

物質の状態変化を「粒子」のモデルと関連付けて学ぶ理科学習

～中学校理科における水の状態変化の分子動力学シミュレーション教材の効果的な活用法～

Science learning relating particle models and phase changes of matters:
Effective use of the molecular dynamic simulation on phase change of
water in science classes of junior high school

山田 貴之¹

1: 関市立旭ヶ丘中学校

川上紳一²・赤松 直³

2: 岐阜大学教育学部

3: 高知大学教育学部

Takayuki Yamada¹

1: Asahigaoka Junior High School, Sseki, Gifu, 501-3829, Japan

Shin-ichi Kawakami² and Tadashi Akamatsu³

2: Faculty of Education, Gifu University, Gifu, 501-1193, Japan

3: Faculty of Education, Kochi University, Kochi, 780-8520, Japan

要 旨

中学校第1学年「身のまわりの物質」の単元における、物質の状態変化の学習で、「粒子」モデルに関する生徒の素朴概念を調査し、状態変化に伴う質量や体積の変化に関する実験を行い、モデルで考察させたあと、水の状態変化に関する分子動力学シミュレーションをもとに作られたデジタルコンテンツを活用した、水の状態変化の分子動力学シミュレーションは、授業の終末で映示することで、粒子の運動性、粒子のエネルギーに関する見方を育むうえで効果があることを示した。

【キーワード】: 身のまわりの物質, 状態変化, 水, 分子動力学, シミュレーション, 中学校

1. はじめに

平成20年9月に公示された新しい学習指導要領によると、第1分野では、「エネルギー」、「粒子」などの科学の基本的な見方や概念を柱として内容を構成し、科学における基本概念の一層の定着を図るような改善の方向が示された(文部科学省, 2008)。この「粒子」といった科学の基本的な見方や概念は、さらに「粒子の存在」、「粒子の結合」、「粒子の保存性」、「粒子のもつエネルギー」に分けられる。こうした見方は、小学校理科におけるものの重さと形、空気や水の圧縮、もののかさと温度、水の状態変化、水溶液の性質などの学習において、段階を踏んで発展させていく必要がある。しかし、物質が「粒子」で構成されていることを目で確認することはできないため、粒子概念の形成には困難が伴

われる。中学校の理科の内容においては、さらに物質の成り立ち、化学変化、イオンなどの学習において、粒子概念を用いた抽象的なモデルによる事象の理解が求められる。こうした学習の方向性を踏まえ、中学1年生の段階で、粒子概念を駆使して諸現象を説明することの有用性を実感できるような指導のあり方を究明する必要があると考えた。本研究では、まず粒子概念に関する中学1年生のもつ素朴概念の実態を調査し、水の状態変化の学習のあり方を検討し、授業を実践した。その際に、水の状態変化に関する分子動力学シミュレーションをもとに制作されたデジタルコンテンツを活用し、実感を伴った理解へと導く指導のあり方を考察した。

水の状態変化については、小学校第4学年の「水の三態変化」で学習することになっており、

学習者の発達段階を考慮して、現象のマクロ的な理解が目指されている（西野ほか，1995；吉田・古屋，2010）。

2. 「粒子」に関する素朴概念の実態

学習指導要領では、第1学年「身のまわりの物質」の単元の内容として、「(ウ) 状態変化、(ア) 状態変化と熱」という項目で、「物質の状態変化についての観察、実験を行い、状態変化によって物質の体積は変化するが質量は変化しないことを見出すこと」と明記され、内容の取り扱いとして、「粒子のモデルと関連付けて扱うこと、その際、粒子の運動にも触れること」とされている。すなわち、ここでは、「粒子」のモデルと関連付けて扱う際、加熱や冷却によって「粒子の運動」の様子が変化していることにも触れる必要がある。

そこで、生徒たちが、水は温度によって水蒸気や氷に変わることを、水が氷になると体積が増えることについて学習（小学4年生時）していることを踏まえ、水の状態変化を「粒子」のモデルを用いて、どのように表現するのか事前調査をすることにした。

(1) 水の融解現象

蒸発皿の上に氷を置き、徐々に加熱した場合にどのような変化が起るかを調べた。事象提示として、図1のような資料を示し、粒子の集まりである氷がどのように変化するかを記述させた。その結果は図2に示すように、生徒の記述は3つに大別された。82%の生徒は粒子が不規則に散らばるという拡散説をとっていることがわかった。

(2) 水の固化

水が液体から固体の氷になるとき、水分子はどのように変化するかを記述させた。これについても生徒は2種の考えをもっていることがわかった（図3）。86%の生徒は固体になると粒子が一箇所に集まって凝縮すると考えており、残りの生徒は、粒子の結びつきが強くなるが、粒子の間隙には空気があるという考えを示した。

以上の調査から、水の状態変化については、粒子を球体として表現していること、固体、液体、気体という状態変化が結合の強さの程度に

よること、粒子のもつエネルギーに関しては、一部の生徒が気体分子が運動しているという考えを示したが、多くの生徒は水の状態変化において、粒子が運動しているという見方をもっていないことが明らかになった。

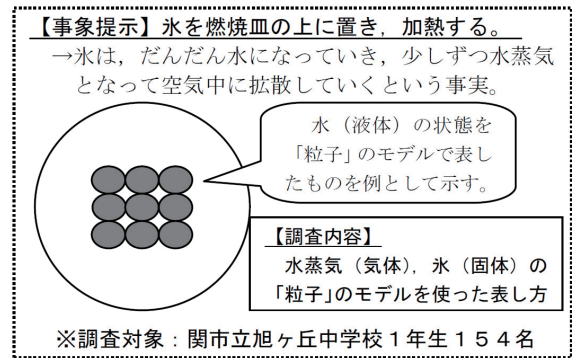


図1. 水の状態変化に関する概念調査のための事象提示。

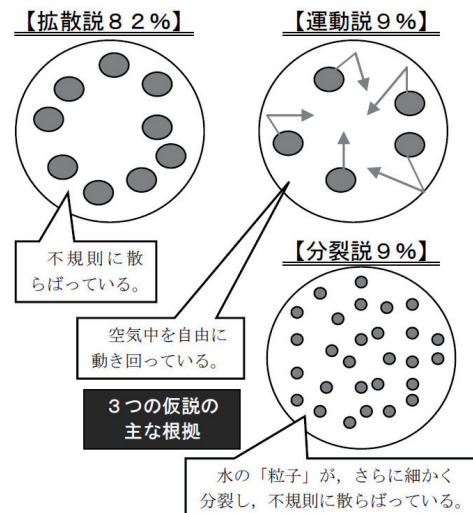


図2. 水の状態変化に対する生徒の素朴概念。

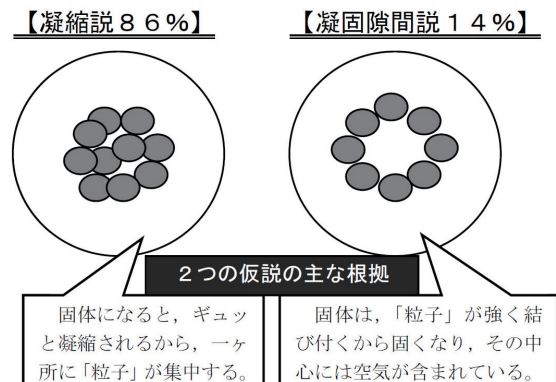


図3. 水が氷になる変化に対する生徒の考え。

3. 指導計画

(1) 状態変化に関する実験観察

前節で示したような生徒の実態を踏まえ、物質の状態変化の前後で体積や質量を調べ、状態変化の前後で、体積は変化するが質量は変化しないことをとらえさせる実験を行った。事象提示は、ジエチルエーテルを入れたビニール袋を加熱し、気体になると体積が大きく変化することを視覚的に示すことにした。また、はんだを加熱すると、固体から液体になることを示した。こうした事象提示から、物質の状態変化にともなう体積や質量がどのように変化するのかについて探究したいという意欲をもたせるようにした。

次に、生徒が行う実験では、ジエチルエーテルとロウを用意し、体積や質量の測定を行わせた。

体積と質量の測定方法は次のようである。①100mlのビーカーにロウを入れ、弱火でとがして液体にする。②液体のロウの液面に印をつけ、ビーカーごと液体のロウの質量を電子てんびんではかる。③ビーカーを冷やしてロウを固体にし、その体積を調べる。④ビーカーの外側の水滴をよく拭き取ってから、ビーカーごと固体のロウの質量を電子てんびんではかる。

(2) 分子動力学シミュレーションによる水の状態変化のデジタルコンテンツ開発と利用

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。

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。本実践で使用した氷の融解・水の蒸発のアニメーションは、赤松ほか（2004, 2005）が開発し、Web ページ上で公開しているものである（図4）。

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。

このデジタルコンテンツでは、96個の H_2O 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ている。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）を使用している。氷の融解あるいは水の蒸発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°Cおよび300°Cとした。計算時の時間の刻み幅は0.4fs/stepとし、100ステップ（=0.04ps）あるいは50ステップ（=0.02ps）毎に全ての粒子座標をテキストファイルに記録している。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作成し、更にそれらをもとにアニメーション表示することができる。



図4. Web教材のトップページ。

4. 授業実践

(1) 事象提示と課題作り

ジエチルエーテルを用いた演示実験では、物質が液体から気体になるとき、ジエチルエーテルを入れたビニールが大きく膨らみ、体積が増えた。また、はんだの融解では、固体状の金属が比較的低温で液体になることに驚きを示し、状態変化にともなう体積や質量の変化について、

実験や観察を行って追究しようという意欲が強まった。


(2) 状態変化に関する実験

図5に実験の様子を示す。ロウの融解実験では、融解の前後において質量が43.2gであり、状態変化によって質量が変化しないことを確かめた。また、融解したロウが冷えていくと再び固体にもどるが、固化にともなって中央部が凹み、かさが減少したことに気づいた。

ジエチルエーテルを入れた容器についても質量が変化しないことを確認した。体積についてはいずれの場合も増加しており、物質の状態変化によって、質量は変化しないが、体積は変化するという事実をつかんだ。

実験する

ロウ (固体⇄液体), ジエチルエーテル (液体⇄気体) を加熱し, 状態変化させた時の体積と質量を測定する。



固体のロウの質量は「43.2g」、液体のロウの質量も「43.2g」だ。体積では、固体のロウの表面は、中央がへこんでいる。これらの結果は、他の班と同じだから正しいと思う。

結果を交流する

ロウは、液体になると体積が増えた。ジエチルエーテルは、気体になると体積が増えた。質量については、両方とも変化がなかった。

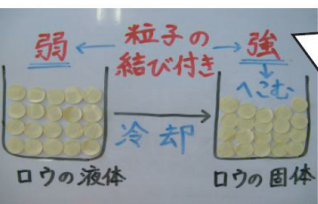
結果を分析して解釈する

ロウが、液体から固体へ状態変化をすると、「粒子」の結び付きが強くなるから、体積が小さくなるのだと思う。

「粒子」のモデルで表す

物質が、状態変化する時、質量が変わらないのは、粒子の数量が増減がないからだ。体積が変わるのは、「粒子」の結び付き方が変わるからだ。

【ロウの状態変化 (液体→固体)】



ロウの表面の中央部がへこむ理由を、「粒子の結合」の変化と関連付けて考察できている。

図5. 授業の流れ.

(3) 結果の交流・考察

生徒たちは、実験を「粒子」モデルと関連づけながら、状態変化の際の「粒子どうしの距離」, 「粒子の結合」の変化に着目して説明を行った。ロウが液体から固体になる変化では、粒子の結合度が強くなり、粒子どうしの距離が短くなることで体積が減少するという考えを示した。しかし、粒子の運動という観点は、生徒の発言からは生まれなかった。

(4) 水の状態変化のデジタルコンテンツの映示

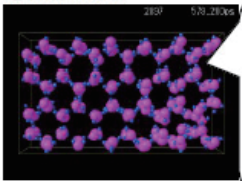
授業の終末段階で、これまでの実験・観察、観察結果の交流内容を確認したあと、webサイト教材「理科教材データベース」の水の状態変化を示す分子動力学シミュレーションの結果を紹介した。これは粒子に働いている実際の力を計算し、粒子の運動を再現したもので、超高速度で運動している水分子をスローモーションで再生したものであるという説明を加えたあと、実際の分子の動きを順番に紹介した(図6)。固体の水では、水分子が六角形状に規則的に配列しながらも、激しく振動していることが示された。液体の水になると、運動がさらに激しくなり、六角形状の配列は読み取れなくなった。さらに気体になると、粒子は空間的に広がって散らばっていることが示された。

デジタルコンテンツを映示したあとで、物質の状態と粒子性についてモデル図を描かせた(図6)。生徒の描いた図には、水分子は水素原子2個と酸素原子1個からなること、水の場合はそれらが規則的に配列して六角形の結晶構造をつくっていること、さらにそれらが激しく運動していることを表現した。水モデルでは、粒子の配列の規則性がくずれ、運動が激しさを増していることを表現した。気体(水蒸気)では、分子はまばらになり、体積が大きく膨らむことと粒子の密度が減ることを表現している。

アニメーションの実際

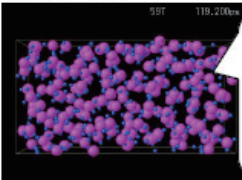
獲得できる情報

①固体（水）



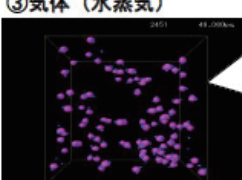
- ・固体は、「粒子」同士が強く結び付き、規則正しく並んでいる。
- ・六角形状の構造をとっており、これが雪の結晶の形にも関係している。
- ・「粒子」は振動している。

②液体（水）



- ・液体は、一見無秩序な構造に見えるが、「粒子」同士は結び付いている。
- ・固体（氷）よりも、いろいろな方向に動き回っている。

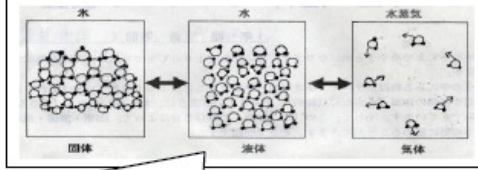
③気体（水蒸気）



- ・水が気化すると、体積が増大していく。
- ・「粒子」同士の結び付きはなく、一つ一つがバラバラになり、高速で飛び回っている。

生徒の振り返り

【水の状態変化を「粒子」のモデルで表す】



実験では導き出せなかった「粒子の運動性」と、水が氷に状態変化をすると体積が増加する理由を、「粒子」のモデル（六角形）で表現できている。

図6. 授業の終末における分子動力学シミュレーションの活用。

(5) 授業後の感想

この授業における生徒の感想の例を示す。

- ・今まで、コップの中の水は、止まっている状態だと思っていた。でも、今日の学習で、水は「粒子」できており、それが動いていること、そして温度が高くなるとその動きが激しくなることが分かった。熱によって「粒子」の動きが変化することが面白かった。固体の水の「粒子」もゆっくり動いていることが不思議だった。
- ・水蒸気の「粒子」の動きが、すごく速くて、どんどん体積が大きくなっていく様子が分かりやすかった。液体から固体に状態変化する時、どうして氷だけ体積が増加するのか疑問だった

けど、「粒子」が六角形に結び付いている画像を見て納得できた。それに、ほぼ正六角形だったので、120度の角度で結び付いていることも分かって、本当に驚いた。あの雪の結晶は、水の「粒子」の結び付き方が影響していることが分かって、私たちの生活の仕組みが、また一つ解決できて嬉しかった。

・今日の学習で、また一つ疑問が生まれた。それは、水の「粒子」は、三態すべてにおいて動いているのだけど、「粒子」を動かしているエネルギーは何なのか？

・「粒子」と「粒子」の間は、真空になっているのか？

こうした感想からは、物質の成り立ちが粒子であることを理解しているだけでなく、粒子の運動の激しさやエネルギーとの関係についても認識を深めていることが読み取れる。

5. 議論

(1) 粒子概念の定着について

本授業の実践のあとに、生徒の粒子概念についての意識をアンケートで調査した。その結果を表1に示す。粒子の存在をイメージできたのかについては98%、状態変化に伴う質量や体積の変化については94%、状態変化と粒子の運動についての認識も97%に達した。さらに、分子動力学シミュレーションは役立ったかについては、全員が役に立ったと答えている。こうした結果は、物質の状態変化の学習における分子動力学シミュレーションの有用性を示すものと考えられる。

表1. 粒子概念の定着に関するアンケート結果。

質問項目	4	3	2	1
①「粒子」の存在をイメージできたか	98	2	0	0
②状態変化で、体積が変化する理由を理解できたか	94	6	0	0
③状態変化で、質量が変化しない理由を理解できたか	84	15	1	0
④温度変化と「粒子の運動」の変化とを関連付けて考察できたか	97	3	0	0
⑤アニメーションは役に立ったか	100	0	0	0

(注) 4：あてはまる, 3：ほぼあてはまる, 2：あまりあてはまらない, 1：あてはまらない。

(2) 水状態変化の分子動力学シミュレーションの授業での活用について

本実践では、物質の状態変化に関する演示実験、生徒らの実験・観察、結果の考察のあとに、分子動力学シミュレーションの結果を映示した。ジエチルエーテルやはんだ、ろうなどの状態変化について現象面にとらえ、モデルによる考察を行ったあとで、実際の水分子の運動をシミュレーションした結果を示したことで、粒子概念の形成と科学的に正しい姿へと深まるような粒子概念に関する理解度の高度化を促すことができた。この教材については、本実践で行ったように、授業の終末における活用が有効であると考えられる(川上, 2011)。

(3) 水状態変化の分子動力学シミュレーションの教材化

分子動力学シミュレーションによる水の状態変化のデジタルコンテンツ化は、2004年に制作したあと、表示方法を工夫するなど改良を加えてきた。さらに、岩塩の融解や水への溶解などについても分子動力学シミュレーションを行っている(赤松ほか, 2007, 2010)。水の状態変化の分子動力学シミュレーションについては、科学技術振興機構の「理科ねっとわーく」のデジタルコンテンツとしても利用されている。また、国立科学博物館の展示にも活用されている。

新しい学習指導要領の内容構成において、「粒子」という見方や概念が強調されるようになり、粒子概念を用いた理科学習の内容充実が求められるようになってきている。本研究によって、水の状態変化の学習の際に、分子動力学シミュレーションによるデジタルコンテンツの活用が一層広がることを期待している。

6. おわりに

本研究では、中学校第1学年「身のまわりの物質」の状態変化の学習において、粒子概念に関する生徒の素朴概念を調査し、粒子の存在、粒子の結合、粒子の保存性、粒子のもつエネルギーという4つの観点を踏まえ、実験・観察を重視した授業を行った。粒子概念によって、質量の不変性、体積の増加を説明することができ、

概念形成に役立てられた。さらに、水の状態変化に関する分子動力学シミュレーションに関するデジタルコンテンツを活用することで、粒子の運動性やエネルギーという見方を育成することができた。

引用文献

- 赤松直・川上紳一・河村雄行(2004)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—, 日本科学教育学会年会論文集, **28**, 613-614.
- 赤松直・川上紳一・南場功充・澤口直哉・河村雄行(2005)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, 日本科学教育学会年会論文集, **29**, 385-386.
- 赤松直・川上紳一・田偉・南場功充・澤口直哉・河村雄行(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—分子動力学シミュレーションを利用して—, 日本科学教育学会年会論文集, **31**, 117-118.
- 赤松直・川上紳一・澤口直哉・河村雄行(2010)物質中の原子・分子の動きをイメージ把握するためのWeb教材の改良・整備—分子動力学シミュレーションを利用して—, 日本科学教育学会年会論文集, **34**, 285-286.
- 川上紳一(2011)デジタルコンテンツの開発とそれを活用した理科授業, 日本教育工学会第27回全国大会講演論文集, 1-4.
- 西野陽子・掘哲夫・松森靖夫(1995)水の状態変化に関する子どもの素朴概念について, 日本理科教育学会全国大会要項, **45**, 220.
- 大洲隆一郎(2009)物質概念の理解を促す理科授業の展開: 物質の状態変化における粒子モデルの構築と適用を中心に, 理科の教育, **58**, 250-252.
- 吉田泉吾・古屋光一(2010)「水の状態変化」における科学概念の獲得状況: 小学校3年生から大学生の認識調査を通して, 北海道教育大学紀要(教育科学編), **61**, 223-231.