

水の状態変化を理解するための Web 教材開発 分子動力学シミュレーションを利用して

Web-based educational tool to understand the state change of water through molecular dynamics simulation

赤松 直[1]; 川上 紳一[2]; 河村 雄行[3]

Tadashi Akamatsu[1]; Shin-ichi Kawakami[2]; Katsuyuki Kawamura[3]

[1] 高知大・教育; [2] 岐阜大・教育; [3] 東工大・理・地球惑星

[1] Fac. Education, Kochi Univ; [2] Fac. Educ. Gifu Univ.; [3] Earth and Planetary Sci., Tokyo Inst. Technology

<http://www.kochi-u.ac.jp/~akamatsu/>

1. はじめに

地球上において水はありふれた物質であり, その状態変化 すなわち固相の氷(氷床, 雪など), 液相の水(河川水, 海水, 雲など), 気相の水蒸気(大気中の水分など)といった状態の変化 は日常的によく見られる現象である. 水の固相・液相・気相間の状態変化を原子・分子レベルでイメージ把握しておくことは, 化学教育においてのみならず, 地学教育においても基礎的な重要事項である. しかしながら, 原子や分子がどのような位置関係にあり, またどのように運動しているかを実際に観察することはできないため, この現象を生徒達にどう伝えたらよいか, 悩ましいところである.

ところが最近では, 水分子の運動をコンピュータシミュレーション(分子動力学法)によって再現し, その計算結果をアニメーション表示することができるようになってきている. このアニメーションを学校教育における教材として活用するための試みもなされている[1].

今回我々は, 水の融解・氷の蒸発のアニメーションを Web ページ上で表示する教材を開発した. 本教材の長所としては, 以下の3点が挙げられる:

- (1) ネットワークを通じて瞬時にアクセスできる.
- (2) Windows 搭載機, Macintosh, Workstation (Solaris) のいずれからでもアニメーションを見ることができる.
- (3) 融解/蒸発の起きている「見どころ」をすぐに眺めることができる.

2. 教材の作成方法

2-1. 分子動力学計算

96 個の H₂O 分子 (= 192 個の H 原子 + 96 個の O 原子) からなる系を用いてシミュレーションを行った. 粒子間力(クーロン力, 分子間力, 近接反発力, 共有結合・水素結合による力)を与えるためのポテンシャルとしては, 河村によるもの(2003 年版)を使用した. 氷の融解あるいは水の融解を再現するために適した温度条件を試行錯誤的に調べ, それぞれ 80 および 300 とした. 計算時の時間の刻み幅は 0.4 fs/step とし, 100 ステップ (= 0.04 ps) 毎に全ての粒子座標をテキストファイルに記録した.

2-2. 計算結果の画像表示とその AVI ファイル化

テキストファイルに記録された 100 ステップ毎の粒子座標を読み込んで画像表示(ステレオ図)を順次行うとともに, 各画像内容をビットマップファイルに保存した. 次に, これらビットマップファイル多数を結合して動画ファイル(AVI ファイル)を作成した.

2-3. Web ページの作成

動画ファイルおよび静止画ファイルを利用しつつ Web ページを作成した.

3. 結果

本教材は, 以下のサイトで見ることができる.

- ・ <http://www.kochi-u.ac.jp/~akamatsu/H2O/> (高知大サイト)
- ・ <http://chigaku.ed.gifu-u.ac.jp/chigakuhp/html/kyo/1/H2O/> (岐阜大ミラーサイト)

氷の融解アニメーションでは, 水分子の六角形状の配置が壊れていく様子が, また水の蒸発アニメーションでは, 密度の減少(体積が増大)していき様子がよくわかる. 上記ページの一部(融解する前の氷, 融解直後の水についての静止画像)を抜き出して図 1 に示した.

文献

- [1] 林, 山川, 稲場, 河村 (2002) 分子シミュレーションによる氷の融解現象の可視化. 日本コンピュータ化学会 2002 年春季年会プログラム, 1P12. <http://www.sccj.net/event/nenkai/youshi/1P12.pdf>