

WEB 配信デジタル教材の開発

Development of Digital Contents for World Wide Web

プロジェクト代表者：小林秀彦 (工学部応用化学科・教授)

Hidehiko Kobayashi

(Professor of Dept. of Applied Chemistry, Faculty of Engineering)

1 概要

IT (Information Technology) 時代をむかえ、コンピュータを利用した教育の重要性が認識されつつある。文部科学省は、ミレニアム・プロジェクトとして高等学校をはじめとする各教室に IT 教育用のコンピュータ機器を設置することを決定した。しかしながら、そのためのソフトウェアの開発状況は必ずしも充分ではない。科学技術振興事業団 (JST) では、上記の情勢に対応したデジタルコンテンツの製作に関するコンペの公募を実施した。本プロジェクトの研究者らは、このコンペに応募し、外部資金を得ることができた。本研究では、この成果を基礎として、「原子・分子の可視化」を通じて、これまでにない教材の開発をすすめる。

2 方法および結果

20 世紀の科学技術の発展は、近代物理学の発明・発見にその基礎をおいている。近代物理学の発展の過程において、最も特筆しなければならないことは、量子力学の誕生である。高等学校の物理の教科書では、量子力学の重要性が充分認識されていて、下記の項目が標準カリキュラムに組み込まれている。

光電効果の実験	ラザフォードの実験
不確定性原理	波動性と粒子性
ボーアの前期量子論	水素原子の原子スペクトル
ド・ブロイの波動論 ($\lambda = h/p$ の式)	
シュレディンガーによる波動力学 (量子力学) の創始	

数学は物理学の理解にどのように役立つかを古典力学について解説した著書や IT 教材は多い。一方、量子力学は上記のように高校物理のカリキュラムのなかで重要な位置づけにあるにもかかわらず、数式にもとづく説明は必ずしも充分とはいえない。量子力学は化学のあらゆる分野でその理論的支柱として欠くべからざる存在となっている。しかし、高等学校の化学の教科書には、その重要性を唱えるくんだりほとんどない。一時期は軌道概念がカリキュラムに組み込まれたが、現在は消失している。一方、大学の初年級の教科書では、軌道の形やその重要性を定性的に述べているが、量子力学の数式にもとづいていないために正しい理解に達する指針になっていない。

有機導電体, 超伝導体, 有機磁性体などをはじめとする新しい化学物質の開発において, 量子力学が理論的裏付けを与えたり, 先見的な予測を可能にする現状において, これらのカリキュラムに量子化学の視点を加えることは, 若者の夢を広げるためにも不可欠と考えられる. 化学オリンピックにおいても, 量子力学にもとづく軌道概念は標準問題とされており, 国際的にもこの分野の導入が標準化している.

われわれは, 上記の認識にもとづき, 「数学・物理・化学を横断的に結び付け, 論理的思考力を育むための教育コンテンツの創成」に取り組むこととした. 対象は, 高校教師や生徒ばかりでなく, 大学生や社会人である. 背景には, この分野の講義に携わってきた過程において, 下記の4点が重要であるとの認識を深めたことがあげられる.

- (1) 量子力学は難解な学問であるから, 数式を使わずに定性的に教えようという方針で書かれた書物が無数にある. しかし, この種の著述をいかに精読しても, 量子力学についての本当の理解は得られない.
- (2) 量子力学のエッセンスを数式にもとづいて教授するときに必要な数学的知識は, そのほとんどが高等学校のカリキュラムの範囲で充分である. たとえば, 一次元の **Schrödinger** の波動方程式は, 高校数学の教科書の例題として扱われているものがある程標準的なものである. すなわち, エネルギーの量子化の概念を簡単な数学的知識から無理なく導出することができる.
- (3) 量子力学のエッセンスはなるべく低学年で教授すべきである. 若者が量子力学の魅力を早期に理解することこそ科学技術の飛躍的発展の鍵であると考えられるからである.
- (4) 近代物理学の発展の過程で種々の実験にもとづき量子力学が構築された. その過程を実験シミュレーションを通して学び, その実験がどのように解釈されて量子力学の学問体系にまで築きあげられたかをたどることは, 新しい理論が誕生するときの方法論や思考過程を考えるという意味で, 創造性や独創性の涵養に効果的である.

本研究では, 上記の考察にもとづき, 量子力学を魅力ある学問として理解しうる教材を作成し, 評価する方法論について研究し, 以下の結果を得た.

「優れた研究」に関する実験や観察の結果をマルチメディアで提示し, そこからどのようにして大法則・大発見に至るかを, 対話的に学ぶコンテンツを開発した. たとえば, 水素原子の原子スペクトルに関するバルマーの式の式の発見プロセスを以下のように学ぶ.

- (a) 水素原子の発光スペクトルの実験シミュレーションから, スペクトル線が, 656, 486, 434, 410 nm,...に観察されることを学ぶ.
- (b) これらの数値は, 定数による除算により, $9/5, 16/12, 25/21, 36/32, \dots$ に変換できることを導かせる.

この数列の一般則を各自に考えさせ, 分子は n^2 ($n=3,4,5,6,\dots$), 分母は, “分子-4”であることを発見させ, バルマーの式が, $n^2/(n^2-4)$ を含むことを導かせる. この件を含み, 物理・化学の基本原理をシミュレーションにもとづき平易に解説するソフトウェアを次の項目にしたがって開発した.

- (1) 水素の原子スペクトルのシミュレーション結果にもとづくバルマーの式の導出.
- (2) ドルトンの原子概念がどのように構築されたかを実験事実に基づいて対話的に説明する.
- (3) アボガドロの分子論がどのようにして見出されたかを史実にもとづき説明する.
- (4) ミリカンの実験の説明と, 実験結果の解析による電気素量の算出.
- (5) ラザフォードの実験のシミュレーションと, 実験結果の解析による原子核の直径の推算 (図1).

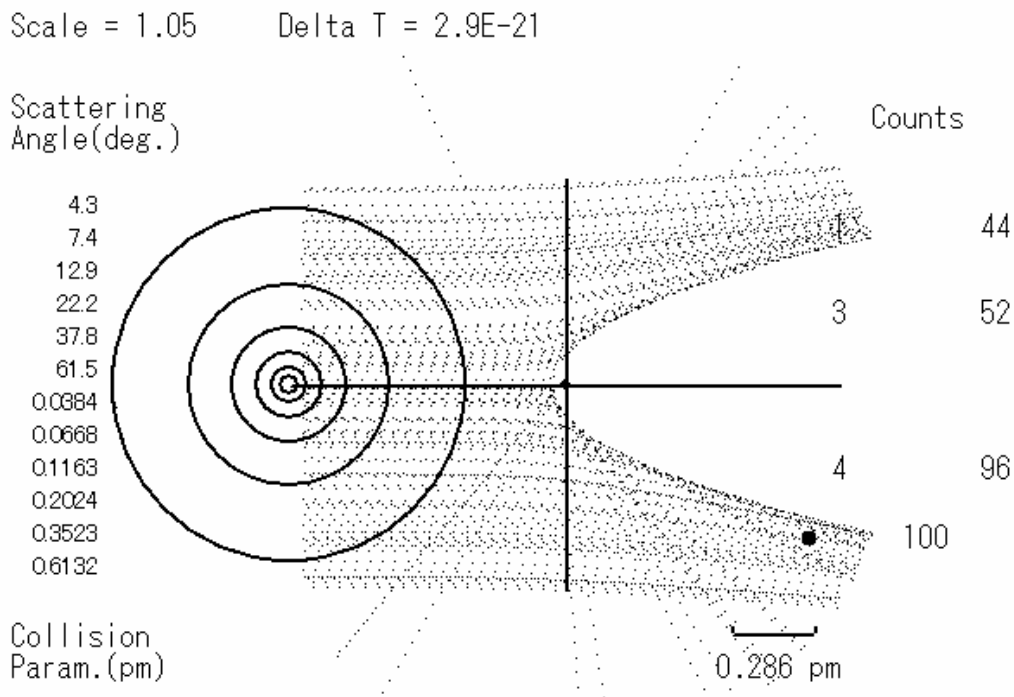


図 1 ラザフォードの実験のシミュレーションの 1 画面

この研究を通して、自然科学における数値の規則性について、プラトン数、メンデレーエフの周期律、ファン・ホフの炭素四面体説、バルマーの式、量子数と周期律などの観点から、種々の歴史的事実の間の関連性をもとに、考察を深めることができた。これらの研究成果の一部は、発表状況 4) に示す著書として印刷公表する一方、ソフトウェアを無料で配布して広い方面からの評価を仰いでいる。

インターネットを通して教材を公開するいわゆる WEB 配信型デジタル教材は、学習者が必要なだけ時間をかけて対話的に学習できる等の特徴を有する。しかし、その提供するものは virtual なものであるため、現実の世界の実体との対比が常に必要である。今回、その virtual 性を補う意味で、原子軌道の電子雲の実体模型を制作した。

原子のなかの電子の状態は原子軌道関数によって表される。この関数は、三次元空間の各座標点において関数値を持つため、これを三次元空間に可視化するには種々の工夫が必要となる。たとえば、関数値の等しい面を三次元空間に描いた図を等値曲面というが、この表現では関数の形はわかるが関数値変化の様子は表現できない。一方、等高線表示や擬三次元表示と呼ばれる表示法では、関数値変化は表現できるが立体的な関数の形は理解しにくい。電子の存在確率をいわゆる「電子雲」で表す方法は、確率（関数値の平方）の大小が雲の濃さで表わされるため、軌道の形と関数値変化の両方の情報を表示しうる可能性がある。しかし、「雲」を三次元空間に描く適切な技法が見出せなかったために、この方法はこれまで二次元平面への投影図にしか利用されなかった。著者らは、ガラスのブロックの中にレーザー彫刻を施す新しい技法（いわゆる 3D マーキング法）を採用することにより電子雲の三次元表示を初めて試みた。

データの作成においては、特定の原子軌道各座標点における関数値の平方の最大値を求め、これをわずかしか超えない範囲の電子の存在確率を棄却法で求めるプログラムを C 言語で作成した。この際、まず、データ棄却条件と棄却率の関係を求めた。条件として用いる値が最大値から離れて大きくなるにつれて棄却率も増大した。適切な棄却条件を設定して電子雲を構成する微小点の座標を求め、中心から一定以上離れた特異点をカットすることにより最終的な彫刻用データを作成した。データ点数は 10000~50000 点を

10000 点毎に点検したところ、50000 点が良いことがわかった。

ガラス内彫刻は、ロフィン丸紅製 3D レーザ彫刻機を用い、コスモテック（株）に依頼して作成した。ガラス内のレーザ彫刻像における 1 ドットは完全な球形ではないことを考慮し、軌道の対称性にもとづいてレーザ照射方向を決定した。ガラスは $60 \times 60 \times 60$ mm の立方体のブロックを用いた。この方法により、これまで三次元実体としては描くことができなかった電子雲の表示が実現できた。この「電子雲」は手の中で自由に回転して観察できるため、その形や雲の密度について、これまでになく観察が可能となった。

従来から、電子雲の三次元出力を二次元ディスプレイに投影して描く技法はあったが、これを三次元回転しても、出力は二次元になってしまうために雲の形についての情報はほとんど得られなかった。また、電子密度についても二次元平面への投影（すなわち、奥行方向に加算した密度）のみの情報しか得られなかったが、ガラス内彫刻では、これを実体として捉えることができた。

原理的には、没入型の三次元ディスプレイに電子雲を表示すれば、よりリアルな表現が可能のように思える。しかし、この方法で 50000 点の情報をリアルタイムで回転させることは、コンピュータの能力上現時点では不可能である。

ガラス内彫刻の欠点は着色が不可能なことである。したがって没入型ディスプレイでは可能な原子軌道そのものの正負の符号に対応する色付けはできない。しかし、2p 軌道のように対称性が良い場合は、下部から着色 LED 光を照射することで軌道関数値そのものの符号に対応した着色も可能である。

これらの研究の成果は、埼玉大学発明委員会の議を経て、意匠登録する方針が認められた。登録後は、プロジェクトの研究成果をあらゆる製品として市販する予定である。

3 発表状況

- 1) Matsuyama, Y., Kobayashi, H., Mitamura, T., "Positive Temperature Coefficient of Magnetization Characteristic for Composite Plastic-Bonded Magnet Composed of $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ and $\text{SrO} \cdot 6\text{Fe}_2\text{O}_3$ ", *J. Ceram. Soc. Jpn.*, 112, pp.65-69 (2004).
- 2) Tamai, S., Yanase, I., Kobayashi, H., "Synthesis of Cubic Cs-deficient Pollucite and its Low Thermal Expansion Property", *J. Ceram. Soc. Jpn.*, 112, pp. 1358-1363 (2004).
- 3) 時田澄男, 原子オービタル解説ビデオ, 国立科学博物館 (2004.11).
- 4) 時田澄男, 染川賢一, パソコンで考える量子化学の基礎, 裳華房 (2005).

4 外部資金

- 1) 奨学寄附金
石福金属工業 KK. 50万円.
埼玉薬品 KK. 30万円.
- 2) 共同研究
山五製陶 KK. 42万円.
- 3) 科学研究費補助金 基盤研究 (C) 平成 16 年度配分額 110 万円.