

物質中の原子・分子の動きをイメージ把握するための 教材の改良・整備 —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, 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

物質中で原子や分子が動く様子は実際に観察することができないため、この現象をイメージ把握することは学校の生徒達にとって、また大人にとっても難しいことである。我々のグループは、分子動力学計算の結果をもとに、原子や分子の動きをアニメーション表示する教材の開発を行っている [1, 2, 3].

今回は、1) 既に公表済みの Web 教材「水の状態変化」「NaCl の状態変化・水への溶解」を改良するとともに、2) 新たな素材として「食塩水からの氷の結晶化」を整備しつつあるので報告する。

2. 教材の作成方法

分子動力学計算が終了すると、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やアニメーションを表示することができる。静止画像やアニメーションの素材を利用しつつ、Web ページ形式の教材が作成できる。

3. 教材の内容

3-1. 「水の状態変化」および「NaCl の状態変化・水への溶解」

これらの教材は、1) 固体の氷や食塩 NaCl が融解する場面、2) 液体の水や NaCl が気化していく場面、3) 固体と液体が共存した状態から少しずつ融解/固化が進んでいく場面、4) NaCl の結晶が少しずつ水に溶解していく場面 を原子レベルでアニメーション表示するものである。

- 1) においては、固体が融解する際、規則正しく並んだ分子やイオンの配置が壊れていく様子
- 2) においては、気化が起これると体積が著しく増大していく様子
- 3) においては、温度を高めに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が進んでいく様子
- 4) 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などを眺めることができる。

図やページのデザイン変更、説明文章の修正、一部の素材についての作成しなおしといった改良を行なっており、最新のバージョンを以下のサイトで公開している。

水の状態変化

- <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/busshitsu/H2O/> (岐阜大ミラーサイト)

NaCl の状態変化・水への溶解

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

3-2. 「食塩水からの氷の結晶化」

海水は凍るとき、真水だけが凍り、塩分は水に入らずに海水中にとり残されていくといわれている。海水が形成されると同時に食塩濃度の高い海水ができるが、この海水は密度が高いために沈み込みを起こし、それが深層流のルーツになるともいわれている。

食塩水（海水のモデル物質）を少しずつ凍らせた際に、 Na^+ や Cl^- が氷結晶に入りにくいことをアニメーション表示する教材を今回新たに作成した。氷と水を共存させた上で、水の部分に Na^+ と Cl^- を1個ずつ加え、融点よりも低めの温度に保持すると、少しずつ固化が進んでいく。その際、 Na^+ や Cl^- の近傍では固化が起こりにくい傾向をみることができる。

食塩水からの氷の結晶化

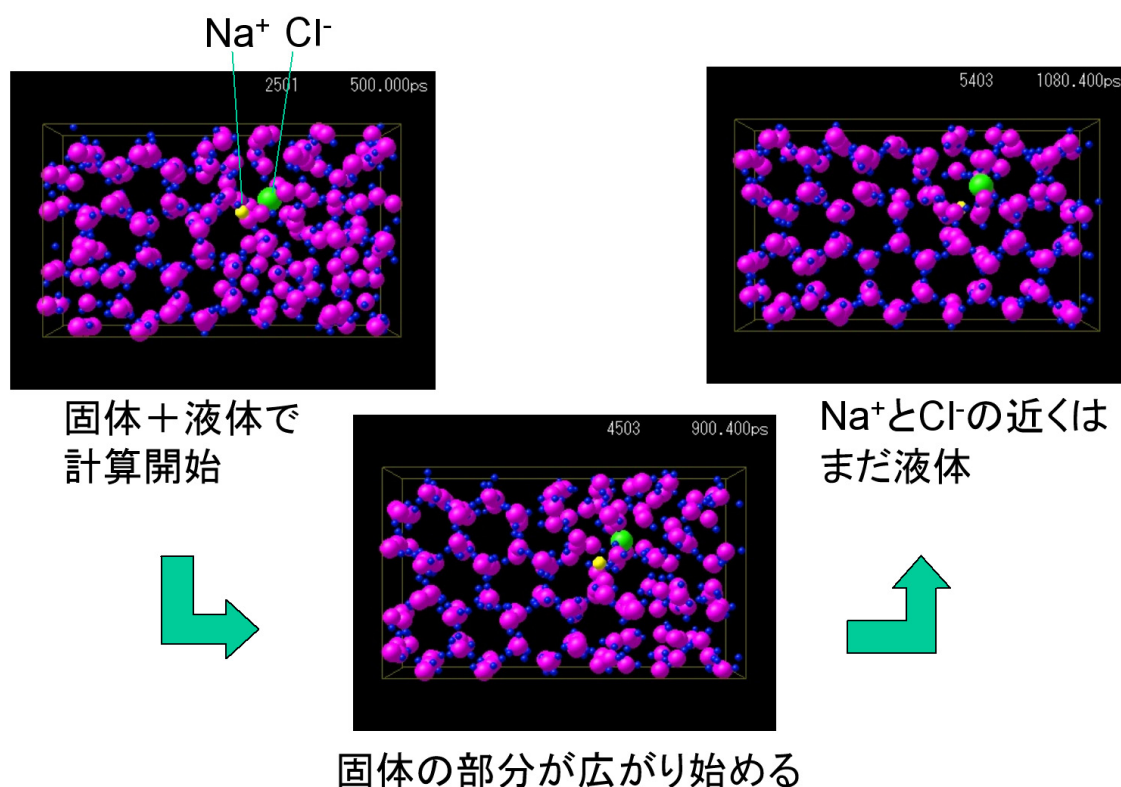


図1. 「食塩水」からの氷の結晶化アニメーション。温度を融点よりも低めに設定すると少しずつ固化が進んでいくが、 Na^+ （黄色い球）や Cl^- （緑色の球）の近傍では固化が起こりにくい。

文献

- [1] 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>
- [2] 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>
- [3] 赤松, 川上, 田, 南場, 澤口, 河村 (2007) 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 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 2007 年春季年会プログラム, 1008.
<http://www.sccj.net/event/nenkai/2007sp/program/abstract-pdf/1008.pdf>