

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成25年6月3日現在

機関番号：12604  
 研究種目：基盤研究（C）  
 研究期間：2010～2012  
 課題番号：22500803  
 研究課題名（和文） 化学反応のCGアニメーションによる可視化と実験プログラムの作成  
 およびその評価  
 研究課題名（英文） Development and evaluation of experimental program utilizing  
 visualization of chemical reaction based on CG animation  
 研究代表者  
 生尾 光（IKUO AKIRA）  
 東京学芸大学・教育学部・助教  
 研究者番号：50159589

研究成果の概要（和文）：大学の化学実験用電子教科書に向けCG動画教材を作成した。教材は、反応中の構造変化を球棒モデルや静電ポテンシャル付き空間充填モデルにより、ポテンシャルエネルギー変化を反応プロファイルにより表示できる。教材には1)ヨウ化水素のような二原子分子の生成、2)Walden反転のモデルとして塩化メチルのヒドロキシル化、3)ベンゼンのニトロ化が含まれる。2,3)の教材は電子教科書作成に向け実験との統合を試みた。

研究成果の概要（英文）：CG teaching material toward electronic textbook of basic chemistry linking chemical experiment for university student was tried to make. The teaching materials could demonstrate the nature of the reaction such as structural change by ball-and-stick model or space filling model with electrostatic potential, and potential energy change by the reaction profile. The materials included 1) formation of di-atomic molecule such as hydrogen iodide, 2) hydroxylation of methyl chloride as a model of Walden's inversion, and 3) Nitration of benzene. The materials of 2) and 3) were tried to combine with chemical experiments to make electronic textbook of basic chemistry.

## 交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	2,000,000	600,000	2,600,000
2011年度	500,000	150,000	650,000
2012年度	600,000	180,000	780,000
年度			
年度			
総計	3,100,000	930,000	4,030,000

研究分野：化学教育(総合領域)

科研費の分科・細目：科学教育

キーワード：化学教育、量子化学計算、CG教材、化学実験、タブレットパソコン

## 1. 研究開始当初の背景

理科離れを解消すべく各種の科学ショーが行われ、人々の関心を集めている。目で見える演示実験は見る者の心に長く留まるが、その背景にある化学反応には考えが及ばない。目で見ることのできる変化に興味を持つことと、目に見えない事象を理解することの間には大きな差異がある。本研究では実体験

としての実験に加えてその裏側にある目に見えない化学反応のイメージを伝える教材を作成し、実験と統合した学習プログラムを開発する。

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。すなわち、分子の性質がその立体構造に根ざし

ていることや分子の構成要素の組み替えが化学反応であるということを理解することが求められる。

多くの場合、これらの内容を具体的なイメージではなく、分子を記号に置き換えた化学反応式を用いた指導がなされているが初学者に反応式だけで分子構造が変化するイメージを伝えるのは難しい。時として、分子模型を用いた説明がなされる場合もある。分子模型は静的な構造を伝えることはできるが、反応がどのような動的過程で起こるのかを伝えることはできない。加えて、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ので複数のタイプのモデルを用意する必要がある。

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)を用いれば使用者の目的にあったモデルを容易に示すことが出来る。この方法により化学反応をCG動画にすれば、化学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化学反応を目で見ることになり、化学反応式のみでは分かり難かった中間体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に示す。この反応では余剰の水一分子を含む中間体を經由する方がエネルギー的に優位に進行することが Nguyen ら (*J. Am. Chem. Soc.*, 106(3), 599(1984)) によって示されているが式からは自明ではない。申請者ら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の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見られる教材を開発した(生尾ら, *J. Chem. Software*, 6, (2) 45(2000))。この教材では、学習者が納得いくまで遷移状態前後の分子構造の変化を見ることができるので、あたかも自分で化学反応をコントロールしているような感覚“バーチャル・ハンズオン”な感覚を与える。このようなCG動画は、反応が“なぜ”起こるのかを考える為の有効な教材と成り得る。この教材は、科学技術・理科教育のための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、「マルチメディアで見る原子分子の世界」の一部として収録されており、2005年7月には全教材中のアクセスランキングが9位となったことから教育現場で必要とされていることがわかる。しかしながら、このような教材は他に無いため使用者からは他の反応を含めた充実を望む声が上がっている。申請者は先に報告した酢酸とエタノールのエステル化反応

における遷移状態付近の中間体の構造と反応プロフィールのCG (Akira IKUO, et al., *Journal of Science Education in Japan*, 30(4), 210(2006))をスマートフォンに表示させられることを確認した。

本研究で開発する教材は、携帯型情報端末に対応するので、演習の授業ばかりでなく実験室でも使用できるので実験と統合した学習プログラムとして作成することができ、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

本研究は化学反応を題材とする実験プログラムを作成し、その学習効果を検証するものである。使用する教材は携帯端末を利用した化学反応のCG動画であり、それは化学反応が進行する様子を量子化学計算に基づいて可視化したものである。教材で取り上げる反応について実験と統合した実験学習プログラムを作成する。プログラムは試行して評価と改善を行う。

## 3. 研究の方法

- (1)高校や大学の化学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を教材化の候補として抽出した。
- (2)半経験的分子軌道法計算に基づき化学反応が進行する様子をCG動画(QT)にした。
- (3)作成したCG動画は、携帯端末に対応する形式にし、CG教材とした。
- (4)実験プログラムを作成し、CG教材と統合した学習プログラムの作成を試みた。
- (5)大学でプログラムを試行し、教材の評価と改善を行った。

## 4. 研究成果

大学の化学実験用電子教科書に向けCG動画教材を作成した。教材は、反応中の構造変化を球棒モデルや静電ポテンシャル付き空間充填モデルにより、ポテンシャルエネルギー変化を反応プロフィールにより表示できる。教材には、1)ヨウ化水素のような二原子分子の生成、2)Walden反転のモデルとして塩化メチルのヒドロキシル化、3)ベンゼンのニトロ化が含まれる。2,3)の教材は電子教科書作成に向け実験との統合を試みた。スモールスケールでの実験条件を検討し、学生実験向けのテキストを作成した。3)については作成したCG教材と実験テキストを統合した電子テキストを作成し、少人数のクラスにおいて模擬授業を行った。作成した電子テキストは学習者がスムーズに実験に取り組めるように実験方法の具体などの情報に加え、反応物から生成物に至る構造やエネルギー変化を表示することができる。防水ケースに入れたタブレットパソコン中の電子テキストを用いることで

学習者は自らスムーズに実験を行う事ができた。

#### 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)

[雑誌論文] (計7件)

- ① Akira Ikuo & Haruo Ogawa, International Journal of Advanced Computer Science, 査読有、2013、3(5)
- ② Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Proceedings of the 5th International Conference on Computer Supported Education, 査読有、2013、688-691
- ③ Haruo OGAWA, Saburo INOUE & Akira IKUO, Work-In-Progress Poster Proceedings of the 20th International Conference on Computers in Education ICCE 2012, 査読有、2012、72-74
- ④ Akira IKUO, Nozomi NISHITANI, Yusuke YOSHINAGA & Haruo OGAWA, Proceedings of the 20th International Conference on Computers in Education ICCE 2012, 査読有、2012、418-422
- ⑤ Akira Ikuo, Hiroshi Nagashima, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Proceedings of the Seventh IEEE International Conference on Wireless, Mobile and Ubiquitous Technology in Education, 査読有、2012、82-86
- ⑥ Akira IKUO, Hiroshi NAGASHIMA, Yusuke YOSHINAGA & Haruo OGAWA, Proceedings of the 19th International Conference on Computers in Education. The Work-in Progress Poster, 査読有、2011、31-33
- ⑦ Ogawa Haruo, Ikuo Akira, & Yoshinaga Yusuke, ICASE 2010 INOVATION IN SCIENCE AND TECHNOLOGY EDUCATION: RESEARCH, POLICY, PRACTICE, 査読有、2010、251-253

[学会発表] (計17件)

- ① Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, An Approach to the Electronic Textbook of Basic Chemistry Linking Chemical Experiments CG Teaching Materials Based on Quantum Chemical Calculation, 5th International Conference on Computer Supported Education, 2013年05月06日~2013年05月08日、RWTH アーヘン大学 (アーヘン・ドイツ)
- ② Haruo OGAWA, Saburo INOUE & Akira IKUO, Visualization of Chemical Reactions

for Teaching Material Based on Quantum Calculation - Thermochemical Handling about NaCl -, 20th International Conference on Computers in Education ICCE 2012、2012年11月26日~2012年11月30日、ナンヤン工業大学 (シンガポール)

- ③ Akira IKUO, Nozomi NISHITANI, Yusuke YOSHINAGA & Haruo OGAWA, Development of Teaching Material in Tablet PC based on Computer Graphics by Quantum Chemistry Calculation - Walden's Inversion -, 20th International Conference on Computers in Education ICCE 2012、2012年11月26日~2012年11月30日、ナンヤン工業大学 (シンガポール)
- ⑧ Akira Ikuo, Haruo Ogawa, Teaching Material Based on Computer Graphics by Quantum Chemistry Calculation, 22nd International Conference on Chemistry Education, 2012年07月15日~2012年07月20日、ローマ大学 (ローマ・イタリア)
- ⑨ Akira Ikuo, Yousuke Fujii, and Haruo Ogawa, Development of Experimental Program for Acquisition of Mole Concept, 22nd International Conference on Chemistry Education, 2012年07月15日~2012年07月20日、ローマ大学 (ローマ・イタリア)
- ⑩ Haruo Ogawa, Hiroshi Nagashima, Akira Ikuo, Visualization of Chemical Reaction Based on Quantum Calculation - Addition of Halogens to Cyclopentene -, 22nd International Conference on Chemistry Education, 2012年07月15日~2012年07月20日、ローマ大学 (ローマ・イタリア)
- ⑪ Akira Ikuo, Yuka Ono, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Development of Teaching Material Based on Computer Graphics by Quantum Chemistry Calculation - Nitration of Benzene -, 22nd International Conference on Chemistry Education, 2012年07月15日~2012年07月20日、ローマ大学 (ローマ・イタリア)
- ⑫ Akira Ikuo, Hiroshi Nagashima, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Seventh IEEE International Conference on Wireless, Mobile and Ubiquitous Technology in Education, 2012年3月27日~2012年3月30日、サンポート高松(香川県 高松市)
- ⑬ Akira IKUO, Hiroshi NAGASHIMA, Yusuke YOSHINAGA & Haruo OGAWA, 19th International Conference on Computers in Education, 2011年11月28日~2011年12月2日、ル・メリディアン(チェン

- マイ, タイ王国)
- ⑭ Akira Ikuo, Nozomi Nishitani, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, The 4th NICE Symposium (Network of Inter-Asian Chemistry Educators), 2011年7月26日～2011年7月28日、ソウル大学(ソウル, 大韓民国)
  - ⑮ IKUO, Akira; NAGASHIMA, Hiroshi; YOSHINAGA, Yusuke; OGAWA, Haruo, 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2010), 2010年12月15日～2010年12月20日、ヒルトン・ハワイアン・ビレッジ ( Honolulu, ハワイ, アメリカ)
  - ⑯ OGAWA Haruo, IKUO Akira, NAGASHIMA Hiroshi, and YOSHINAGA Yusuke, 21st. International Conference on Chemical Education (ICCE 2010), 2010年8月8日～2010年8月13日、Taipei 国際会議センター (台北, 台湾)
  - ⑰ Ogawa Haruo, Ikuo Akira, & Yoshinaga Yusuke, 3RD WORLD CONFERENCE ON SCIENCE AND TECHNOLOGY EDUCATION, 2010年6月28日～2010年7月2日、タルツ大学(タルツ, エストニア)

## 6. 研究組織

### (1)研究代表者

生尾 光 (IKUO AKIRA)  
東京学芸大学・教育学部・助教  
研究者番号：50159589

### (2)連携研究者

小川 治雄 (OGAWA HARUO)  
東京学芸大学・教育学部・教授  
研究者番号：10134769

吉永 裕介 (YOSHINAGA YUSUKE)  
東京学芸大学・教育学部・准教授  
研究者番号：60322848