

演 題	分子模型の形をした和菓子用鋳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	菓子型、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軸同時制御可能な3Dプロッタ「モデラ」を用いて、空間充填模型で表示された分子模型を和菓子で正確に再現できるように、菓子用鋳型(菓子型)の製作を試みた。この和菓子はデザイン化された分子模型でなく、正確な分子の構造を再現しており、研究者の遊び心、教育面での利用に期待したい。	
環 境	適 応 機 種 名	DOS/V
	O S 名	Windows95、98、Me、Windows NT4.0、2000
	ソ ー ス 言 語	
	周 辺 機 器	ロ-ランド・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、種々の物質あるいは材料開発もマイクロからナノメートルの原子・分子レベルの世界という微視的構造へ関心が移ってきていると思われる。この微視的世界を観察する上で、コンピュータの急速な発展も大いに貢献し、関連する化学系の分子モデリングソフトをはじめ、各種分子模型の表示に優れたソフトが多数見られ、モニター画面上で、リアルに3次元立体的に観察することも可能になっている。これらは、画面上で存在し、仮想現実的な物であり、写真や印刷にして、実体化している。教育、研究面で、構造を認識する場合、実体物を作成し、触感的に観察することは非常に有効で重要である。このような観点から、演者は工業分野のモノ作りで用いられている種々の製作方法を用いて、分子レベルでの微視的構造を人間の視覚レベルに正確に拡大した造形物の製作を試みてきた。1)

今回は、一連の造形の応用として、正確な分子構造の模型を和菓子で再現できるような鋳型(菓子型)の製作を試み、対象分子、切削材料、分子模型表示データから造形用データへの変換などの問題点について考察した。

2. システム構成

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

- ・ 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.3.4, MODELA DRIVER

ソフト構成：分子モデリング、分子表示、3DCAD・3DCG各ソフト

- ・ 分子モデリングソフト：Hypercube Inc.、「HyperChem Pro 6.0」
- ・ 3DCAD ソフト：IMSI、「TurboCAD v6 Professional」
- ・ 分子表示ソフト:accelrys Inc.、「ViewerLite 5.0 and 4.0」
- ・ 3DCG ソフト:Autodesk Inc.、「3ds max 4.2」

3. 製作方法

対象分子の構築は、HyperChemなどの分子モデリングソフトを用いて、構造を最適化し、MDL形式やPDB形式の分子データとして保存する。分子模型の表示からVRML(Virtual Reality Modeling Language)データへの変換は、ViewerLiteを用いた。さらに、VRMLデータから造形データDXF(Drawing

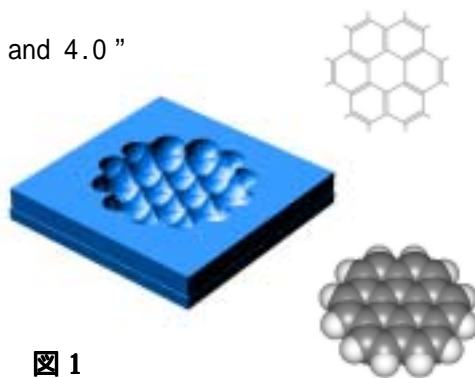


図 1

Interchange File)への変換はTurboCAD や 3ds max を用いた。同時に、ブーリアン演算機能を用いて、板状図形から分子模型部分を除いて、凹型の鋳型造形データを作成する。(図 1 に coronene 分子の鋳型製作イメージ図を示す)次に、切削加工機 MODELA で、径 3mm、刃長 30mm のエンドミルを用いて、ツールパス(エンドミルの通り路)を作製して、切削加工する。

4. 結果と考察

製作した木製の菓子型の例を図 2 に示す。図 3 は、砂糖ベースの落雁のような干菓子の一例である。

通常、菓子型の材料として、さくらの木が用いられるが、切削加工機では、手彫りでは難しい堅い木や目の粗い木材でも切削可能であり、廉価なポリエチレン板のようなものも可能であった。

3軸の切削では、分子構造として、芳香族のような扁平型の分子は適しているが、枝分かれした構造の分子や分離した構造の分子などは製作が難しく、切削面の選択やサポートに工夫が必要である。また、分子模型の表示として、空間充填模型が適しているが、原子の数の多い分子は、造形データ(DXFデータ)が膨大となり、現状では製作が難しい。しかし、作製した鋳型の分子構造は正確に再現している。



図 2



図 3

参考文献：1) 長尾輝夫、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、'2000 同、308、p92-93、'2001 同、112、p48-49