

令和 3 年 5 月 25 日現在

機関番号：51101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2020

課題番号：16K00981

研究課題名(和文) 3Dプリンタによる分子計算のマテリアリゼーション - 新教材・教育法の開発 -

研究課題名(英文) Materialization of Molecular Calculation by 3D Printer - Development of New Teaching Material and Method -

研究代表者

松橋 信明 (MATSUHASHI, Nobuaki)

八戸工業高等専門学校・その他部局等・教授

研究者番号：40199831

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：学齡的に理論的な理解が難しい高専電子系専門教育において、3Dプリンタによる分子計算のマテリアリゼーション(物質化)を行い、学生の興味を誘起しながら視覚的に電子材料の構造や物性を理解し、創造性を育む新たな教材と教育法の開発を行った。

分子軌道法や分子動力学法により物性を研究し、カラフルで美しく視覚に訴え、学生の興味を誘発する電子材料教材を開発できた。3Dプリンタを用いて様々な電子材料を、さらに実在しないC196構造体を造形し、教育効果が高い創造性のある新教材を開発できた。多人数教育に対応したオリジナルの新教材・教育法を開発できた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

専門教育の学齡的な問題や学際的な問題を気にせずに、容易な方法で、しかも学生の興味を誘発できることから、非常に高い学習効果が期待できる。また、新機能性電子材料開発を目指した創造教育を実現できる。さらに、実在しない新しい電子材料の安定性や性質を予測することが可能であり、電子材料の研究やそれを応用する上で非常に有効である。

このように本研究は、優れた学術的な特色と独創性を有し、学生の興味を誘発しながら、非常に高い学習効果をもたらし、さらに新しい機能性電子材料の開発など、卓越した成果を期待できる研究で、その学術的意義や社会的意義は非常に大きい。

研究成果の概要(英文)：It has been developed new teaching material and method to induce students' interest, to visually understand the structure and properties of materials, and to foster their creativity by materializing molecular calculations using a 3D printer. Furthermore, they have excellent academic features and originality and can be expected to have a very high learning effect while triggering the interest of students, as well as outstanding results such as the development of new functional electronic materials.

Using a study the physical properties of electronic materials using molecular orbital and molecular dynamics methods, it has been able to develop colorful and visually appealing teaching materials for electronic materials and also using a 3D printer to form various electronic materials and a non-existent C196 structure, it can be developing with high educational effectiveness and creativity. It has been also developed with original methods for multi-student education.

研究分野：電子材料物性

キーワード：分子シミュレーション 分子軌道法 分子動力学法 3Dプリンタ STLファイル マテリアリゼーション 新教材・教育法開発

1. 研究開始当初の背景

高専の電子系専門教育において学齡的に量子力学や量子化学を踏まえた理論的な内容を理解させるのは困難であり、イメージを捉え難く、また分子構造等の化学に関する学際的な知識が必要である。そこで、分子軌道法と分子動力学法を活用した新たな教材と教育法の開発を着想し、さらに 3D プリンタによって立体形状に模型化すれば飛躍的に理解度が向上すると考えられる。

2. 研究の目的

3D プリンタによる分子計算のマテリアリゼーション (物質化) を行い、学生の興味を誘起しながら視覚的に電子材料の構造や物性を理解し、創造性を育む新たな教材と教育法の開発を目的とする。具体的には、市販の分子シミュレーションソフトを活用した新教材の開発、3D プリンタを用いた分子計算のマテリアリゼーションによる新教材の開発、多人数教育に対応したオリジナルの新教材・教育法の開発の 3 つが研究目的である。

3. 研究の方法

市販の分子シミュレーションソフトを活用して新教材の開発を行う。次に、3D プリンタによる分子計算のマテリアリゼーションを検討し、両者を活用した新教材・新教育法の開発を行う。さらに開発した新しい教材及び教育法を活用して新たな機能性電子材料の分子集合体を設計する創造的教育に取り組む。そして、得られた研究成果を実際の授業に適用するべく、多人数の学生を対象に安価で最適なオリジナルの新教材・教育法の開発を行う。

4. 研究成果

(1) 市販の分子シミュレーションソフトを活用した新教材の開発

① フラーレン

フラーレンとは、閉殻空洞状の多数の炭素原子のみで構成されるクラスターの総称である。C60 フラーレンは、炭素原子 60 個で構成され、六員環が 20 個、五員環が 12 個で構成されており、単結合が 60 本、二重結合が 30 本で構成され、結合に余りがない安定な構造である。分子計算ソフトウェア (富士通社製 SCIGRESS) を用いて分子モデルを作成する。図 1 に分子計算結果を示す。

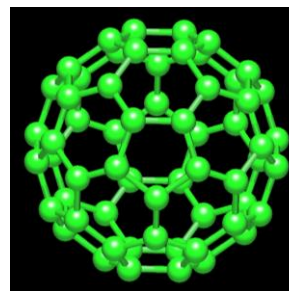


図 1 C60 フラーレンの分子計算結果

さらに C60 フラーレンを複数結合した C120・C180 フラーレンの分子モデル作成の際に生じるひずみの原因解明を行った。ひずみがある場合とない場合について単結合と二重結合の数、sp² と sp³ の数、結合次数に着目して検討した結果、結合次数とひずみの関係を明らかにし、有用な知見を得ることができた。

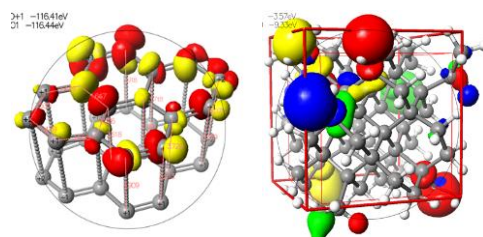
② カーボンナノチューブ

アームチェア型とジグザグ型の 2 種類のカーボンナノチューブについて、熱特性を研究するべく、分子動力学シミュレーションにより温度変化に対する運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの変化を調べた。加熱によってカーボンナノチューブは膨張と収縮を繰り返し、その変化の様子をアニメーションによってリアルに再現することができた。

また、温度変化時のパラメーター変化観察及び熱伝導率とファンデルワールス力の反発特性による軸方向における熱伝導率特性に関する研究を行った。ジグザグ型とアームチェア型におけるエネルギーの増加効率や分子構造の安定性を評価できた。また、熱伝導率において指向性を持っていることを明らかにした。

③ グラファイト構造とダイヤモンド構造

グラファイトとダイヤモンドの分子軌道シミュレーションを行い、フロンティア軌道からバンドギャップを計算し、混成軌道の違いによる導電特性の比較を行った。その結果、ほぼ理論値に近い結果が得られ、両者の導電性の違いを定量的に評価することができた。また、図 2 に示すように、分子軌道を美しいグラフィック表示することができた。さらに UV-Vis スペクトルを検討し、最長吸収波長とバンドギャップを計算した。



(a) グラファイト (b) ダイヤモンド
図 2 分子軌道

④ C196 構造体

実際には存在しない構造体であっても、分子シミュレーションによって新たな分子構造を構

築できる可能性がある。最初にフラーレンやカーボンナノチューブの構成に使われる五員環と六員環に新たに未知の領域であった七員環を加えて、トーラスのオイラー数を用いて C200 を作成しようとしたが、閉じた系にならなかった。試行錯誤を繰り返し、配置の規則性を探究した結果、七員環 8 個、六員環 63 個、五員環 28 個で構成された図 3 に示す C196 という新たな分子モデルを発見することができた。この C196 は不思議な構造で、分子間を分子が潜るような構造になっており、従来には存在しない分子構造である。ひずみは多くの結合間でみられるが、ひずみが大きいから結合が切れやすい訳ではなく、外部からの負荷がない限りは安定して存在すると考えられる。C196 はある物質が外部の負荷によって状態変化する過程の構造の一つである可能性がある。

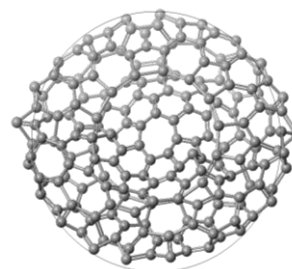


図 3 未知の C196 構造体

このように、新たな分子構造をシミュレーションによって構築し、さらには新たな機能性電子材料の分子集合体を設計する創造性を育む教育に活用できると考えられる。

(2) 3D プリンタを用いた分子計算のマテリアリゼーションによる新教材の開発

① C60 フラーレン

SCIGRESS での分子計算結果を 3D CAD ソフト用のファイルフォーマットの一つである STL ファイルに変換し、UV 硬化型の 3D プリンタ (ストラタシス社製 Objet Eden260V) で造形することができる。図 4 に C60 フラーレンの 3D モデル (図 1 参照) を造形した結果を示す。美しいサッカーボールの形をした二十面体が造形でき、実際に手に取ってあらゆる方向から自由に観察できる非常にすばらしい教材である。



図 4 C60 フラーレン造形



図 5 カーボンナノチューブ造形

② カーボンナノチューブ

カーボンナノチューブのマテリアリゼーションを行い、図 5 に示すように手のひらサイズでがっしりと握れる 3D モデルを造形した。この大きさであれば、迫力があり、硬くて強いのが実感できた。

3D プリンタで造形したものは材質が柔らかいので結構壊れやすい。しかし、3D データがあるのでまた簡単にコピーを造形でき、また容易にサイズ変更もできる。

③ タングステン化合物

タングstenは身近な金属材料で、様々な化合物が存在し、電子材料教材として有効である。そこで、体心立方格子構造のタングsten、立方晶構造の酸化タングsten、六方最密充填構造の炭化タングstenの分子モデルをシミュレーションにより構築し、さらに 3D プリンタにより分子モデルの造形を行った。化合物にすることによって構造が変わることを実感できる、インパクトのある視覚的にわかりやすいタングsten教材の開発ができた。

(3) 多人数教育に対応したオリジナルの新教材・教育法の開発

① Winmostar による多人数教育方法の開発

Winmostar (クロスアビリティ社製) は、量子化学計算、分子動力学計算、固体物理計算を簡単なマウス操作で実行するためのオールラウンド型の科学シミュレーションソフトウェアである。学生は無償で使用でき、物質の種類を選んで結晶構造の作成や各種物性の計算が簡単なマウス操作で実行できるため、多人数に対応した教育が可能であることがわかった。シミュレーション例として、図 6 に Cr の拡散係数のアレニウスプロットを示す。クロム鉄系多層膜の相互拡散活性化エネルギー Q と前指数項 D_0 を求めると、傾きが小さい Fe の拡散の傾向が得られた。Cr よりも Fe の活性化エネルギーが高くなり、文献①のデータ群と良い一致を示す活性化エネルギー値が得られた。

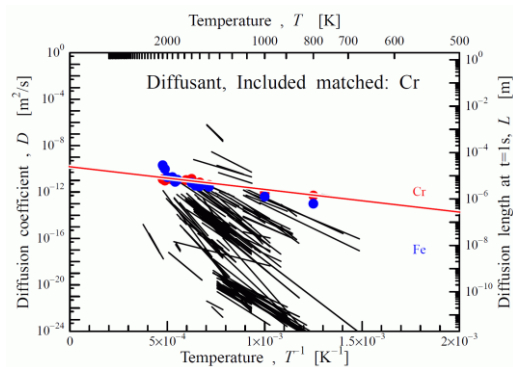


図 6 Cr の拡散係数のアレニウスプロット

これらの科学シミュレーション計算が多人数教育対応に関する機能が特に優れた Winmostar で、多数の条件を多人数に振り分けて実現できることがわかった。この機能は、多人数教育のみならず多人数同時シミュレーション計算の見地からも重要な機能であると言える。

② Google Cardboard による分子構造学習教材の開発

多人数教育を実現するには、安価で誰もが使用できるシステムが必要である。そこで、オープンソースで安価に VR を体験できる Google Cardboard を活用して立体画像を自由に観察可能な VR 分子モデルビューワを開発した。Google Cardboard は、Android スマートフォンとレンズを折りたたみボール紙の本体に組み込んだヘッドマウントディスプレイである。図 7 に作製した Google Cardboard と C60 フラーレンを表示した画面を示す。このように分子モデルの立体画像を観察でき、回転角度や縮尺を変更することが可能であり、観察者が首を傾げるのに応じて連携して動く。

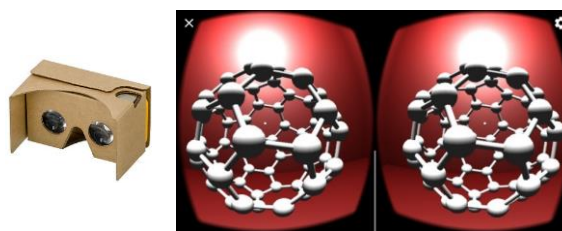


図 7 Google Cardboard と表示画面

Google Cardboard は数百円で準備でき、学生一人一人が作製することによってものづくりの楽しさを体験できる。また、教員の説明を学生全員が聞きながら全員が分子構造を自由に操作しながら立体的に観察し、学習することが可能であり、カラフルで美しく視覚に訴える効果的な多人数教育が実現できる。

(4) まとめと今後の展望

本研究は、学生を対象とする教材と教育法の開発である。学生が自ら取り組む創成実験や卒業研究のテーマとして実施し、学生の目線で行い、様々な電子材料等に分子軌道法や分子動力学法を適用して、有意義な成果をあげることができた。それらは、カラフルで美しく視覚に訴え、直感的な理解を実現でき、学生の興味を喚起する電子材料教材である。そして、深く広く自学自習でき、創造性を育むアクティブラーニング教育法である。

フルラーレンやカーボンナノチューブは、いずれも脚光を浴びている炭素系機能材料で、学生の興味を喚起する絶好の教材である。グラファイト構造とダイヤモンド構造の違いは教科書等によく紹介されているが、定量的な評価や混成軌道のグラフィカルな違いまで明らかにできたことは非常に有意義である。また、実在しない C196 構造体を構築できたのは、まさにシミュレーションならではの大きな成果で、実に楽しく、創造性を育む取り組みであった。分子シミュレーションによる物性研究は容易で便利な解析手法であり、視覚に訴える美しいグラフィック表示やアニメーションにより楽しく研究でき、とても教育的効果が高いことが確認できた。

そして、マテリアリゼーションした 3D モデルを授業で活用するべく教室に持ち込み、説明後に学生に回覧して実際に手に取らせた。学生の興味津々の様子から、3D モデルを見せるだけでなく手に取って確認させることの大切さとその効果を実感することができた。

多人数教育を考えた場合、高価な市販の分子シミュレーションソフトでは限界がある。そこで、学生が無償で使用できる Winmostar の活用を検討した結果、多人数教育への適用が可能であることを確認できた。また、誰もが持っている Android スマートフォンにオリジナルのソフトをインストールし、安価で作製できる Google Cardboard を組み合わせることによって、仮想空間内の分子モデルを自由に立体観察できる VR ビューワを開発でき、分子構造の学習教材として有効活用できることを確認した。

今後、創造性や学際性を育成できる新教材・教育法を開発を目指し、シミュレーションだからこそできる実在しない分子やその集合体の安定性や物性の予測や自由な発想での新機能性電子材料の開発、そして 3D プリンタを用いて分子計算結果をマテリアリゼーションした新教材を電子系高専専門科目において有効活用するための多人数教育にも対応したオリジナルの新たな教育法を開発を推進したい。

<引用文献>

- ① Kazu-masa Yamada and Nobuaki Matsuhashi, Self-Diffusion in Alloys, NEW TRENDS IN ALLOY DEVELOPMENT, CHARACTERIZATION AND APPLICATION, INTECH, 2015, 63-94, DOI: <http://dx.doi.org/10.5772/60993>

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 0件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 松橋信明, 高橋蓮, 大橋功一, 小田和樹, 山田一雅	4. 巻 第55号
2. 論文標題 新教材・教育法の開発を目指した3Dプリンタによる分子計算のマテリアライゼーション (4) 炭素系機能材料及びタンゲステン材料	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 八戸工業高等専門学校紀要	6. 最初と最後の頁 51~57
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.24704/hnctech.55.0_51	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 松橋信明, 高橋蓮, 大橋功一, 小田和樹, 山田一雅	4. 巻 第54号
2. 論文標題 新教材・教育法の開発を目指した3Dプリンタによる分子計算のマテリアライゼーション (3) 炭素材料に関する分子シミュレーションとマテリアライゼーション	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 八戸工業高等専門学校紀要	6. 最初と最後の頁 37~43
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.24704/hnctech.54.0_37	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 松橋信明, 豊岡怜菜, 四役崇明, 山田一雅	4. 巻 第53号
2. 論文標題 新教材・教育法の開発を目指した3Dプリンタによる分子計算のマテリアライゼーション (2) カーボンナノチューブのマテリアライゼーションと3Dプリンタによる造形技術に関する検討	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 八戸工業高等専門学校紀要	6. 最初と最後の頁 35~42
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.24704/hnctech.53.0_35	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 E オリヴィエ, 山田一雅, 松橋信明	4. 巻 第53号
2. 論文標題 Atmega328P マイコンで特に漢字の日本語を表示させるためのコード	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 函館工業高等専門学校紀要	6. 最初と最後の頁 1~21
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.20706/hakodatekosen.53.0_1	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 松橋 信明, 山田 一雅	4. 巻 第52号
2. 論文標題 新教材・教育法の開発を目指した3Dプリンタによる分子計算のマテリアリゼーション (1) 研究計画とC60フラレンのマテリアリゼーション	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 八戸工業高等専門学校紀要	6. 最初と最後の頁 71~77
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 松橋 信明, 佐藤 紀史友, 山端 優斗, 西川 美奈海, 榎本 優斗, 山田 一雅	4. 巻 第51号
2. 論文標題 分子軌道法と分子動力学法を活用した新たな教材と教育法の開発(4) フラレン、強誘電性液晶、水素化アモルファスシリコン、脂質二分膜	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 八戸工業高等専門学校紀要	6. 最初と最後の頁 75-81
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計10件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 松橋信明, 山田一雅
2. 発表標題 分子シミュレーションとマテリアリゼーションによる炭素材料の新教材開発
3. 学会等名 電気関係学会東北支部連合大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山田一雅, 松橋信明
2. 発表標題 遠隔授業用のjavascript 利用理系専門教育演習システムの研究
3. 学会等名 電気関係学会東北支部連合大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山岸陸, 山田一雅, 松橋信明
2. 発表標題 STL型3Dプリンター用ポリゴンデータフォーマットによる材料モデル作製
3. 学会等名 電気関係学会東北支部連合大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山田一雅, 松橋信明
2. 発表標題 遠隔授業用のpgmテキスト画像処理スクリプト利用の簡易学習手法
3. 学会等名 電気関係学会東北支部連合大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山田一雅, 松橋信明
2. 発表標題 医療制御ロボット複数衝突回避バーチャルフェンスの簡易手法
3. 学会等名 電気関係学会東北支部連合大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山本芽依, 山田一雅, 松橋信明
2. 発表標題 MRI水素プロトン緩和を検討するための電気二重層材の時間緩和過程
3. 学会等名 電気関係学会東北支部連合大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 大野聡仁, 山田一雅, 松橋信明
2. 発表標題 Kirkendall効果CuZn合金のOkino法による相互拡散濃度プロファイル評価
3. 学会等名 電気関係学会東北支部連合大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 扇野瞭虎, 大野聡仁, 山田一雅, 松橋信明
2. 発表標題 MD LAMMPSによるFe 融点付近でのFe,Cr自己拡散係数評価
3. 学会等名 電気関係学会東北支部連合大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kazu-masa YAMADA, Nobuaki MATSUHASHI
2. 発表標題 Arrangement for New Piping and DataCenter Housing, Depending on the Condition of Existing, VPN Access to Science Information Network
3. 学会等名 International Conference on Materials, Applied Physics & Engineering 2018 (ICMAE2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kazu-masa YAMADA, Nobuaki MATSUHASHI, Takahiko NAKAMURA, Olivier ETRILLARD
2. 発表標題 Topological Nanoscience Materials of Graphene and Carbon Nanotube Computer 4D Display OpenGL Technique Assisted with Bluetooth Module Equipment
3. 学会等名 Drug Discovery & Therapy World Congress 2016 (DDTWC2016) (国際学会)
4. 発表年 2016年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担 者	山田 一雅 (YAMADA Kazumasa) (40270178)	函館工業高等専門学校・生産システム工学科・教授 (50101)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------