

令和元年6月25日現在

機関番号：12604

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K00953

研究課題名(和文) 分子レベルを意識した化学用電子実験書の作成とその評価

研究課題名(英文) Development and evaluation of electronic lab book providing molecular image of chemical reaction

研究代表者

生尾 光 (IKUO, Akira)

東京学芸大学・教育学部・准教授

研究者番号：50159589

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,500,000円

研究成果の概要(和文)：SN1とSN2で進行する塩素化について半経験的分子軌道法に基づいてコンピュータグラフィックス(CG)動画を作成した。SN1としてはtert-ブタノールからtert-ブチルクロライドを生成する反応を、SN2としては1-ブタノールから1-クロロブタンを生成する反応を選定した。CG動画を電子実験書に組み込み分子の動的な構造変化を観察できるようにした。大学生への試行の結果、SN1における反応物の攻撃方向についておよび反応に伴うエネルギー変化の理解に効果が認められた。エネルギー概念の獲得や熱力学に関する学習ができる燃料電池を題材とした電子実験書も作成した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

大学教養レベルの反応を題材とした実験学習プログラム用の電子実験書を作成して大学生に試行し、その評価を通して実験書の教育効果を最適化する。使用する実験書には化学反応のCG動画が収録され、反応が進行する様子を分子レベルのイメージで表示する。実験方法は文章の記述に加え操作の具体が分かるように写真やフローチャートが記載され学生がスムーズに実験に入れるよう工夫される。本実験書を用いれば、学生が主体的に実験や観察に取り組むことができるばかりではなくCG動画等の教材を見ることで目に見えない分子レベルの反応のイメージを得ることができるので実験と講義を別々に行う場合に比べて学習効果の向上が期待できる。

研究成果の概要(英文)：Computer graphics (CG) animation was created based on semi-empirical molecular orbital method for chlorination proceeding with SN1 and SN2. The reaction for producing tert-butyl chloride from tert-butanol as SN1 and the reaction for producing 1-chlorobutane from 1-butanol as SN2 were selected. CG animation was incorporated into an electronic lab book so that dynamic structural changes of molecules could be observed. As a result of the university student's trial, it was found that the lab book was effective in understanding the attack direction of the reactant in SN1 and the energy change accompanying the reaction. An electronic lab book was also produced on a fuel cell that can acquire energy concepts and learn about thermodynamics.

研究分野：化学教育

キーワード：化学教育 化学実験 実験教材 電子教科書 可視化

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

化学者は観察した現象を理解するために分子の世界をイメージして解釈し、これを数式や化学式によって記述する(Gilbert, J. K., et al, 2009. in Gilbert, J. K., Treagust, D. (eds.), "Models and Modeling in Science Education Vol. 4 Multiple Representations in Chemical Education", Springer, 333, and Tasker, R., et al, 2010. in Gilbert, J. K., Reiner, M., Nakhleh, M. (Eds.), "Models and Modeling in Science Education Vol. 3 Visualization: Theory and Practice in Science Education", Springer, 103). 現代の物質観を育てるためには、目に見ることのできない原子や分子といった抽象的な概念に指導の力点を置かざるを得ない。初学者が化学を学習するときの困難や誤解を生ずる原因の一つは不十分な分子レベルのモデルに起因する(Kleinman, R. W. et al, 1987. J. Chem. Edu., 64, 766)。分子模型を用いた解説も可能だが分子模型は静的な構造を伝えるだけで反応の動的過程を伝えることはできない上、使用するモデルのタイプごとに与えるイメージが異なる。量子化学計算に基づいたコンピュータ・グラフィックス(CG)を用いれば教授者の目的にあったモデルを容易に示すことができる。この方法により化学反応をCG動画にすれば、反応における分子の組み替えを動的に表現することができるので学習者は擬似的に反応を目で見ることになり、式のみでは分かり難かった反応物の分子構造の変化を目の当たりにすることになる。

一例として二酸化炭素と水から炭酸が生成する反応を式1に示す。



この反応では余剰の水一分子を含む中間体を経由する方がエネルギー的に優位に進行することが Nguyen ら(1984. J. Am. Chem. Soc., 106(3), 599)によって示されているが反応式からは自明でない。我々はこの反応について量子化学計算を行い、遷移状態近傍の構造変化と反応プロフィールを組み合わせたCG動画を作成し、遷移状態において水二分子と二酸化炭素からなる中間体が六員環構造をとることが観察できるCG教材を開発した(生尾ら, 2000. J. Chem. Software, 6, (2) 45)。この動画はデジタル教材提供システム「理科ねっとわーく」(<http://www.rikanet.jst.go.jp/>)に収録されており、2005年7月には全教材中のアクセスランキングが9位となった。このように我々は化学反応のリアルなイメージを提供できるCG教材を作成している(Ikuo, A., et al, 2006. Journal of Science Education in Japan, 30 (4), 210, and Ikuo A., et al, 2009. The Chemical Education Journal (CEJ), Registration #13-2)。分子レベルの動画とマクロなビデオの組み合わせは学習者に実験結果をより良く予想させるとの報告もある(Velazquez-Marcano, A., et al, 2004. J. Sci. Educ. and Tech., 13(3), 315)。本研究の目的は分子の世界と実験観察を融合した実験プログラムを作成することにある。先に、反応に伴う分子構造の変化のCG教材をタブレットで提示した場合、プロジェクターを用いた場合よりも有効であることを報告した(Ikuo, A., et al, 2012. Proc. 7th IEEE Intl. Conf. on Wireless, Mobile, and Ubiquitous Technologies in Educ., 82)。本研究で開発する電子実験書は、防水カバーに入れたタブレットパソコンで使用するため、コンパクトであり実験室で無理なく使用できる。学生がスムーズに実験に入れるテキストとCG教材を統合した実験書として作成するので、それぞれを別枠で行う場合に比べて学習効果の向上が期待できる。

2. 研究の目的

我々は実験観察と分子の世界を統合した実験学習プログラムを作成するために量子化学計算に基づいて可視化したコンピュータ・グラフィックス(CG)による教材を取り入れた電子実験書の作成を行っている。本研究は大学教養レベルの基本的な反応を題材とした実験学習プログラム用の電子実験書を作成して大学生に試行し、その評価を通して実験書の教育効果を最適化するものである。使用する実験書には、化学反応のCG動画が収録され、反応が進行する様子を分子レベルのイメージで表示する。また、実験方法は文章の記述に加え、操作の具体が分かるように写真やフローチャートが記載され、学生がスムーズに実験に入れるよう工夫される。本実験書を用いれば、学生が主体的に実験や観察に取り組むことができるばかりではなく、CG動画等のインタラクティブな教材を見ることで目に見えない分子レベルの反応のイメージを得ることができるので実験と講義を別々に行う場合に比べて学習効果の向上が期待できる。最適化された実験書はweb配信できるようにするので、広範囲な普及が可能となる。

3. 研究の方法

- (1)高校の「化学基礎」,「化学」や大学の一般教養レベルの教科書における記載頻度の高い反応式から量子化学計算が可能な反応式をアニメーションの候補として抽出した。
- (2)化学反応が進行する様子を量子化学計算に基づいたCGアニメーションにより可視化した。
- (3)実験条件を最適化し実験プログラムを作成した。
- (4)実験とCGアニメーションを統合した電子教科書を作成した。
- (5)タブレットパソコンを用いた実験プログラムを大学で試行し,電子教科書の評価と改善を行った。

4. 研究成果

(1)教員養成課程理科選修の学生向けの教材としてSN1とSN2で進行する塩素化のコンピュータグラフィックス(CG)動画を作成した。SN1としてはtert-ブタノールからtert-ブチルクロライドを生成する反応を、SN2としては1-ブタノールから1-クロロブタンを生成する反応を選定した。半経験的分子軌道法に基づいて作成したCG動画は反応中の構造変化を棒球モデルで、エネルギー変化を反応プロファイルにより表示する。開発したCG動画を電子実験書に組み込み、化学式やCGの静止画だけでは伝えられない分子の動的な構造変化を観察できるようにした。教員養成課程理科選修の学生に対する試行の結果、SN1における反応物の攻撃方向についておよび反応に伴うエネルギー変化の理解に効果が認められた。

(2)エネルギー概念の獲得や熱力学に関する学習ができる燃料電池を題材とした実験学習プログラムを開発し、それに用いる電子実験書を作成した。電子実験書にはリアルな図を表示できるので学習者はスムーズに実験学習を行うことができる。現職の中学校理科教員向けの教員研修で使用したところ、燃料電池の反応や燃料電池が発電装置であること、燃料電池の構造の理解が深まり、熱力学的データを用いた計算ができるようになった。受講者からは、「自分のペースでスライドが見られるので良かった」、「見やすく便利であった」や「教材の説明をする教科書的な役割を持たせていたのが良かった」といったコメントが見られ、インタラクティブな電子実験書の効果が認められた。その一方で操作や反応機構などの動画などがあればより効果的だと提案も寄せられ次期課題への示唆となった。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計8件)

Akira IKUO, Yuki TOYAMA, Yusuke YOSHINAGA, and Haruo OGAWA, Development and Practice of Electronic Lab Book for College Chemistry Experiment - SN1 and SN2 Reactions, Chen, W. et al. (Eds.). Proc. 25th Intern. Conf. on Computers in Education. New Zealand: Asia-Pacific Society for Computers in Education, 査読有, 2017, pp.10-12

IKUO Akira, FUJII Yousuke, and OGAWA Haruo, Development of Experimental Program for Acquisition of Mole Concept, Chem. Educ. J. (CEJ), 査読有, 2017, Vol. 17 / Registration No. 17-202, 15 pages

Akira Ikuo, Yuki Toyama, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Development of Electronic Lab-book for College Chemistry-Experiment - SN1 & SN2 Reactions -, Proc. 9th. Intern. Conf. on Computer Supported Education, 査読有, 2017, 1, pp. 556-561

A. Ikuo, Y. Yoshinaga, and H. Ogawa, An Approach to Developing Electronic Laboratory Textbook - Experimental Program of Esterification of Acetic Acid and Ethanol, in Ponnadurai Ramasami, Minu Gupta Bhowon, Sabina Jhaumeer Lallloo, Henri Li Kam Wah Eds., Crystallising Ideas - The Role of Chemistry, Springer, 査読有, 2016, Chapter 19, pp. 289-296, ISBN 978-3-319-31758-8, DOI 10.1007/978-3-319-31759-5

Haruo Ogawa, Hiroshi Nagashima, and Akira Ikuo, Visualization of Chemical Reaction Based on Quantum Calculation for Teaching Material - Addition of Halogens to Cyclopentene, in Ponnadurai Ramasami, Minu Gupta Bhowon, Sabina Jhaumeer Lallloo, Henri Li Kam Wah Eds., Crystallising Ideas - The Role of Chemistry, Springer 査読有, 2016, Chapter 16, pp. 239-252, ISBN 978-3-319-31758-8, DOI 10.1007/978-3-319-31759-5

Akira IKUO, Yosuke KOJIMA, Yusuke YOSHINAGA and Haruo OGAWA, Calculation of Potential Energy Concerning " $H + Cl_2 \rightarrow HCl + Cl$ " and Production of CG movie for Learner to Acquire Its Image with Structures of Reactants and Reaction Profile, J. of Comput. Chem., Jpn., 査読有, 2016, 15(1), pp. 1-6

Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Use of Tablet in College Chemistry Experiment - An approach to developing electronic textbook -, in Stephen White, Herwig Mannaert, Jaime Lloret Mauri Eds., IARIA eLML 2016 The Eighth International Conference on Mobile, Hybrid, and On-line Learning, 査読有, 2016, pp. 26-27, ISBN: 978-1-61208-471-8

Akira Ikuo, Hayato Nieda, Nozomi Nishitani, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, An Approach to Developing Electronic Textbook for Chemical Experiment - Taking Walden's Inversion as an Example -, Proc. 8th. Intern. Conf. on Computer Supported Education, 査読有, 2016, 2, pp. 416-420

[学会発表](計18件)

Ikuo, A., Hayashi, Y., Ogawa, H., DEVELOPMENT OF AN ELECTRONIC LAB-BOOK FOR AN

EXPERIMENTAL LEARNING PROGRAM WITH FUEL CELLS, 25th IUPAC International Conference on Chemistry Education, 2018 年

生尾 光, 林 義哉, 小川 治雄, 固体高分子形燃料電池を用いた実験学習プログラム用電子実験書の開発, 日本科学教育学会年会, 2018 年

Shintaro Hasuo, Akira Ikuo, Haruo Ogawa, Studying preparation conditions of polyvinyl alcohol electrolyte membrane containing sulfosuccinic acid for fuel cell teaching material, 日本化学会第 98 春季年会, 2018 年

林 義哉, 生尾 光, 小川 治雄, 燃料電池を題材とした実験学習プログラム用電子実験書の開発, 日本化学会第 98 春季年会, 2018 年

Yoshiya Hayashi, Shintaro Hasuo, Akira Ikuo, Haruo Ogawa, Evaluation of the Power Generation Characteristics of a Polymer Electrolyte Fuel Cell Using Polyvinyl Alcohol Electrolyte Membrane Containing Heteropolyacid, 日本化学会第 98 春季年会, 2018 年

林 義哉, 生尾 光, 小川 治雄, 自作した高分子電解質膜による燃料電池を用いた実験学習プログラムの開発と実践, 日本化学会第 98 春季年会, 2018 年

Akira Ikuo, Yuki Toyama, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Development and Practice of Electronic Lab Book for College Chemistry Experiment - SN1 and SN2 Reactions, 25th International Conference on Computers in Education, 2017 年

林 義哉, 生尾 光, 小川 治雄, 高出力な固体高分子型燃料電池実験キットの開発, 日本科学教育学会年会, 2017 年

Akira Ikuo, Yuki Toyama, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Development of Electronic Lab-book for College Chemistry-Experiment - SN1 & SN2 Reactions -, 9th. Intern. Conf. on Computer Supported Education, 2017 年

Yoshiya Hayashi, Akira Ikuo, Yuya Masuda, Haruo Ogawa, Making easy and low cost experimental kit of polymer electrolyte fuel cell, 日本化学会第 97 春季年会, 2017 年

Akira Ikuo, Yuki Toyama, Yusuke Yoshinaga, Haruo Ogawa, Development of Electronic Lab-book for College Chemistry-experiment - SN1 & SN2 -, 日本化学会第 97 春季年会, 2017 年

Akira Ikuo, Yoshiya Hayashi, Wataru Osada, and Haruo Ogawa, Making Experimental Kit of Fuel Cell towards Teaching Material, The fifth International Conference of East-Asian Association for Science Education (EASE 2016 Tokyo), 2016 年

Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, An Approach to Developing Electronic Lab-book for Chemistry Experiment, The fifth International Conference of East-Asian Association for Science Education (EASE 2016 Tokyo), 2016 年

生尾 光, 齋田 隼人, 吉永 裕介, 小川 治雄, 化学実験用電子実験書の開発 - Walden 反転 -, 日本科学教育学会年会, 2016 年

Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Use of Tablet in College Chemistry Experiment: Developing Experimental Program providing image of the Walden's inversion, 24th IUPAC International Conference on Chemistry Education (ICCE 2016), 2016 年

生尾 光, 齋田 隼人, 吉永 裕介, 小川 治雄, 化学実験におけるタブレットの使用 電子実験書の開発, 日本理科教育学会第 66 回全国大会, 2016 年

Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Use of Tablet in College Chemistry Experiment, - An approach to developing electronic textbook -, The Eighth International Conference on Mobile, Hybrid, and On-line Learning (IARIA eLmL 2016), 2016 年

Akira Ikuo, Hayato Nieda, Nozomi Nishitani, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, An Approach to Developing Electronic Textbook for Chemical Experiment - Taking Walden's Inversion as an Example -, 8th. Intern. Conf. on Computer Supported Education (CSEDU 2016),

2016 年

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕
出願状況(計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年：
国内外の別：

取得状況(計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名：

ローマ字氏名：

所属研究機関名：

部局名：

職名：

研究者番号(8桁)：

(2) 研究協力者(旧連携研究者)

研究協力者氏名：小川 治雄

ローマ字氏名：OGAWA, Haruo

研究協力者氏名：吉永 裕介

ローマ字氏名：YOSHINAGA, Yusuke

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。