 4) (a) 小玉秀男, 特許出願(昭55-48210)「立体図形作成装置」; (b) 小玉秀男, “3次元情報の表示法としての立体形状自動作成法”, 電子通信学会論文誌, vol.64-C, No.4 (Section J), 237-241 (1981).
- 5) 村岡さつき, 藤澤早希, 副島英子, 伊藤克治, “鏡像異性体間の性質の違いを実感させる実験プログラムの開発 (2)” 福岡教育大学紀要, 第66号, 第6分冊, 1-5 (2017).