

水の状態変化を原子・分子レベルで理解するための Web 教材の改良

Improvement of web-based educational tool to understand the state change of water in atomic scale

赤松 直[1]; 川上 紳一[2]; 南場 功充[1]; 澤口 直哉[3]; 河村 雄行[4]

Tadashi Akamatsu[1]; Shin-ichi Kawakami[2]; Norimitsu Nanba[1]; Naoya Sawaguchi[3]; Katsuyuki Kawamura[4]

[1] 高知大・教育; [2] 岐阜大・教育; [3] 産総研・計測フロンティア研究部門; [4] 東工大・理・地球惑星

[1] Fac. Education, Kochi Univ; [2] Fac. Educ. Gifu Univ.; [3] Research Institute of Instrumentation Frontier, AIST; [4] Earth and Planetary Sci., Tokyo Inst. Technology

<http://akebono.ei.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、雨など）、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のか、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化することができるようになっており、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（林ほか、2002）。

我々のグループでも、氷の融解・水の気化（沸騰）の起きている「見どころ」を Web ページ上でアニメーション表示する教材の開発を行なっている（赤松ほか、2004）。本教材は中学校や高校の授業で使われることを想定して作成しているが、子どもから専門家まで楽しんでいただくことができる。最近の改良点は以下のとおりである。

1) 3D 表現によって水素原子や酸素原子を球形らしく表示することが可能となった。

（ユーザの好みに応じて、「3D 表示モード」と従来の表示モード「ステレオ図 表示モード」との切り替えができるようにしてある。）

2) アニメーションを様々な方向から眺めたいユーザのためにオプション機能を追加した（Windows 搭載機における 3D 表示モードのみ）。

3) 語句の言い回しやページのデザインの変更を随所で行なった。

今回は、本教材の最新版について報告する。

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計算を行い、50 ステップ (= 0.02 ps) あるいは 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 50 ステップないし 100 ステップ毎の粒子座標を読み込んで画像表示を順次行なうとともに、各画像内容を JPEG 形式（3D 表示モード）あるいはビットマップ形式（ステレオ図 表示モード）のファイルに保存した。次に、これら多数の静止画ファイルをもとに動画ファイル（AVI 形式）を作成した。

2-3. アニメーションを様々な方向から眺めるためのオプション機能の追加

この機能は、フリーソフトの 3D AVS Player (KGT Inc.) を用いて、粒子座標の記録されたファイルを再生させるという方式のものである。上記 2-1 で作成したテキストファイルをもとに、「GFA 形式」(3D AVS Player が読み込むことができるバイナリ形式) のファイルを作成した。

2-4. Web ページの作成

動画ファイル、静止画ファイル、および GFA 形式の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事ができる。

・ <http://akebono.ei.kochi-u.ac.jp/~akamatsu/H20/> (高知大サイト)

・ <http://chigaku.ed.gifu-u.ac.jp/chigakuhp/html/kyo/1/H20/> (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、また水の気化（沸騰）アニメーションでは、密度の減少（体積が増大）していく様子がよくわかる。上記ページの一部分を抜き出して図 1 および図 2 に示す。

現場の先生方のご意見を取り入れつつ、本教材を更に改良していきたいと考えている。なお、固相 - 液相共存状態のアニメーションを現在作成中であり、講演時にはご覧いただける予定である。

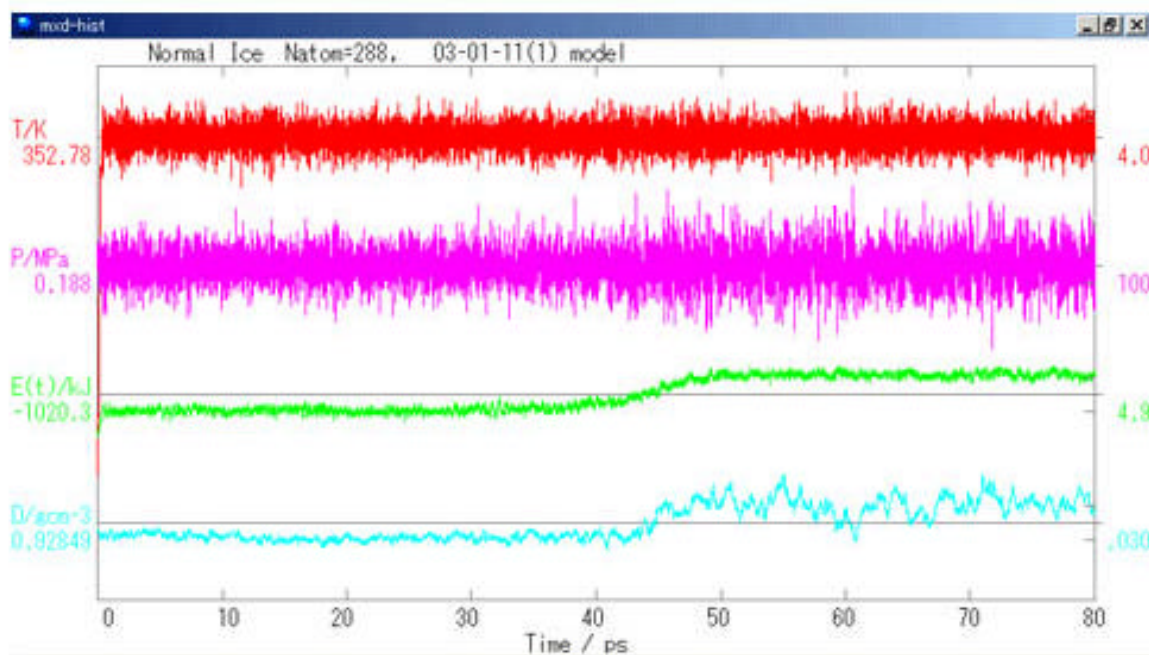
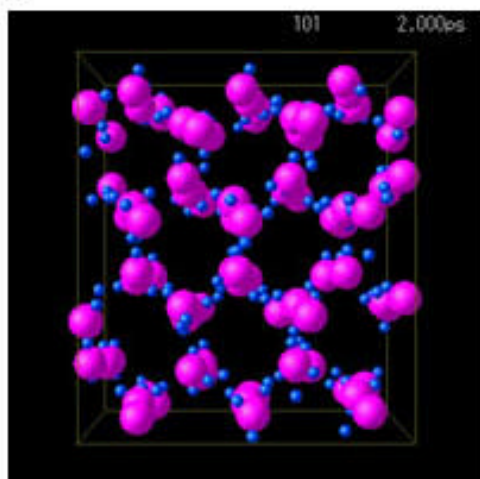


図1. 氷の融解計算における温度 T 、圧力 P 、内部エネルギー E 、密度 D の履歴. 96 個の H_2O 分子 (=192 個の H 原子 + 96 個の O 原子) からなる氷を、 80°C (= 353 K) に保持したところ、約 40 ps (= 40×10^{-12} 秒) 後に融解が始まり、内部エネルギーおよび密度の上昇が起きた.

(a)



(b)

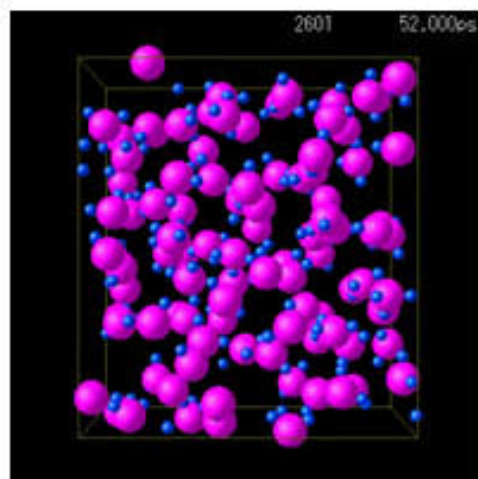


図2. 氷および水についての静止画像. (a) 融解する前の氷. (b) 融解直後の水. Web ページ上のアニメーションにおいては、氷や水を作っている H 原子 (小さな玉) と O 原子 (大きな玉) とが激しく動いている様子を眺めることができる.