

物質中の原子・分子の動きをイメージ把握するための Web 教材 —分子動力学シミュレーションを利用して—

○赤松 直¹, 川上 紳一², 田 偉¹, 南場 功充¹, 澤口 直哉³, 河村 雄行⁴

¹高知大学教育学部 (〒780-8520 高知市曙町 2-5-1)

²岐阜大学教育学部 (〒501-1193 岐阜市柳戸 1-1)

³室蘭工業大学工学部 (〒050-8585 室蘭市水元町 27-1)

⁴東京工業大学大学院理工学研究科 (〒152-8551 東京都目黒区大岡山 2-12-1)

1. はじめに

物質中で原子・分子が動く様子を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、それを実際に観察することができないため、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。

ネット上には、固体・液体・気体の様子を原子レベルでアニメーション化した教材が複数公開されている [1]。しかしながら、従来の教材は、1) 一種類の原子で構成されたモデル物質に限られており、2) 原子の運動の仕方も想像上のものであった。ところが最近では、物質中の原子や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た。我々のグループは、分子動力学計算の結果を利用した Web 教材の開発を行なっている [2, 3]。

今回は、1) 既に公表済みの「Web 教材 水の状態変化」を改良するとともに、2) NaCl の状態変化 や NaCl の水への溶解 を視覚化する教材を新たに作成したので報告する。

2. 教材の作成方法

2-1. 分子動力学計算とアニメーション作成

分子動力計算が終了すると、全ての粒子の座標が微小時間刻みにテキストファイルに記録される。このテキストファイルに記録されたデータをもとに、各ステップにおける静止画像を順次表示するとともに、各画像内容を JPEG 形式のファイルに保存した。次に、これら多数の静止画をもとに動画ファイル (AVI 形式 ないし アニメーション GIF 形式) を作成した。

2-2. 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 [4] 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。

2-3. 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. 教材の内容

3-1. 「水の状態変化」

氷の融解・水の気化 (沸騰) のアニメーションに加えて、今回新たに氷と水が共存した系でのアニメーションを作成した。温度を高め設定すると少しずつ融解が進み、低めに設定すると少しずつ固化していく様子を見ることが出来る (図 1)。Web ページのデザインの改良も少しずつ行なっている。



水が固化して氷になる様子

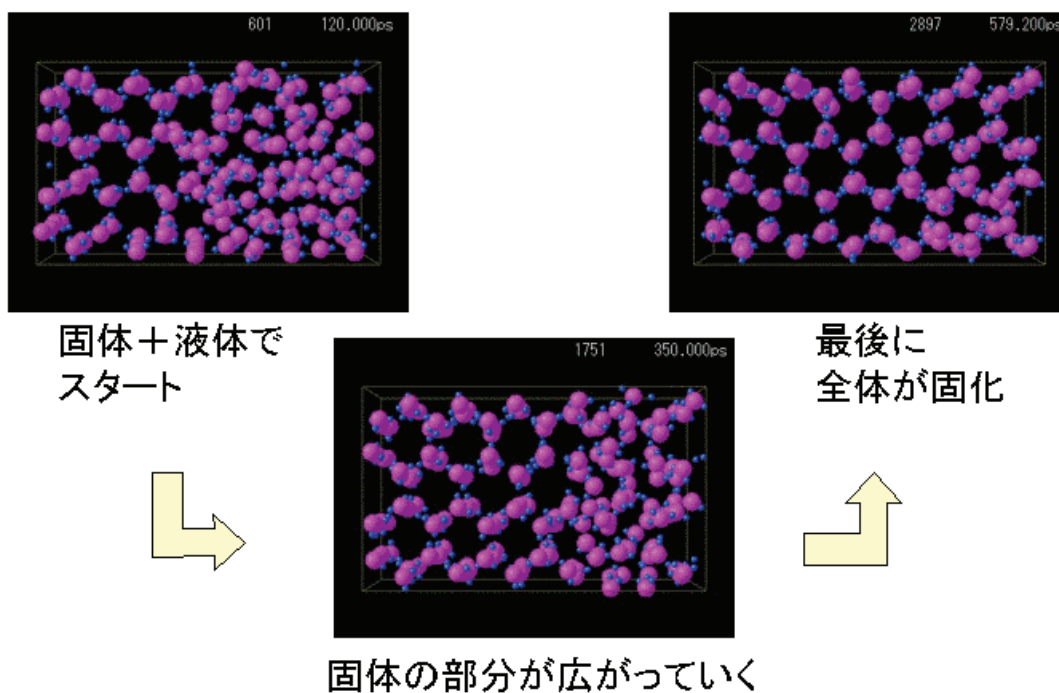


図1. 氷（固体）と水（液体）とが共存した場合のアニメーション. 温度を融点よりも低めに設定すると少しずつ固化が進んで最後には全体が氷となる.

本教材は、以下のサイトで見ることができる.

- <http://www.cc.kochi-u.ac.jp/~akamatsu/H2O/> (高知大サイト)
- <http://chigaku.ed.gifu-u.ac.jp/chigakuhp/html/kyo/101busshitsu/H2O/> (岐阜大ミラーサイト)

3-2. 「NaCl の状態変化」および「NaCl の水への溶解」

「水の状態変化」の場合と同様に、固体 NaCl の融解、液体 NaCl の固化および気化（沸騰）のアニメーション教材を作成した. 水の場合には固体の氷が融解すると密度が増大するが、NaCl では融解とともに密度が減少する. また、NaCl の気体においては、多くの Na^+ と Cl^- がペアを作って動き回っている様子を眺めることができる. 固体 NaCl の水への溶解アニメーションにおいては、NaCl 立方体の表面から溶解しはじめ、最後に完全に溶解してしまう様子が観察できる.

本教材は、以下のサイトで見ることができる.

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

文献

- [1] 固体・液体・気体の様子を原子レベルでアニメーション化した教材は、例えば教育情報ナショナルセンター NICER のページ <http://www.nicer.go.jp/> においてキーワード「状態変化」を入力すると見つけることができる.
- [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] 赤松, 川上, 南場, 澤口, 河村 (2004) 水の状態変化を理解するための Web 教材の改良. 日本コンピュータ化学会 2004 年秋季年会プログラム, 1P03. <http://www.sccj.net/event/nenkai/2004au/program/abstract-pdf/1P03.pdf>
- [4] 3D AVS Player : <http://www.kgt.co.jp/feature/3days/>