

光造形 3D プリントによる空間充填型結晶構造モデル教材の開発

大宮 峻¹, 笠井 香代子²

¹ 宮城教育大学 教育学部 中等教育教員養成課程 理科教育専攻, ² 宮城教育大学 教育学部

概要：化学の研究や教育において、物質の性質や反応性などを正しく理解するためには物質の立体構造を知る必要があり、三次元の模型やモデルは不可欠である。高等学校化学において、金属やイオンの結晶構造への理解のための空間充填型モデル教材が市販されているが、高価で必要数を揃えるのが困難である。高校生がこの分野を苦手としているのは、生徒 1 人 1 人が手に取れる数の結晶構造模型が高等学校に普及していないことが原因の 1 つとして考えられる。本研究では、体心立方格子と面心立方格子の単位格子の三次元データを、3D CAD により作成し、安価で手軽に光造形 3D プリントで造形できる結晶構造モデル教材を開発した。さらに、これらの造形物の三次元データファイルを ICT 教材として web 上で公表した。

キーワード：結晶構造モデル教材, 光造形 3D プリント, 空間充填モデル, ICT 教材, 化学教育

1. はじめに

化学の研究や教育において三次元の模型やモデルは不可欠なものである。なぜなら結晶や分子の大部分は立体的であり、物質の性質や反応性などを正しく理解するためには、物質の立体構造を知る必要があるからである。近年ではこれらに替わり、PC やタブレット上で結晶や分子の構造を立体的に閲覧できるソフトウェアやアプリケーションが使用されることもあるが、模型やモデルを組み立てたり、実際に手に取って様々な方向から眺めたりすることができる従来の模型やモデルは、現在でも研究や教育に広く使用されている。

結晶や分子の構造を本格的に学習するのは高等学校からであり、高等学校学習指導要領(平成30年告示)解説にも、金属結晶の模型づくりや炭化水素の分子模型の使用が示されている(文部科学省, 2019a)。有機化合物の分子模型としては、原子を球、結合を棒で表す球-棒モデル(ball and stick model)を使用するのが一般的である。炭素を中心とした有機化合物は、炭素原子とほかの原子との結合が4本まで可能であり(「4価」という)、複雑な構造をしていることが多いからである。長年使用されているHGS®分子構造模型(丸善)は、最も安価なセット(A型セット, 有機化学入門用)が1,600円(税別, 2021年12月現在)で、生徒や学生自身が気軽に使用できる(窪田, 2020)。

一方、金属結晶の模型では空間充填モデル(space-filling model)がよく使用されている。これは電子の分布状態を元に原子半径を反映した球で表しており、物質の実際の姿に近いモデルであるが、結合が球の中に埋没して構造がわかりにくいのが欠点である。金属結晶の学習では、主な結晶構造である体心立方格子(body-centered cubic lattice, bcc lattice)、面心立方格子(face-centered cubic lattice, fcc lattice)、六方最密構造(hexagonal closest packing)の単位格子中で、ある原子が何個の原子と接しているかを示す配位数や、原子が結晶中に占める体積の割合を示す充填率の算出などを通じて、結晶構造の理解に繋げている。大学入試などでよく取り上げられているものの、生徒の理解度が低いのが現状である(和田, 大橋, 2015)。これは、結晶構造の空間充填モデルが高価で、生徒自身が実際に手に取ってじっくりと観察するのが難しいのが原因の1つではないかと思われる。例えば、株式会社ナリカ(NaRiKa)の充填型結晶模型は、前述の3種類の単位格子1個が6,800~17,800円(税別)で、体心立方格子が12.0 cm, 面心立方格子が14.8 cm, 六方最密構造が20.5×17.5×17.0 cmの大きさである。また、立方格子の単位格子1個を8個の立方体に分割し、相互に連結させて無限に変換できる無限展開立方体を元にして、単位格子の内面を観察できる立

体反転式結晶構造模型「クリキューブ」(NaRiKa)は8,500～9,000円(税別)と、より高額で、いずれも7.2 cmの大きさである。結晶全体の構造を理解するには、これらの単位格子が少なくとも8個($2 \times 2 \times 2$)必要だが、これだけの数の結晶模型を高等学校で揃えるのは困難である。

市販の教材が高価であるため、結晶構造模型教材を安価に自作する方法も報告されてきた。市販の発泡スチロール球を使用した近年の報告には、原子として発泡スチロール球、単位格子として透明なプラスチック板を使用した教材作成の例がある(芝原, 佐藤, 市田編著, 1995)。また、柔らかい発泡スチロール球を使用すると、結晶構造に応じて球を1/2や1/8に切断する工作需要であり、その際に欠けやすい欠点があるが、これを克服した「スーパーボール」(latex ball)を使用する例が報告されている(Ohashi, 2015; 和田, 大橋, 2015)。生徒はこれらの工作を通じて、結晶構造への理解を深めることもできるが、一方で工作に時間がかかったり、工作の指導が必要であったりするなど、時間や労力がかかることもある。

本研究では、安価で手軽に作製できる空間充填型結晶構造モデルを高等学校に普及させることを目指して、体心立方格子と面心立方格子の結晶構造モデルを3Dプリンタで造形し、無限展開立方体として連結させた新しい結晶構造モデル教材を開発した。近年、3Dプリンタは家庭でも購入できる2,3万円の機種が販売されるようになり、教育分野において、様々な教科での教材作成や、STEAM教育への展開などが注目されている。2019年には文部科学省が定める「中学校教材整備指針」に3Dプリンタが新たに追加され(文部科学省, 2019b)、今後教育現場に普及していくことが考えられる。

2. 3Dプリンタによる造形

3Dプリンタは造形物の3Dデータをもとに、断面

となる二次元の層を積み重ねることで三次元立体物を造形する積層方式を基本としている。これまで家庭用として普及しているのは、長い繊維状の熱可塑性樹脂(フィラメント)を加熱して溶(融)かし、細いノズルから押し出しながら積層する熱溶解積層方式の3Dプリンタで、構造が比較的単純で低価格だが、積層段差が目立ち表面が平滑な精密さを求められる造形には不向きである。最近では、より精度が高く複雑な造形が可能である光造形方式の3Dプリンタが低価格で入手できるようになった。これは、液体状の光硬化樹脂(UVレジン)を入れた液槽の表面に紫外線を照射して一層分の樹脂を硬化させ、造形台を垂直方向に移動し次の一層分の樹脂を硬化させる作業を繰り返して立体物を造形する方法である(門田, 2015; 柳生, 結石, 河島, 2017; 山口, 2021)。結晶構造の空間充填モデルでは、体積の多くの割合を占める球体を基本とするため、平滑な表面で造形できる光造形方式で教材を作製することにした。

3Dプリンタによる造形の一般的な手順を図1に示す。プリンタの方式や種類によらず、この手順はおおむね同じである。まず、立体物の3Dデータを入手あるいは3D CADソフトで作成し、これを立体物の三次元情報を持つSTLファイルとして保存する。このファイルからスライサーソフトを使用して、二次元の各層のデータに変換する。このときに必要に応じて、造形台と立体物、あるいは立体物の部分どうしを繋ぐ支持体(サポート材)を付与して、3Dプリンタ出力データとして保存する。

本研究では、3DプリンタとしてAnycubic社Photon Zeroを使用した(2021年10月時点で税込25,800円)。これはUV LEDライトの光を液晶ディスプレイ(LCD)により選択的に透過/遮蔽することで二次元の各層を硬化させる方式で、最近の安価な光造形3Dプリンタのほとんどがこのタイプである(山口, 2021)。以下に3Dプリンタによる空間充填型結

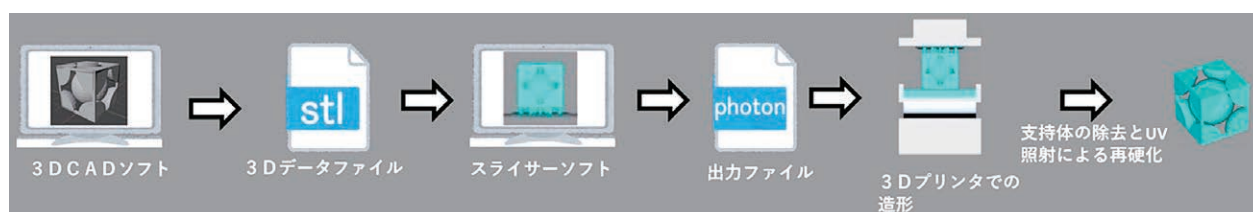


図1 3Dプリンタによる造形物作成の手順

晶構造モデル教材の造形方法を、図1の手順に従って示す。

(1) 3D CADソフトによる立方格子のモデリングと3Dデータの作成

空間充填型結晶構造モデルは、無償で利用できるオープンソースの統合型3D CG製作ソフトウェアであるBlender財団のBlenderで設計した。(https://www.blender.org/)。Blenderは3D CGや2Dアニメーション製作用のモデリングソフトであるが、3D CADとしても使用できる。本研究で使用したのは、UV Sphere (UV球)やCube (立方体)の設置や移動、寸法や位置の設定、立体物の複製や分割などの簡単なモデリング操作である。Blenderを起動すると、x, y, zの3軸が表示される。以下に示す体心立方格子と面心立方格子のモデリングでは、操作の簡易化と単純化を図るため、3軸の交点を中心とした1辺の長さが2の単位格子を扱う。2種類の構造について、単位格子の大きさを統一することで、学習者が双方の配位数や充填率などを比較しやすくなるよう工夫した。図2にBlender上で作成した2種類の立方格子の様子を示す。

体心立方格子は、やや空間に隙間のある構造である。単位格子は立方体で、その中心と各頂点に原子が配列している。単位格子中に含まれる原子の数は2個で、配位数は8である。また、単位格子中の原子の占める体積の割合(充填率)は68%である。この結晶構造を取る金属としては、Na(ナトリウム)やK(カリウム)、Fe(鉄)などが挙げられる。単位格子の1辺の長さ(a)と原子半径(r)の関係を考える際には、単位格子の対角線を含む断面を利用する。この断面を見ると、図2a), b)のように単位格子の対角線上に3つの原子が配列していることが分かる。この対角線の長さは $\sqrt{3}a$ であり、これが原子半径の4倍に等しいため、 $r = (\sqrt{3}a)/4$ という関係が得られる。

面心立方格子は、原子同士の隙間が最小限となる最密構造とされている。単位格子は立方体の形を取り、その各頂点と各面の中心に原子が配列している。単位格子中に含まれる原子の数は4個であり、配位数は12である。また、充填率は74%である。この結晶構造を取る金属としては、Al(アルミニウム)やCu(銅)、Ag(銀)、Au(金)などが挙げられる。単位格子の1辺の長さ(a)と原子半径(r)の関係を考えるときには、単位格子の各面を利用する。各面を見る

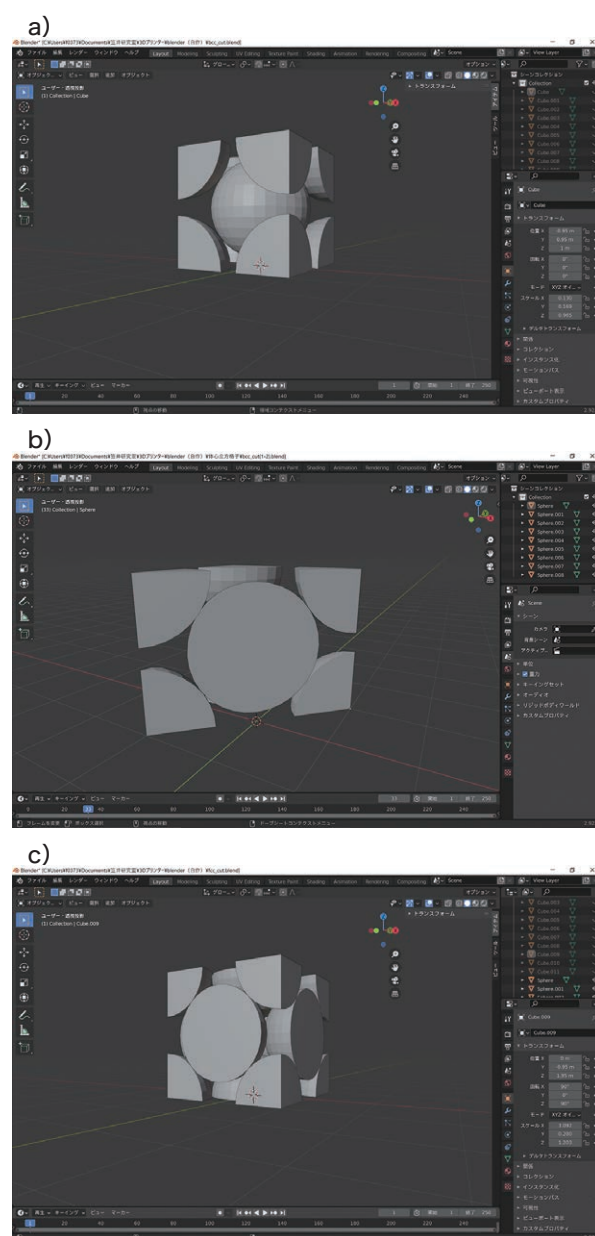


図2 Blenderで作成した立方格子の様子
a) 体心立方格子 b) 体心立方格子を対角線で切断した断面図 c) 面心立方格子

と、図2c)のように正方形の対角線上に3つの原子が配列していることが分かる。正方形の対角線の長さは $\sqrt{2}a$ であり、これが原子半径の4倍に等しいため、 $r = (\sqrt{2}a)/4$ という関係が得られる。

体心立方格子の単位格子のモデリング手順を以下に示す。まず、UV球を設置する。単位格子の1辺の長さが2のとき、原子半径は $\sqrt{3}/2$ であるため、直径を表す寸法には $\sqrt{3}$ の値を設定する。次に、寸法を設定したUV球を複製し、立方体の中心と各頂点の位置座標である $(\pm 1, \pm 1, 0)$, $(0, 0, 1)$, $(\pm 1, \pm 1, 2)$ に設

定することで、合計9個のUV球を配置する。最後に、1辺の長さが2となる位置で分割し、6つの面について断面を取ることで、体心立方格子の構造が完成する。

次に、面心立方格子の単位格子のモデリング手順を以下に示す。基本的な操作は体心立方格子と同様である。単位格子の1辺の長さが2のとき、原子半径は $\sqrt{3}/2$ であるため、直径を表す寸法には $\sqrt{2}$ の値を設定する。UV球を複製し、立方体の各頂点と各面の中心の位置座標である $(0, 0, 0)$, $(\pm 1, \pm 1, 0)$, $(\pm 1, 0, 1)$, $(0, \pm 1, 1)$, $(0, 0, 2)$, $(\pm 1, \pm 1, 2)$ に設定することで、合計14個のUV球を配置する。6つの面について断面を取ることで、面心立方格子の構造が完成する(白濱, 福山, 遠藤, 山岡, 2016)。

このようにして金属結晶の単位格子3Dモデルが完成したが、これらには3Dプリンタで造形する上で問題がある。3Dプリントの積層は下から順番に進んで積み重なるため、何もない空間から突然積層がはじまるような立体物をきれいに造形することは困難である(門田, 2015)。この場合は、前述のようにスライサーの使用の段階でサポート材を付与して造形することも可能であるが、このサポート材は造形後に除去することを前提にしている。今回の立方格子では、造形後のモデルの強度を保持するためにも、3Dモデリングの段階で単位格子の各辺に格子枠を付与することにして、 $0.1 \times 0.1 \times 2$ mmの四角柱を各辺に配置し、サポート材を兼ねる格子枠のモデリングを行った(図3)。このようにして作成した体心立方格子と面心立方格子の単位格子の3D CADデータをSTLファイルに変換した。

(2) スライサーソフトによる3Dプリンタ出力ファイルの作成

STLファイルから3Dプリンタ出力ファイルを作成するスライサーソフトとして、プリンター付属のPhoton Workshopを使用した。まず、使用する3Dプリンターの機種を選択し、STLファイルをPhoton Workshopに読み込んだ。Photon Zeroの最大造形サイズは97 (L) \times 54 (W) \times 150 (H) mmであり、造形台の大きさと出力ファイルの拡張子が機種に応じて設定される。立体物の大きさはPhoton Workshop上で任意に変更でき、複数個を同時に造形することも可能である。その際にはPhoton Workshopの画面上で立体物を複製する。今回は立方格子の大きさ

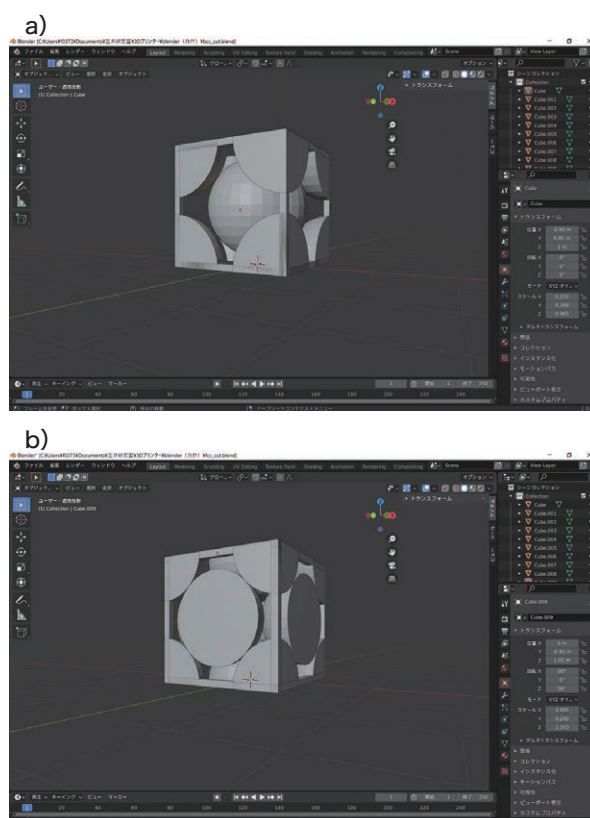


図3 立方格子の単位格子の枠を付与した様子 a) 体心立方格子 b) 面心立方格子

を2.4cmとした。3Dプリンタで直方体や円柱のような、直線状に近い立体物を造形する際には、全体を傾けた状態でサポート材を付与すると、造形物の精度を高めることができる。今回の造形物も立方体であるため、x軸とy軸について10°傾けてからサポート材を付与した。サポート材はPhoton Workshopのオート機能で自動的に付与することができるが、今回はマニュアルで行った。まず、立体物全体を4 mm浮かせ、底面の辺上にそれぞれ5つのサポート材を付与した。加えて、体心立方格子については底面の1/8球にそれぞれ1つと中心の球に2つ、面心立方格子については底面の1/2球に5つ付与した。図4に体心立方格子と面心立方格子におけるサポート材付与の様子を示す。

3. 結果と考察

(1) 3Dプリンタによる立方格子の造形

Photon Workshopで作成した出力ファイルより、層の厚さを0.05 mmとして、Photon Zeroで造形した。標準的な造形方法を以下に示す。UVレジンとしてElegoo社Standard Photopolymer Resin

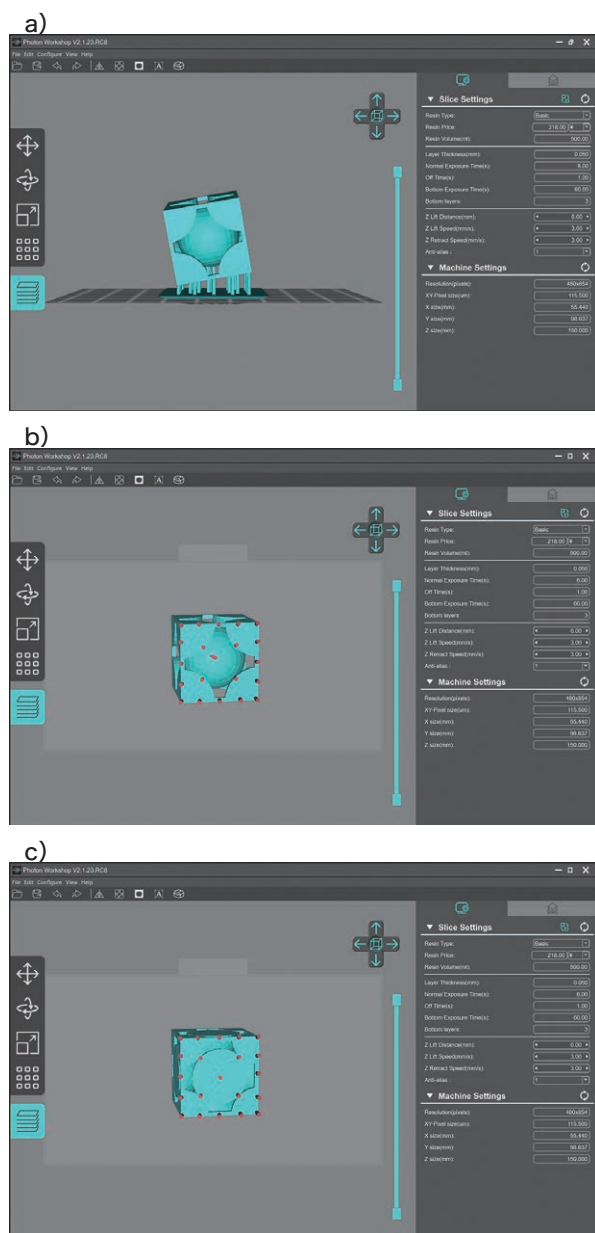


図4 Photon Workshop で立方格子にサポート材を付与した様子。底面図ではサポート材を褐色で示す。 a) 体心立方格子の正面図 b) 体心立方格子の底面図 c) 面心立方格子の底面図

の Translucent を使用し、底面の照射時間と造形物本体の照射時間をそれぞれ60 秒と8 秒とした。UV レジン使用量の目安と造形の所要時間は、Photon Workshop での出力ファイルの作成の際に表示される。UV レジン使用量は、体心立方格子と面心立方格子でそれぞれ10.514 mL と10.755 mL、所要時間はどちらも2時間50分と表示された。

造形後の様子を図5に示す。造形物を造形台から外し、付着している液体のレジンを拭き取り、メタノー

ルあるいは2-プロパノールで洗浄した。造形物からサポート材をペンチで除去し、サンドペーパーで研磨した。その後Anycubic Cure and Wash Plus により、紫外線を2分間照射して再硬化させた。体心立方格子と面心立方格子の造形物を図5に示す。

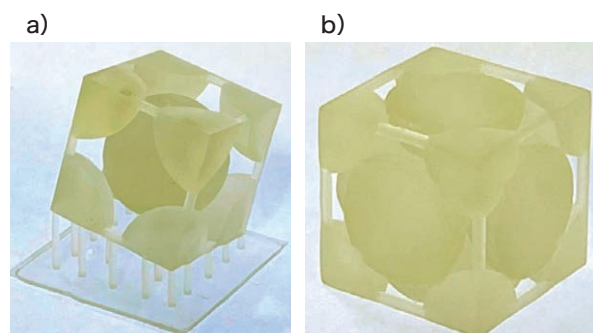


図5 造形した立方格子 a) 体心立方格子（サポート材つき） b) 面心立方格子

(2) 無限展開立方体として連結させた結晶構造の空間充填モデル

3. (1) の2種類の立方格子を8個ずつ造形した。これらを2×4個に並べ、立体反転式結晶構造模型「クリキューブ」と、利安(1985)の文献にある展開図を参考にして、隣りの立方格子と接する辺の8箇所を、折れ曲がり可能なようにテープで貼り付けた。これをまとめて2×2×2個の立方体にしたのが、図6である。この立方体を反転操作すると、外側の面と内側の面それぞれ24個(3×8個)が入れ替わり、結晶構造の中の様子を見ることができる。図7のようにL字形に組み替えると、中央の原子の周りの様子がわかりやすい。Translucent のUV レジンを使用して、ある程度透過性のある造形物にしたことも、その要因の1つである。

体心立方格子と面心立方格子のモデル全体の経費は、3. (1) に示した各立方格子のレジン使用量を基に、以下のように算出した。UV レジン1 mL の質量をシリリングで測定したところ1.068 gであった。UV レジンの購入価格は1,000 gで4,100円(100円以下切り上げ)であり、1 mLあたりのレジン4.4円と算出される。体心立方格子と面心立方格子1個あたりの経費はそれぞれ46.3 円と47.3 円となり、市販の結晶構造模型に比べて大きさは小さいものの、はるかに安価に作製することができた。さらに、8個1組の結晶構造モデル全体では体心立方格子と面心立方格子で

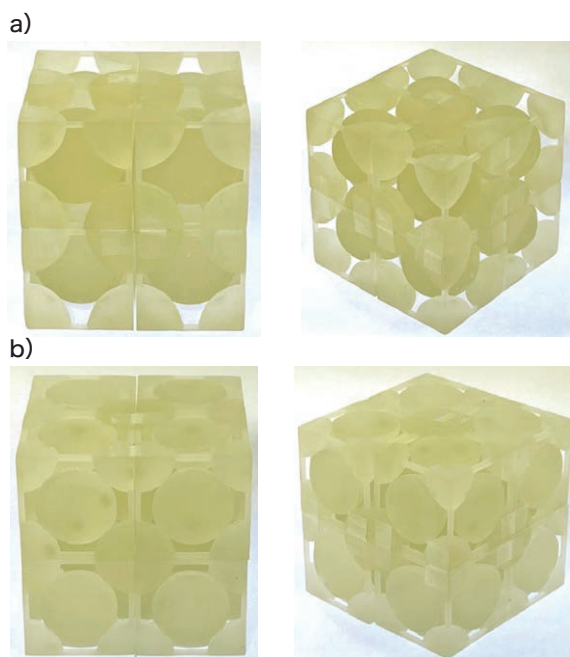


図6 8個の立方格子を連結させた様子。a) 体心立方格子 b) 面心立方格子

それぞれ370円と378円であり，生徒1人1人が手に取って観察することも十分に可能であると期待できる。

4. まとめと今後の展望

本研究により，光造形3Dプリンタを使用して，生徒1人1人が扱える安価な結晶構造モデル教材を作製することができた。モデルの三次元データは，無償の3D CADソフトのBlenderで設計した。これらのモデルとサポート材を付与した立体物の三次元データSTLファイルは，当研究室ホームページ (<https://sites.google.com/staff.miyakyo-u.ac.jp/crystals>) 上にICT教材として公開している。

これらの教材の活用例として，「化学」の「金属結晶の構造」での学習を以下に挙げる。各生徒に体心立方格子と面心立方格子の単位格子モデルを1つずつ配付する。40人学級を想定した場合，3で述べた各格子モデルの作製経費より算出すると，学級全体で3,744円である。このモデルを手にとって観察しながら，単位格子の構造，配位数，単位格子中の原子数などを確認し，それぞれの立方格子での充填率を算出する。単位格子中の原子数については，図2a)やc)のような図と説明が教科書に掲載されており(竹内 ほか, 2018)，体心立方格子では単位格子の中央に1個，立方格子の8ヶ所の頂点に8分の1個の原子が含まれて

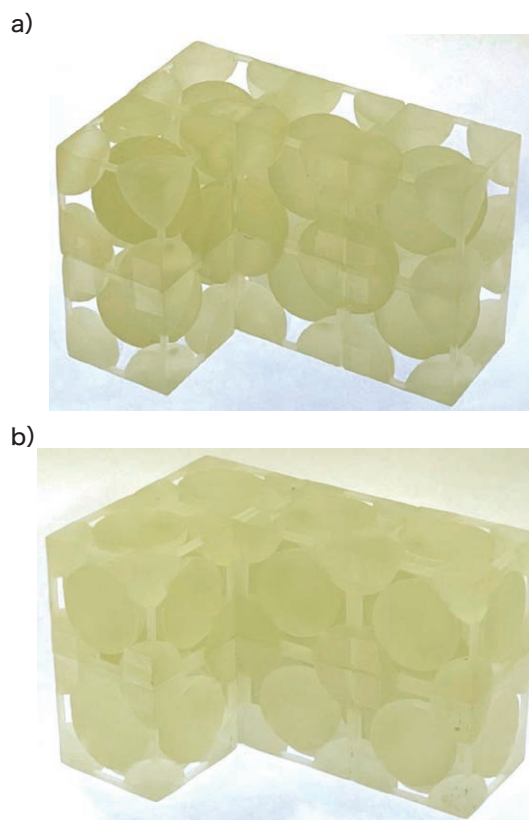


図7 8個の立方格子を連結させた様子。a) 体心立方格子 b) 面心立方格子

いるため，合計で $1 + 1/8 \times 8 = 2$ 個となる(図2a))。一方，面心立方格子では，立方格子の6ヶ所の面に2分の1個，8ヶ所の頂点に8分の1個の原子が含まれているため，合計で $1/2 \times 6 + 1/8 \times 8 = 4$ 個となり，体心立方格子と比較して充填率が高いことがモデルから容易に理解できる(図2c))。また，これらの単位格子モデルを3方向に積み重ねていくと，結晶格子全体の構造を知ることができる。グループ学習としてこれを取り入れると，結晶格子中の規則的な原子の配列の最小単位が単位格子であることが実感できる。結晶に関する包括的な学習は，「化学基礎」や「化学」の「金属結晶の構造」より前に行うが，これらの教材を使用することで，より効果的な復習ができるとともに，この後に学習する「イオン結晶」「分子結晶」「共有結合結晶」への橋渡しになることも期待できる。今後は教育現場での実践や教材の普及を図る予定である。

なお，本研究では3Dプリンタで結晶構造の単位格子全体を1つの立体物として造形したが，最近報告された結晶構造モデル教材には，3Dプリンタで造形した金属原子のパーツを市販の立方体アクリルケース

に入れ、水や塩化ナトリウムで空間の体積を計測して充填率を算出する教材の例がある(赤坂, 門田, 窪田, 池田, 渡辺, 2021)。これら2種類の教材を目的に応じて使用することにより, 結晶構造への理解がより深まることが期待できる。

付記

本研究の一部は, 公益財団法人日本化学研究会化学研究連絡助成金および宮城教育大学重点支援研究経費の支援により実施された。論文は, 森友康, 大宮峻, 反畑爽, 笠井香代子(2021)「3D プリンターを活用した結晶構造ICT教材の開発」『令和3年度化学系学協会東北大会講演予稿集』p. 385 の一部をもとに大幅にデータを追加した上で大宮が執筆し, 笠井が加筆修正した。著者全員が利益相反はない。

謝辞

本研究にあたり, ご助言をいただいた宮城教育大学の渡辺尚教授, 門田和雄教授, 熊崎好吹氏, 青陵中等教育学校の窪田篤人教諭, 宮城第一高等学校の菅原健久教諭に感謝申し上げます。

参考文献

赤坂颯樹, 門田和雄, 窪田篤人, 池田和正, 渡辺尚(2021)「3D プリンターを用いた新しい金属原子模型の教材開発 充填率を実験で求めることが可能になる教材」『日本理科教育学会東北支部大会発表論文集』Vol. 60, p. 49.

Ohashi, A. (2015) Using Latex Balls and Acrylic Resin Plates To Investigate the Stacking Arrangement and Packing Efficiency of Metal Crystals, J. Chem. Edu., Vol. 92, pp. 512-516.

門田和雄(2015)『門田先生の3D プリンタ入門』講談社

窪田好浩(2020)「化学構造を視覚化する分子模型の種類」『化学と教育』Vol.68, pp. 180-183.

芝原寛泰, 佐藤美子, 市田克利 編著(2015)「11. 金属結晶の単位格子模型の製作」『高校化学実験集』電気書院, pp. 72-77.

白濱弘幸, 福山隆雄, 遠藤秀治, 山岡武邦(2016)「結晶構造モデルを教材とした自然科学教科間連携の教育プログラムの予備実践」『日本産業技術教育学会誌』Vol.58, pp. 1-9.

竹内敬人 ほか 20名(2018)『改訂 化学』東京書籍

利安義雄(1985)「反転結晶構造模型」『公益財団法人東レ科学振興会第17回理科教育賞』https://www.toray-sf.or.jp/awards/education/pdf/s60_04.pdf (2021年12月26日閲覧)

文部科学省(2019a)「第5節 化学」『高等学校学習指導要領(平成30年告示)解説 理科編 理数編』実教出版, pp. 96-112.

文部科学省(2019b)「中学校教材整備指針」『教材整備指針http://www.mext.go.jp/component/a_menu/education/detail/_icsFiles/afieldfile/2019/08/06/1316723_4_2.pdf (2021年10月2日閲覧)

柳生浄勲, 結石友宏, 河島巖(2017)『3D ものづくりの本』日刊工業新聞社

山口勇二(2021)「初めての3D プリンタ選択ガイド」『インターフェース』Vol. 47, pp. 33-36.

和田敬行, 大橋淳史(2015)「学習の理解を容易にする結晶構造モデル教材の開発」『愛媛大学教育学部紀要』Vol.62, pp. 147-154.