

## 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 12 日現在

機関番号：17501  
 研究種目：基盤研究（C）  
 研究期間：2010～2012  
 課題番号：22500817  
 研究課題名（和文） ライブ・ネットワーク型および独習型一体の統合理科学習支援システムの開発  
 研究課題名（英文） Construction of Integrated live and e-learning Development System in Science Education.  
 研究代表者  
 中島 俊男（NAKASHIMA TOSHIO）  
 大分大学・教育福祉科学部・教授  
 研究者番号：70201879

## 研究成果の概要（和文）：

本基盤研究で購入した分子の力場パラメータの作成システムソフトウェア、「Direct Force Field 7.0」を使用しこれまでデータベースで公開されていなかった基礎的な無機物質の分子力場の作成と最適構造を決定するのに初めて成功した。このソフトウェアから得られた力場パラメータとトポロジーを使ってこれまで使用している MD シミュレーションに応用し水中におけるシクロ 3 リン酸ナトリウムのシステムで 2 ナノ秒の間に、全エネルギーが一定であることを確認し、構造の動的性質を決定した。一方教育工学的な側面においてライブ・ネットワーク型において外部のウェブブラウザ上からアクセスし、遠隔制御ライブカメラによって動力車を制御するシステム、また水の比熱測定、水の中和熱測定等、及び独習 e-learning 型では多くの物理、化学のシミュレーションソフトを開発し、本研究の目標である理科統合学習支援システムを完成した。

## 研究成果の概要（英文）：

We have developed Integrated live and e-learning Development System in Science Education. Using DFF Software, the huge amount of data concerning topological, chemical bond and energy information of inorganic compounds have been determined for the first time in the world, and using some of these data, we have observed dynamic properties of substances in aqueous solution by molecular dynamic(MD) simulation. On the other hand, in the field in educational technology we have constructed in the two aspects: first, the live system by remote access have been constructed in experiments in specific heat measurement, neutralization reaction, prototype micro camera-equipped small four wheel rescue bulldozer: second, many simulation software as e-learning teaching material in physics and chemistry have been made in this work.

## 交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
22 年度	2,400,000	720,000	3,120,000
23 年度	600,000	180,000	780,000
24 年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	3,500,000	1,050,000	4,550,000

研究分野：複合領域

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：科学教育、分子動力学(MD)シミュレーション、遠隔制御、化学物理、e-learning、力場作成、教育工学

## 1. 研究開始当初の背景

本研究は、高校、中学の理科教員の資質改

善と再教育（生涯教育）の一助となることを念頭に企画したものである。

## 2. 研究の目的

高校、中学の理科教員は、理科ばなれ、受験競争、日常業務、管理業務の多忙のために、科学教育が本来養うべき好奇心の喚起、原理の探究、もの作りの楽しさなどを生徒に伝える方策を模索しているのが現状である。教員を養成し輩出してきた大学は、理科教員の資質の改善と生涯教育に責任を果す必要がある。近年、科学技術の進歩が急速であり、特に理科実験では最新の情報に更新していく必要がある。申請した最新の機器を使用して、高校、中学教員が最新の研究手法のいくつかを体験することが期待された。

## 3. 研究の方法

スタンドアローン型の科学シミュレーション教材の開発をさらに推し進める。さらに同時にインターネット上で、遠隔操作で制御して実際に装置を動かし能動的、積極的に科学的、工学的分野の実験をし、映像を見ながらデータを得てクライアント上で、データを解析し、楽しみながら実験の理解を深めることが期待されるシステムを構築する。

## 4. 研究成果

Windowsでの分子の力場パラメータの作成に不可欠なステムソフトウェア、「Direct Force Field 7.0」を使用し基礎的な無機物質シクロ6リン酸ナトリウムの分子力場の作成と最適構造を決定するのに初めて成功した（表1））。その他、類似の環状無機リン酸等の分子力場、トポロジー等のデータも初めて決定した。

表1に一例として、 $P_6O_{12}^{6-}$ の力場の正確なデータを示す。

このソフトウェアから得られた力場パラメータとトポロジーを使ってこれまで使用して

表1 MD計算に必要な $P_6O_{12}^{6-}$ イオンの結合距離、結合エネルギー、結合情報等の完全データセット

```

* CHARMM FORCE FIELD GENERATED BY DIRECT-FORCE-FIELD.
2012-06-21 13:48:35
*
BONDS
!E(bond) = Kb (b - b0)**2
!Kb: kcal/mole/A**2
!b0: A
!
!atom types      Kb      b0
!
O1      P6      485.0059  1.4758
O2      P6      485.2907  1.4758
P6      P6      131.8961  2.0670

ANGLES
!E(angle) = Ka (T - T0)**2
!E(Urey-Bradley) = Ku (S - S0)**2
!Ka: kcal/mole/rad**2
!T0: degrees
!Ku: kcal/mole/A**2
!S0: A
!
!atom types      Ktheta  Theta0  Kub      S0
!
O1      P6      O2      172.3158  126.4621
O1      P6      P6      37.5127   118.7737
O2      P6      P6      37.9409   118.7295
P6      P6      P6      46.2979   101.9156

DIHEDRAL
!E(dihedral) = Kd(1 + cos(n(phi) - phi0))
!
!      Kd: kcal/mole
!      n: multiplicity
!      phi0: degrees
!
!atom types      Kd      n      phi0
!
O1      P6      P6      O1      -3.5851   3   0.0000
O1      P6      P6      O2      6.5081   3   0.0000
O1      P6      P6      P6      3.3511   3   0.0000
O2      P6      P6      O2      -3.3144   3   0.0000
O2      P6      P6      P6      3.0637   3   0.0000
P6      P6      P6      P6      -0.3841   3   0.0000

IMPROPER
!E(improper) = Ki (psi - psi0)**2
!Ki: kcal/mole/rad**2
!
!      n: multiplicity
!psi0: degrees
!
!atom types      Ki      n      psi0
!

NONBONDED
!E(Lennard-Jones) = Eps(i,j) [(Rmin(i,j)/r(i,j))**12 - 2(Rmin(i,j)/r(i,j))**6]
!
!      epsilon: kcal/mole, Eps(i,j) = sqrt(eps_i * eps_j)
!      Rmin/2: A, Rmin(i,j) = Rmin/2, i + Rmin/2, j
!
!atom type  ignored  epsilon  Rmin/2  ignored  eps_1-4  Rmin/2, 1-4
!
O1      0.0000  -0.2100  1.6600
O2      0.0000  -0.2100  1.6600
P6      0.0000  -0.0720  2.1045

NEFIX
!E(Lennard-Jones) = Emin(Rmin/r**12 - 2Rmin/r**6)
!
!      Emin: kcal/mole
!      Rmin: A
!
!atom type Emin      Rmin      Emin(1-4)  Rmin(1-4)
!
END

```

シクロ6リン酸カリウムのシステムで2ナノ秒の間行い、全エネルギーが一定であることを確認し、構造の動的性質の決定に

成功した。MDシミュレーションシステム全体の構成はLinux OS上の分子動力学シミュレーション (namd) で分子集合体の分子座標や速度を $10^{-15}$  秒ごとに計算、保存し、分子の動きをウェブブラウザ上でアニメーション風に観察、体験することが可能になり、科学研究費による本研究で、今回の力場パラメータとトポロジーを作成するDFF7.0の導入によって無機物質全般のほぼ完全にすべての分子システムで、シミュレーションが可能となった。

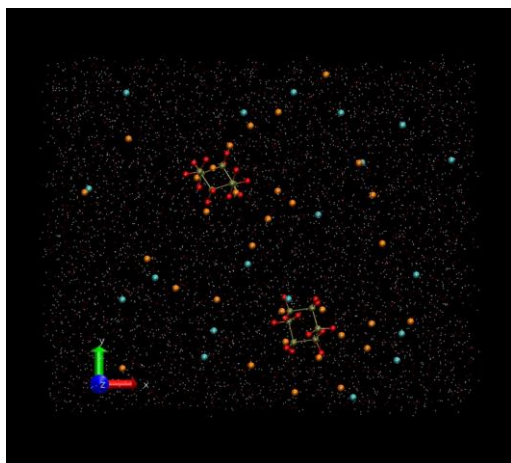


図1 2 ns (20000step目)における 0.4M KCl水溶液中の2量体、環状リンオキソ酸のMDシミュレーションのスナップショット(水分子は非表示)

これらの成果は口頭発表、また論文投稿準備中である。

一方教育工学的な活動として平成22-24年度は外部のウェブブラウザ上からアクセスし、ライブカメラサーバーによって災害時等において遠距離から災害現場にある動力車を遠隔制御するシステム、また水の比熱測定、水の中和熱測定等、ライブ・ネットワーク型理科学習支援システムを完成した(図2参照)。

図2に平成23年度に完成した遠隔制御ライブカメラによって動力車を制御するシステム全体を示す。大災害時に遠隔から複数人が可能な限り利用できるモデルであるが、現

有の27MHzの周波数を数GHzの大規模な無線システム基地にすれば、さらに広域での有効な作業モデルが期待されよう。

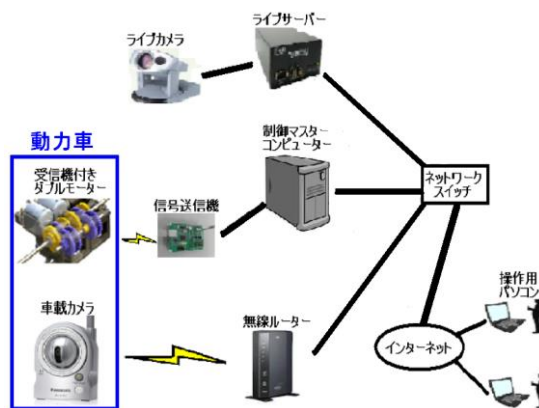


図2 遠隔制御ライブカメラによって動力車を制御するシステム全体構成

さらにe-learningにおいて、Microsoft Visual Studio 2010の新しい開発環境下で「化学シミュレーションのソフトの開発」「力学シミュレーションの開発」、「音波シミュレーションの開発」等を完成させ、[ライブ・ネットワーク型および独習型一体の統合理科学習支援システムの開発]の最終年度としてほぼ予定の全テーマを完成させた(図3参照)。



図3 Windows7上のe-learning 独習型「力学シミュレーションの開発」ソフトの実行画面の一例

以上の教育工学分野の成果は、平成25年に日本教育工学会、日本コンピュータ化学会に口頭発表予定である。

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 3件)

1) Luminescent europium(III) complexes of tripodal heptadentate N7 ligands containing three imidazole groups S.Takahashi, T.Nakashima, et al, Polyhedron (Elsevier) 30, 2026-2031 (2011). 査読有

2) Homochiral column structure of rac- and  $\lambda$ -[MIII(tn)<sub>3</sub>]P<sub>3</sub>O<sub>9</sub> (M = Co, Cr; tn = 1,3-diaminopropane; P<sub>3</sub>O<sub>9</sub> = cyclotriphosphate(3-)) produced by multiple hydrogen bonds.

Yukinari Sunatsuki, Sho Miyahara, a Takayoshi Suzuki, a Masaaki Kojima, Toshio Nakashima, Naohide Matsumoto and Frode Galsbold New J. Chem., (2010), 34, pp. 2777-2784 Royal Society of Chemistry.

査読有

3) A Theoretical Interpretation for the Difference Between  $\square$  Stability Constants of the Same Metal Complex Determined by Different Analytical Methods

T. Nakashima, H.Waki and M. Toh.

Journal of Solution Chemistry, Springer ( New York ) Volume 39 Number 1 Page 51 – 56 (2010). 査読有

[学会発表] (計 0件)

なし

[図書] (計 0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0件)

○取得状況 (計 0件)

[その他]

ホームページ等 なし

6. 研究組織

(1)研究代表者

中島 俊男 (NAKASHIMA TOSHIO )

大分大学・教育福祉科学部・教授

研究者番号：70201879

(2)研究分担者

軸丸 勇士 (ZIKUMARU YUSHI)

大分大学 名誉教授

研究者番号：40040729

(3)連携研究者 なし