

演 題	水の状態変化を理解するための Web 教材の改良	
発 表 者 (所 属)	○赤松 直 ¹ , 川上 紳一 ² , 南場 功充 ¹ , 澤口 直哉 ³ , 河村 雄行 ⁴ (高知大 教育 ¹ , 岐阜大 教育 ² , 産総研 計測フロンティア ³ , 東工大院 理工 ⁴)	
連 絡 先	¹ 〒780-8520 高知市曙町 2-5-1 ² 〒501-1193 岐阜市柳戸 1-1 ³ 〒463-8560 名古屋市守山区下志段味穴ヶ洞 2266-98 ⁴ 〒152-8550 東京都目黒区大岡山 2-12-1	
キーワード	氷の融解, 水の気化, 分子動力学シミュレーション, アニメーション	
開発意図 適用分野 期待効果 特徴など	氷の融解・水の気化(沸騰)を原子・分子レベルでアニメーション表示する Web 教材である。本教材は Windows, Macintosh, Workstation (Solaris)で使用でき, 融解・気化の起きている「見どころ」をすぐに眺めることができる。	
環 境	適応機種名	DOS/V 機, Macintosh, Workstation
	O S 名	Windows, Mac OS, Solaris
	ソース言語	HTML
	周辺機器	インターネットに接続されていること
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	具体的方法
	・未定	Web Site 上で直接閲覧可能

1. はじめに

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、化学教育における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[1]。

我々のグループでも、氷の融解・水の気化(沸騰)のアニメーションを Web ページ上で表示する教材の開発を行なっている[2]。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]参照).

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 [3]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.

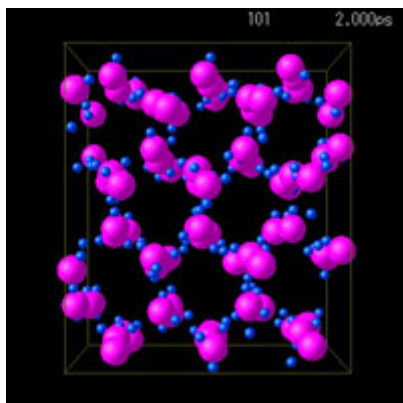
3. 結果

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. 3D 表示モードにおける氷と水についての静止画像を図 1 に示す.

(a)



(b)

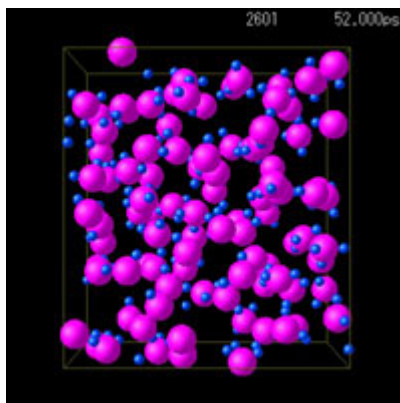


図 1. 氷および水についての静止画像

(a) 融解する前の氷.

(b) 融解直後の水.

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.

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>
- [2] 赤松, 川上, 河村 (2004) 水の状態変化を理解するための Web 教材開発 一分子動力学シミュレーションを利用して 一. 日本コンピュータ化学会 2004 年春季年会プログラム, 1P05.
<http://www.sccj.net/event/nenkai/2004sp/program/abstract-pdf/1P05.pdf>
- [3] 3D AVS Player : http://viz-journal.kgt.co.jp/FS-APL/FS-Form/form.cgi?Code=eval_3days