

科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）研究成果報告書

平成25年5月20日現在

機関番号：	15501
研究種目：	挑戦的萌芽研究
研究期間：	2011～2012
課題番号：	23650513
研究課題名（和文）	児童・生徒の粒子的・運動論的物質概念の理解を助ける視覚化教材の開発
研究課題名（英文）	Development of visualization teaching materials to help students understanding particulate and kinetic nature of matter.
研究代表者	
	村上 清文 (MURAKAMI KIYOFUMI)
	山口大学・教育学部・教授
	研究者番号： 20157746

研究成果の概要（和文）：定量的分子運動視覚化装置の製作および実体モデルを用いた相互作用のある粒子系のモデル開発を行った。ファンデルワールスの状態方程式モデル、化学反応モデル、および、高分子の二次構造形成モデルを作製した。モデル系を装置に入れ温度等の条件を変化させることによって、気液平衡、化学平衡、および、らせん構造やシート構造の可逆的形成的ミクロな運動論的描像や動的性質を視覚化して示すことができた。

研究成果の概要（英文）：A quantitative molecular-motion visualization apparatus has been constructed and physical models of interacting molecules systems have been explored. van der Waals equation models, chemical reaction models, and secondary structure formation models of polymer have been constructed. By putting the models into the apparatus and altering the conditions of the model system such as temperature, the microscopic and kinetic pictures and the dynamic nature of equilibrium for gas-liquid equilibrium, chemical equilibrium, and reversible formation of helical and sheet structures of polymer have been well represented.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
交付決定額	1,600,000	480,000	2,080,000

研究分野：物理化学、教材開発

科研費の分科・細目： 科学教育・教育工学、科学教育

キーワード：分子運動視覚化教材装置、相互作用のある分子モデル系、ファンデルワールスの状態方程式、化学反応、高分子の二次構造変化

1. 研究開始当初の背景

物質の状態とその変化は、小学校から大学に至る理科教育における主要な主題の一つである。しかし、物質のミクロな状態は目に見えないため、その振る舞いに関する児童生徒の概念的理解は困難であり、しばしば、誤概念を形成していることが、近年の多数の評価研究により明らかにされている。例えば、「気体を熱すると、気体の粒が膨らむ」や「平衡状態では、化学反応は起こっていない」等である。これらの誤概念の解消のためには、

モデルを用いた物質状態の視覚化による、粒子的理解と運動論的理解の統合が必要であると考えられる。

物質の状態とその変化の視覚化教材としては、教師による黒板への手描き絵を初めとして、コンピュータを使ったアニメーションやシミュレーション教材があり、一定の概念的理解の促進に寄与すると考えられている。しかし、これらのアニメーション等の教材はあくまで描かれた絵であり、児童生徒にとって物質としての実感に乏しい。また、これら

の教材で示される温度や圧力などの巨視的パラメータは数値として示されるのみであり、児童生徒にその根拠が示される訳でもない。

以上の観点からすると、物理的実体を持った実体分子モデルを用いた視覚化教材の開発が望まれる。この方向の教材としては、ピンポン球を用いた教材や剛体球を用いたものがある。しかし、これまでは、分子運動の定性的な挙動を表現する教材はいくつかあるものの、物理量間の関係を定量的にも示すことのできる教材は存在しなかった。

これに対して、私は、スーパーボールをモデル分子として突起付き底板の振動によって打ち出すことによりモデル分子に熱かく乱を与えると同時に摩擦の少ない可動隔壁に固定したバネの伸びから圧力を測定可能とした視覚化教材を開発した。この方法によって、ボイルの法則やシャルルの法則をはじめ、完全気体の状態方程式から導かれる物理量間の全ての関係が定量的に測定できることを示した。これらの結果を基礎として、スーパーボールに磁石を、一方の磁極が露出するように、埋め込むことによって相互作用のある様々な粒子系の運動論的挙動が表現可能なモデル系を構築することができるのではないかという着想に至った。

2. 研究の目的

本研究では、(1) 学校現場で利用可能な小型化した定量的分子運動視覚化装置の開発、および、これと平行して、(2) 相互作用のある粒子系に関する応用可能な授業分野の探索と適したモデル分子系の開発を目的とする。後者に関しては、以下のモデルの開発を試みた。

① 粒子間の相互作用により起こる気体状態から液体状態への移り変わりを表わすファンデルワールスの状態方程式を表現するモデル

② 化学結合力により起こる複合体形成や二量体形成などの化学反応モデル

③ 高分子の分子内水素結合によって誘起される二次構造の形成反応モデル

これらの題材は、高等学校の化学や生物、および、大学における教養から専門に至る化学や生物学の分野で教授されるが、本アプローチの有効な応用分野として期待される。

3. 研究の方法

(1) 学校現場で利用可能な小型化した定量的分子運動視覚化装置の開発

旧型の装置は 1000×400×1000mm のサイズで、重量も重く、学校現場での利用に適さない。モデル分子容器部分のサイズを小さくすることなしに、駆動モーターの小型化、駆動クランク機構およびモデル分子系の圧力

測定機構の改良を行うことによって装置の小サイズ化および軽量化を図った。クランク機構としては往復両スライダクランク機構を採用した。圧力測定機構としては、モデル分子容器外側下部にスライドガイドを配し可動壁を固定することにより、低摩擦省スペースの圧力測定を可能とした。分子運動励起用の突起付き可動底板はアクリル版を切削加工し一体ものとして作製した。

(2) 応用可能な授業分野の探索と適したモデル分子系の開発

① のファンデルワールスの状態方程式を表現可能なモデルとして、スーパーボールに内接する正四面体の四つの頂点に、四つの円筒形磁石を、S 極 2 個と N 極 2 個が法線外向きに露出するように、埋め込み、水分子のモデルを作製した。このモデル 20 個程度を定量的分子運動視覚化装置に入れ、温度一定下で、モデル分子系の体積を変化させながら圧力を測定した。この操作を、粒子間相互作用エネルギーより熱運動のエネルギーがまさる高温の気体状態から、粒子間相互作用エネルギーと熱運動エネルギーが同程度の低温の液体状態へと、温度を変えて繰り返すことによって、 P - V カーブの温度依存性を測定した。この結果を相互作用のない完全気体系と比較した。

② の化学反応モデルとしては、次の二つの型の反応モデルを作製した。第一のモデルは、異種の原子または分子間の結合によって起こる複合体の形成反応モデルである。スーパーボールに円筒形磁石を磁石の S 極が露出するように埋め込んだもの (A) と N 極が露出するように埋め込んだもの (B) をそれぞれ十数個作製した。これらは、互いの磁力によって、複合体 C を自発的に形成するので、



の型の化学平衡を表現できる。第二のモデルは、同種の原子または分子同士が結合し二量体を形成するモデルである。三本の細い円筒形磁石を、三本の内の一本が反対向きになるように、束ねてスーパーボールの一カ所に埋め込む。これによって、同一モデル粒子同士の結合が起こり、



の型の化学平衡が表現可能となる。

20 個程度のモデルを分子運動視覚化装置に入れ、一定温度 (一定振動数) に保ち平衡に至らしめた後、高速カメラでモデル系の状態を多数回撮影する。スナップ写真ごとに、存在種の数をカウントし平均値を計算する。これを体積で除すことにより各存在種の濃度をもとめ、平衡定数を算出する。この実験

を温度を変えて行うことによって、平衡定数の温度依存性のデータを得る。

③の高分子の二次構造形成反応モデルとしては、以下のように、仮想ポリアミド高分子モデルおよびポリペプチドモデルを作製した。

仮想ポリアミド高分子モデルは、次の様に作製した窒素原子モデルと酸素モデルを結合した炭素原子モデルを交互に繋ぎあわせて作製した。窒素原子モデルは、スーパーボール球に内接する正四面体の二つの頂点から法線内向きに中心まで1mmの穴をあけ(糸を通して繋ぎあわせるための穴)、残りの二つの頂点の内の一つの頂点の法線方向にS極が表面に露出するように磁石を埋め込んで作製した。酸素モデルを結合した炭素原子モデルは、窒素原子モデルにおける磁石の位置に、スーパーボールにN極が露出するように埋め込んだ酸素原子モデルの磁石と反対側を竹ひごで結合させて作製した。これら二つのモデルをテグスで交互に繋ぎあわせることによって、窒素原子モデルのS極は5個先の炭素原子モデルに結合した酸素原子モデルのN極と結合を形成し得る(水素結合モデル)。この分子内水素結合が次々と形成されることによってらせん構造を形成させることが可能である。

ポリペプチドモデルとしては、スーパーボールを用いて、最も側鎖の小さいポリグリシンモデルを作製した。構成する全てのモデル原子間の相対結合距離を実際のポリペプチドと等しくするようにするとともに、結合角も可能な限り実際のものと一致するように設定した。酸素原子モデルと水素原子モデルには、水素結合を表現できるように、円筒形磁石を、それぞれN極とS極が露出するように埋め込んだ。これによって、 3.0_{10} ヘリックスや α ヘリックスなどの二次構造を形成させることが可能である。

これらのモデルを装置に入れ、徐々に温度を変化させながら、モデル分子鎖の状態の変化をビデオ撮影し、二次構造の形成や崩壊の過程を追跡した。

4. 研究成果

(1) 学校現場で利用可能な小型化した定量的分子運動視覚化装置の開発

研究の方法で述べ、実際に制作した装置は小サイズ化と軽量化の要求は達成したが、運転時に、高振動数領域で装置全体の振動が顕著になるため使用不能になることが分かった。この原因として、アクリル製の可動底板の重量が重すぎることが判明した。この点の改善のため、アクリル可動底板の機能上不要部分のさらなる切削を行った。これによって装置全体の振動の改善傾向はみられたが、高回転数領域で安定な動作状況には至らな

かった。次に、可動底板の更なる軽量化を図るために、材質をアクリル樹脂からアルミ板に変更した。これによって、旧型装置と同程度の振動数(800rpm)まで安定に動作させることが可能となり、教育現場での使用が可能な状態となった。

(2) 応用可能な授業分野の探索と適したモデル分子系の開発

①ファンデルワールスの状態方程式モデル

相互作用のない完全気体系および相互作用のあるファンデルワールス気体系について、四つの温度における p - V カーブの測定結果の一例を図1に示す。それぞれの系の状態方程式は次のように表される。

$$PV = nRT \quad (III)$$

$$(p + n^2 a / V^2) (V - nb) = nRT \quad (IV)$$

図中の破線および実践は、それぞれ、(3)式および(4)式に基づく理論曲線を表す。

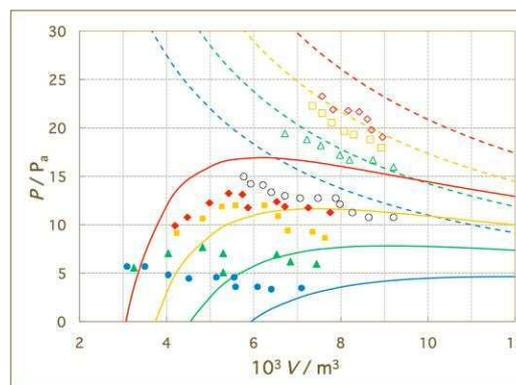


図1. p - V カーブ

これらの実験結果から以下のようなことが分かった。第一に、相互作用のないまたは弱い相互作用の粒子系の p - V カーブは、完全気体のもと同様なカーブを描く(ボイルの法則)。第二に、相互作用を付与されたモデル粒子系の p - V カーブは、ある温度領域において、ファンデルワールス曲線を表現する。特に、マクロな実在系では観測されない不安定領域($(\partial p / \partial V)_T < 0$)を観測することができた。第三に、低温領域では、圧力に体積依存性がないことを特徴とする気-液平衡挙動を観測することができる。

以上の結果より、本モデルは相互作用のある粒子系の気体から液体への状態変化を表現できるモデルであることが分かった。

②化学反応モデル

(I)式で表される複合体形成反応のモデル系を分子運動視覚化装置に入れ、一定温度で振動させると、一分程度で平衡状態になった。

平衡状態においてモデル分子はランダムな熱運動をし、他の粒子と頻りに衝突を繰り返している様子が観察された。また、A分子とB分子の衝突の際に時折複合体Cが形成され、逆に、複合体Cが他の粒子との衝突によってA分子とB分子に解離する様子が観察された。しかも、一定温度下で、反応物と生成物の割合が一定に保たれることが観察された。すなわち、本モデル分子系は化学平衡のミクロな運動論的振る舞いを良く表現できることが分かった。

平衡の温度変化に関しては、温度を上昇させると複合体Cの存在割合が減少し反応物AとBの割合が大きくなり、温度を下げると、反対に、複合体Cの割合が増加して反応物AとBの割合が減少することが観察することができた。すなわち化学平衡のダイナミックな移動を可視化することができた。さらに、平衡定数の温度依存性のデータから、次式に基づき、反応の内部エネルギー変化を求めた。

$$\ln K = -\Delta U/RT + C \quad (V)$$

図2に、強い結合のモデル分子系と弱い結合のモデル分子系についての $\ln K$ vs $1/T$ プロットを示す。

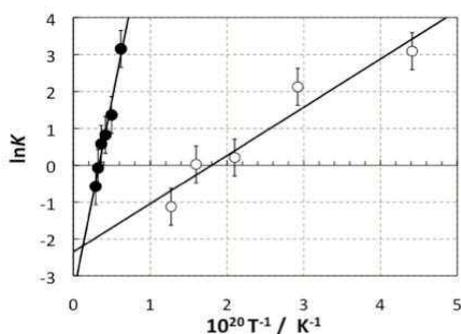


図2. $\ln K$ vs $1/T$ プロット

内部エネルギー変化の値は、それぞれ、 $-8.71 \times 10^{21} \text{JK}^{-1} \text{mol}^{-1}$ および $-1.09 \times 10^{21} \text{JK}^{-1} \text{mol}^{-1}$ と求められた。

他方、モデル粒子間に働く力の直接測定から1モル当たりの結合エネルギーを求めた。それらの値は、上記の内部エネルギーの値とほぼ一致した。このことは、本モデル系に関して、測定方法とその結果に自己矛盾がないことを示すと同時に、(V)式の熱力学公式の実験的証明にもなっていることを示している。

(II)式で表される二量体形成反応のモデル系についても、複合体形成反応モデルの場合と同様に、化学平衡におけるミクロな運動論的振る舞いやダイナミックな平衡の移動の可視化、および、内部エネルギー変化の決定が可能であることを示すことができた。さ

らに、特定の初期濃度状態から出発して平衡に至る過程を追跡することによって、濃度の時間変化に関する反応速度論的解析も可能であり、これから、速度定数や活性化エネルギーに関する情報も得ることができると分かった。

以上、本化学反応モデルの開発によって、児童生徒の化学平衡に関する誤概念の改善に役立つミクロな運動論的振る舞いやダイナミックな平衡の移動の可視化やより高度な定量的取扱いが可能となった。

③高分子の二次構造形成反応モデル

仮想ポリアミド高分子モデルを分子運動視覚化装置に入れ適度な温度状態におくと、らせん構造を形成した。さらに温度を増加させると、らせん構造が壊れ、ランダム構造になった。これら二つの構造の間の変化は温度変化に伴って可逆的に起こることが観察された。また、モデル鎖の中央部分にある一つの窒素原子モデルの両側の結合周りを固定すると、らせん構造ではなくシート構造が形成されることが分かった。

ポリペプチドモデル(ポリグリシンモデル)(図3)を分子運動視覚化装置に入れ適度な温度状態におくと、 3_0_{10} ヘリックス構造(図4)が形成された。さらに温度を増加させると、 3_0_{10} ヘリックス構造が壊れ、ランダムコイル構造になった。これら二つの構造の間の変化は、仮想ポリアミド高分子モデルの場合と同様に、温度変化に伴って可逆的に起こることが観察された。

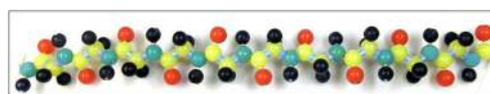


図3. ポリグリシンモデル



図4. 3_0_{10} ヘリックス構造

しかし、 α ヘリックス構造については、部分的な構造が一時的に形成されることはあっても、全体にわたって形成されることはなかった。

ポリペプチドモデルの中央部の二カ所の結合軸周りの回転を固定することによって β ターン構造を導入したところ、ヘリックス構造の代わりに、逆平行 β シート構造の形成が起こることが観察された(図5)。すなわち、一部の結合軸周りの回転の固定がポリペプチド全体の二次構造の形成確率に著しく影響を与えることが分かった。この逆平行 β

シート構造に関しても、温度変化に伴って、可逆的な形成崩壊が起こることが確認された。

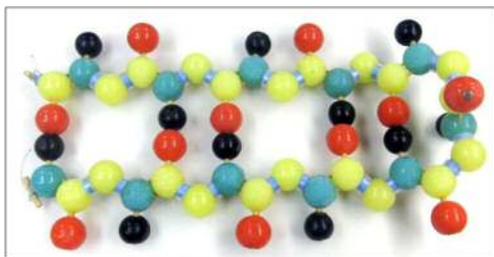


図5. 逆平行 β シート構造

以上の仮想ポリアミド高分子モデルおよびポリペプチドモデルの実験結果から、本モデルが、高等学校から大学における化学や生物の領域で教授される高分子の分子内結合による二次構造の形成に関して、ダイナミックな変化の様子を可視化可能であることが分かった。

本研究のまとめとして、相互作用のある粒子系の平衡におけるミクロな運動論的挙動や外部パラメーターの変化に伴うダイナミックな平衡の移動を視覚的に表現できるとともに、定量的な取扱いにも応用可能な実体モデルを開発することに成功した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[学会発表] (計3件)

- ①. 村上清文、藤村泰平、粒子的・運動論的物質概念の形成を促す視覚化教材－高分子の高次構造の形成・崩壊－、日本理科教育学会第62回全国大会、2012年8月12日、鹿児島大学、鹿児島市。
- ②. 村上清文、小松裕典、物理モデルを用いた化学平衡の粒子的・運動論的概念の視覚化教材、日本化学会第92春季年会、2012年3月27日、慶応義塾大学、横浜市。
- ③. 村上清文、小松裕典、粒子的・運動論的物質概念の形成を促す視覚化教材－ファンデアワールスの状態方程式と化学平衡－、日本理科教育学会第61全国大会、2011年8月20日、島根大学、松江市。

6. 研究組織

(1) 研究代表者

村上 清文 (MURAKAMI KIYOFUMI)
山口大学・教育学部・教授
研究者番号：20157746

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者 ()

研究者番号：

