

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 30 年 6 月 27 日現在

機関番号：17101

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2016～2017

課題番号：16K12764

研究課題名(和文)基礎理論と実験をソフトウェアによって繋ぐ化学教育プログラムの開発

研究課題名(英文)Development of a chemical education program which includes software for linking basic theory to experiments

研究代表者

小杉 健太郎 (KOSUGI, Kentaroh)

福岡教育大学・教育学部・准教授

研究者番号：70380376

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円

研究成果の概要(和文)：物理学の基礎的な理論・概念に基づいて化学現象を理解する力を育成するための化学教育プログラムの開発を目的として本研究を行った。作成された試作版の化学教育プログラムは、化学反応速度と化学平衡に関する実験教材と学習ソフトウェアからなる。学習ソフトウェアは学習者がいくつかの理論的概念を学ぶのを補助するとともに、基本的な物理学の概念と化学現象の関係の概要を学習者に俯瞰させられるものである。簡単な分子構造表示ソフトウェアの作成も行い、将来的に学習ソフトウェアに三次元モデルを取り入れる際に有用な知見を得ることができた。

研究成果の概要(英文)：The aim of this study is to develop a chemical education program to foster ability of students to understand chemical phenomena based on physical theory. The created prototype education program consists of learning software and experimental materials on chemical kinetics and chemical equilibrium. The learning software can help students understand several theoretical concepts, and give them a brief overview of relation between basic physical concepts and chemical phenomena observed in the experiments. A simple application for showing molecular models was also created, and the knowledge obtained in the process will be useful in incorporating three-dimensional models into learning software in the future.

研究分野：物理化学

キーワード：科学教育 化学教育 化学教育教材 実験教材 インタラクティブな学習ソフトウェア 化学平衡

### 1. 研究開始当初の背景

近年、科学教育研究の分野では、コロラド大学ボルダー校で開発された PhET のようなインタラクティブな科学教育用ソフトウェアの開発やそれを用いる教材開発研究が行われている。学習者はこのようなソフトウェア上で条件を変更しながら、シミュレーションを繰り返し行うことができ、その結果をアニメーション等によって確認することができる。これを適切に用いることで、専門的な理論を学んでいない学習者にも、現象のイメージを大まかに捉えさせることが可能となる。

本研究代表者は、以前から測定実験用の装置制御やデータ解析を行うソフトウェアを作成し、これらを用いて教育学部学生向けの学生実験を行ってきた。測定データのフィッティング等によって、観測された結果が数式で表される規則性をもつことを認識させることはある程度達成できた一方で、現象を基礎的な理論に基づいて考察・理解させる手立てが不十分であると感じていた。そこで、観察・測定される化学現象を物理学の理論・概念と結びつけて理解させるための教育プログラムの開発を計画した。

### 2. 研究の目的

化学反応速度や化学平衡の教材として適した化学現象と大学1・2年次までに学習する基礎的な理論・概念を、測定実験とインタラクティブな学習ソフトウェアによって繋げる化学教育プログラムの開発を目指して本研究を行った。この化学教育プログラムは、化学実験教材(化学実験方法、測定装置、及びその制御とデータ解析機能を持つソフトウェアからなる)と学習用ソフトウェアから構成されるものである。

### 3. 研究の方法

#### (1) 化学反応速度に関する実験方法の改良

化学反応速度に関する教材として広く知られているフェノールフタレインの退色反応について、本研究代表者もこれを題材とする実験教材の開発に近年取り組んだ。この成果に基づいて本研究を進める計画であったが、試料の保持方法に改善を要することが明らかになったため、最初にこの点を含む実験方法の改善を行った。その後、実験教材において学習者が得ることになる反応速度定数と活性化エネルギーの基準値を、今回改善された実験方法によって求めた。293、298、303、308、313 K の各温度に保った反応溶液について、波長 550 nm における吸光度の時間変化を紫外可視分光光度計(日本分光 V-660)を用いて測定し、これを解析することで各温度における反応速度定数と活性化エネルギーを求めた。

#### (2) 分子構造表示ソフトウェアの開発

分子構造を三次元グラフィックスで表示するソフトウェアの開発は、平成 28 年度に Visual C++ 2010 Express を使用してその大部分を行い、平成 29 年度に一部の機能の追加を Visual C++ 2017 を用いて行った。使用したライブラリは OpenGL と glu、及び Boost C++ である。分子構造等の元になるデータは量子化学計算ソフトウェア Gaussian 09W を用いて得たものである。

#### (3) 化学平衡に関する実験教材の開発

塩化コバルトをプロパノール水溶液に溶かした溶液を温度変化させると、コバルト錯体の配位子が置き換わって、溶液の色が変化する。化学平衡の教材としてこれまでも用いられてきた、この反応を題材として、本研究でも実験教材を開発した。実験教材では、試料溶液の色の変化を小型分光器(オーシャン オプティックス USB-2000+)によって測定する透過スペクトルの変化として得る。塩化コバルト溶液の色の変化を視認しながらスペクトルの測定が行えるように、分光実験用クライオスタット(オックスフォードインスツルメンツ OptistatDN2)を使用して試料温度の制御を行うことにした。長時間の測定実験を行うために、クライオスタットの真空槽の真空引きにはターボ分子ポンプ排気ユニット(アルバック YTP-150M-DRY)を使用した。小型分光器によるスペクトル測定・解析用のソフトウェア、及びクライオスタットの温度の設定・表示・記録を行うソフトウェアは、ナショナルインスツルメンツ社のソフトウェア開発環境 LabVIEW2015 を用いて作成した。この際、メーカー等から公開されているライブラリを活用した。

#### (4) 学習ソフトウェアの開発

実験教材と併用して学習効果を向上させることを狙うインタラクティブな学習ソフトウェアの開発も、LabVIEW2015 を用いて行った。

### 4. 研究成果

#### (1) 化学反応速度に関する実験方法の改良

セプタムとスクリュウキャップ付きの分光光度計用セル(光路長 10 mm)を用いることで、数時間にわたる測定においても、試料中の溶媒の蒸発を抑えることが可能になった。閉じられたセル内で温度制御されている水酸化ナトリウム水溶液に、フェノールフタレイン溶液をシリンジによって注入して反応を開始する。この実験方法によって、退色反応の進行とともに減少する試料の吸光度を各温度で測定した。この吸光度の時間変化曲線を、反応速度論に基づいて求めた理論式(逆反応も考慮したもの)でフィッティングして、正反応と逆反応の反応速度定数を得た。293~313 K の温度範囲の 5 点における反応速度定数をアレニウスプロットし、これをフィ

フィッティングすることで求めた正反応の活性化エネルギーは 55.3 kJ/mol (逆反応のものは 109.4 kJ/mol)であった。この値を用いて、実験教材の中で得られる活性化エネルギーの評価を行えると考えている。

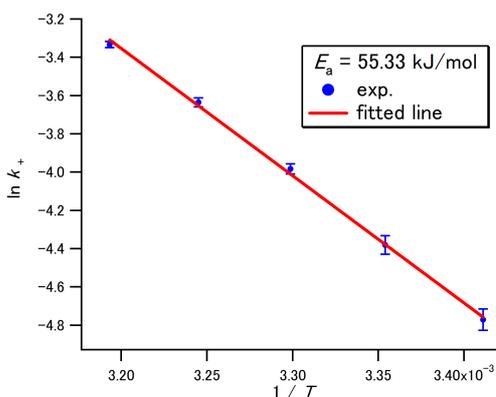


図 1 . 正反応のアレニウスプロット

## (2) 分子構造表示ソフトウェアの開発

本研究で開発した分子構造表示ソフトウェアの機能の概要は次の通りである。

- ・ Gaussian の出力ファイルから、最適化構造を読み込み、3D 表示できる。
- ・ マウス操作によって 3D モデルの回転と、拡大縮小が行える。
- ・ 必要な情報 (分子軌道の基底関数による展開式の係数等) が記述されている Gaussian 出力ファイルを読み込んで、Mulliken 電荷や凝縮 Fukui 関数が算出できる。
- ・ Mulliken 電荷や凝縮 Fukui 関数の値によって原子を色付けして表示ができる。

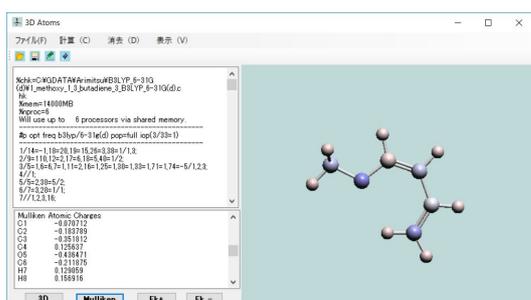


図 2 . 分子構造表示ソフトウェアの画面

## (3) 化学平衡に関する実験教材の開発

塩化コバルト溶液の色の変化が温度範囲 250 ~ 300 K の中心近くで観測される条件を検討した結果、プロパノールと水をモル比 8 対 2 で混合した溶液を塩化コバルト溶液の溶媒とすることにした。クライオスタットの温度制御は専用のコントローラー単体で行うことが可能であるが、実験時にパソコン上で温度の時間変化グラフの確認とファイル保存が行える方が望ましいと考えた。そこで、このコントローラーと USB 接続したパソコン上からクライオスタットの温度設定と温度データの集録・表示を行えるソフトウェアを

作成した。

小型分光器用のソフトウェアもメーカー純正のものでなく、教材に合わせた機能をもつものを自作することにした。以前作成していたシンプルなものに、平成 28 年度に強度補正機能等を加えて基本的なスペクトル測定機能を整え、さらに平成 29 年度後半に化学平衡の実験教材用に改良した。

作成した小型分光器用の測定ソフトウェアによる測定では、まず分光器に光を入れずにダーク測定を行い、その後、ブランク測定 (試料を光路から外して測定) と試料の測定を行う。これらから光源の強度で補正されたスペクトルを算出する。この測定を溶媒のみの試料と塩化コバルト溶液試料のそれぞれについて行い、後者を前者で割ることで透過率と吸光度のスペクトルを得る。このデータ処理も測定ソフトウェアで行えるようにした。さらに、学習者が化学平衡の偏りをデータに基づいて捉えやすくなるように、測定した吸収スペクトルをフィッティングし、青色の高温成分とピンク色の低温成分に分解して表示する機能もソフトウェアに加えた。

本研究で作成した測定装置・ソフトウェアで得られる吸収スペクトルの正確さを確認するため、同じ試料を日本分光社製の紫外可視分光光度計 V-660 でも測定し、両者のスペクトルを比較した。この結果、両者は良く一致することが確認できた (ただし、小型分光器の波長を補正する必要があった)。

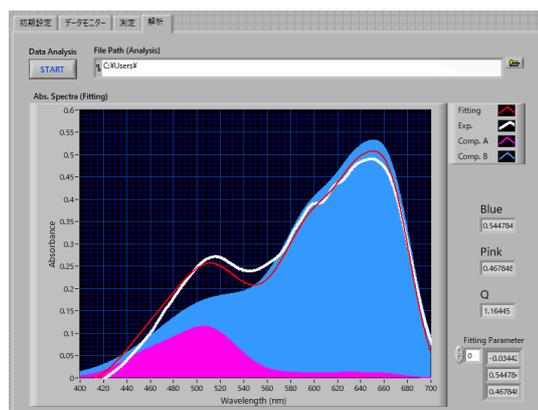


図 3 . 測定ソフトウェアでのフィッティング

## (4) 学習ソフトウェアの開発

高校化学あるいは大学 1・2 年生までに学ぶ知識をもつ学習者に、化学反応速度や化学平衡の温度依存性をより良く理解させるために有用と考えられる以下の学習ソフトウェアを作成した。

### 学習ソフトウェア 1 《少数粒子モデル系のエネルギー分布に関するソフトウェア》

本ソフトウェアは、等間隔のエネルギー準位をもつ仮想的な粒子系にエネルギーを与えた場合に可能なエネルギー分布を求め、各分布ごとに微視的状态数を計算して表示することができるものである (粒子数とエネルギー量子数の和は 30 程度まで)。さらに、粒

子間でエネルギー量子の授受が起こる単純なモデルについて、エネルギー分布の変遷を見るシミュレーションも行えるようにした。これによって、エネルギー分布の実現確率が微視的状態数と関係することを学習できる。

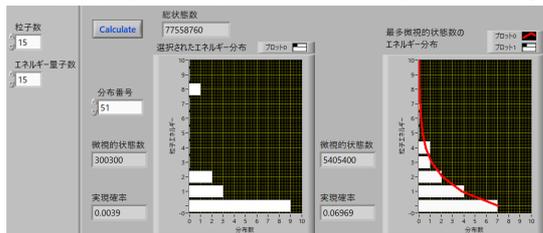


図4．学習ソフトウェア1の画面

学習ソフトウェア2《三次元の箱の中の粒子のエネルギー準位等に関する学習ソフトウェア》

本ソフトウェアでは、三次元の箱の中の粒子のエネルギー準位を計算してグラフに表示するとともに、一定のエネルギー幅の中の状態数も示す。学習者は、電子やヘリウム原子等の粒子の種類、及び粒子が運動する領域のサイズを変更して、それらがエネルギー準位に及ぼす影響を学ぶことができる。また、エネルギーの上昇に従って状態数が増大することも本ソフトウェアで学習できる。

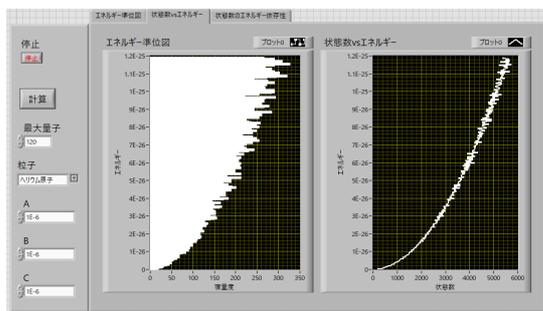


図5．学習ソフトウェア2の画面

学習ソフトウェア3《気体のエネルギー分布の温度依存性に関するソフトウェア》

本ソフトウェアは、学習ソフトウェア1と2による学習内容に基づいて、高等学校化学の教科書にも記されている気体のエネルギー分布を学ぶためのものである。学習者は画面上で温度を設定でき、温度の違いによってエネルギー分布が変化の様子をグラフで確認することができる。

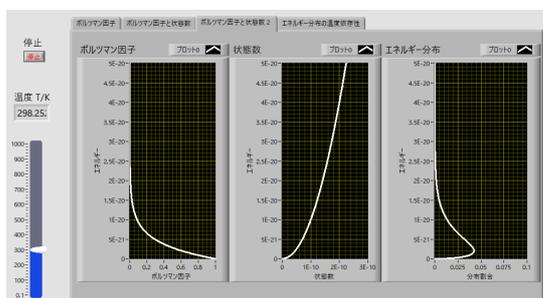


図6．学習ソフトウェア3の画面

学習ソフトウェア4《化学平衡・反応速度に関する学習ソフトウェア》

本学習ソフトウェアでは、気体分子の異性化反応を題材としたモデル系について、反応物と生成物のエネルギー分布の温度依存性等を見ることが出来る。学習者は画面上で温度設定を変え、これが反応速度や化学平衡の移動にどのように影響するかを学ぶことができる。

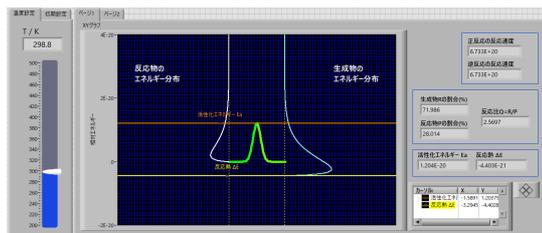


図7．学習ソフトウェア4の画面

学習ソフトウェア5《ランベルト-ベールの法則に関する学習ソフトウェア》

実験教材の中で吸収スペクトルを測定するため、ランベルト-ベールの法則についての学習ソフトウェアも作成した。学習者は試料溶液の濃度や光路長を画面上で変更し、これらによって透過率がどのように変化するかを学ぶことができる。また、吸光度と透過率の関係もグラフで確認することができる。

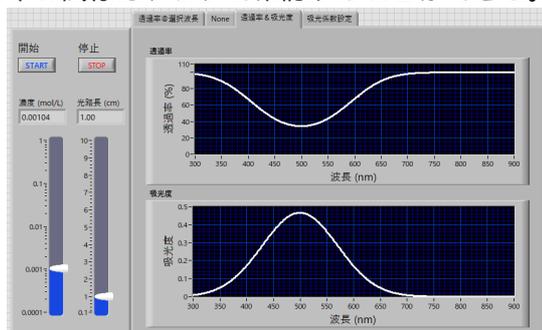


図8．学習ソフトウェア5の画面

(5)まとめ

前述の研究内容(1)(3)(4)によって化学教育プログラムの試作版が構成される。(1)と(3)の内容に従って、化学教育プログラムにおける実験・解析を実行する。(4)に記した学習ソフトウェアは理論的内容に関する講義の中で学習者に使用させる。本研究期間内に試行版を実施することはできなかった。今後、本化学教育プログラムに基づいた講座等を行い、その結果をフィードバックして改良を行うとともに、学習効果に関する研究に発展させることを検討したい。

現段階では(2)の分子構造表示ソフトウェア自体を学習プログラムに取り込むことはできていないが、この過程で得たノウハウを活用して、将来的に(分子構造に限らず)三次元モデルを表示する学習ソフトウェアの開発にも取り組みたい。

## 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 6件)

・小杉健太郎、橋川くる美、井手貴政、草場裕介、ソフトウェアによって理論と実験をリンクさせた化学教材の開発、日本理科教育学会第68回全国大会、2018年8月5日、岩手大学、盛岡市。

・梶原大輔、中村遼太郎、小杉健太郎、科学教育用の基本的な測定装置とソフトウェアの開発、日本理科教育学会第67回全国大会、2017年8月6日、福岡教育大学、宗像市。

・長友克樹、大塚祐輔、井手貴政、小杉健太郎、フェノールフタレイン退色反応の実験方法の改善、日本理科教育学会第67回全国大会、2017年8月6日、福岡教育大学、宗像市。

・井手貴政、長友克樹、草場裕介、小杉健太郎、フェノールフタレイン退色反応のデータ解析と化学教育、日本理科教育学会第67回全国大会、2017年8月6日、福岡教育大学、宗像市。

・東優貴、渡辺奈歩、小杉健太郎、教育的活用を想定した3D分子モデル表示ソフトウェアの開発、日本理科教育学会第67回全国大会、2017年8月6日、福岡教育大学、宗像市。

・小杉健太郎、教育的活用を想定した3D分子モデル表示ソフトウェアの開発、日本理科教育学会第66回全国大会、2016年8月7日、信州大学、長野市。

## 6. 研究組織

### (1)研究代表者

小杉 健太郎 (KOSUGI Kentaroh)  
福岡教育大学・教育学部・准教授  
研究者番号：70380376