

平成 28 年 6 月 13 日現在

機関番号：12604

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2015

課題番号：25350188

研究課題名(和文) 分子レベルを意識した化学実験用電子教科書作成へのアプローチ

研究課題名(英文) Approach to the development of electronic textbook for chemistry experiments conscious of the molecular level

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) 3,800,000円

研究成果の概要(和文)：大学の化学実験向けに反応メカニズムがCGで表示できる電子教科書の開発を行っている。半経験的分子軌道法に基づき作成したCGには劇的な構造変化を伴うWalden反転のモデルとして塩化メチルの水酸化や1-ブromobutan、2-ブタノール生成のCGおよびスモールスケールで行う1-ブromobutan生成の実験が含まれる。CGは反応中の構造変化を空間充填や棒球モデルで、エネルギー変化を反応プロファイルで表示することができる。電子教科書はCGによる反応機構の表示に加え、実験方法のフローチャートや装置図も表示し、学生がスムーズに実験を行うことができる。電子教科書は実験観察と分子の世界の架け橋となることが期待される。

研究成果の概要(英文)：We are developing an electronic textbook for a basic chemistry-experiment for university students in which reaction mechanisms are shown by CG. The CG of chemical reaction was made based on empirical molecular orbital calculations. The CG included following reactions as a model of Walden's inversion where drastic change in structure takes place; hydroxylation of methyl chloride, formation of 1-butyl bromide and 2-butyl alcohol. The CG can simultaneously demonstrate the nature of the reaction such as structural change by the space-filling and ball-and-stick models in addition to providing an image of energy change by the reaction profile. The electronic textbook also displays pictures of apparatus and flow-charts of small-scale experiments. Therefore students are able to conduct experiments smoothly and safely while studying dynamical reaction mechanism shown by the CG. The electronic textbook in tablet could be used to integrate the observable level experiment and the molecular world.

研究分野：化学教育

キーワード：反応機構 可視化 CG 化学実験 電子教科書 実験書

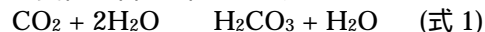
## 1. 研究開始当初の背景

本研究では化学反応の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分子の世界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し、実験用の電子教科書として作成する。

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。

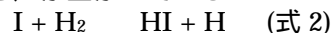
多くの場合、これらの内容を具体的なイメージではなく、分子を記号に置き換えた化学反応式を用いた指導がなされているが、初学者に反応式だけで分子構造が変化するイメージを伝えるのは難しい。時として、分子模型を用いた説明がなされる場合もある。分子模型は静的な構造を伝えることはできるが、反応がどのような動的過程で起こるのかを伝えることはできない。加えて、使用するモデルのタイプごとに与えるイメージが異なるので複数のタイプのモデルを用意する必要がある。

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、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1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。研究代表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アニメーションを作成し、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アニメーション教材は、反応が“なぜ”起こるのかを考える為の有効な道具と成り得る。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。



本研究の準備として、式2に示した素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., Proc. 7th IEEE Intl. Conf. on Wireless, Mobile, and Ubiquitous Technologies in Education, 2012) をタブレットパソコンにインストールしその有効性を調べた。本研究で開発する電子教科書は、タブレットパソコン等の携帯端末に対応するため、実験室で使用できる。学生がスムーズに実験に入れるテキストとCGアニメーションを統合した学習プログラム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。

電子教科書を使用した教育実践の例として、大阪府立大は、看護学部生向けに、教科書などの内容を入れたタブレット端末を配り、学習を支援する取り組みを始めた(朝日新聞2012年10月17日)との報道がある。しかしながら、化学反応を題材とした実験教材の例は研究代表者が知る限りまだない。

## 2. 研究の目的

本研究ではタブレットパソコン中の電子教科書を使用し、化学反応のCGアニメーションを学習し、併せて実体験としての実験を行うことによる学習効果を検証するものである。電子教科書には通常の実験方法の記述に加えて操作の具体が分かるように写真やフローチャートなどが記載され、学生が実験にスムーズに入れるように工夫される。また、分子レベルのイメージを提供するために反応のCG動画も収録される。CG動画は、化学反応が起こる様子を可視化することをねらいとしている。電子教科書はインタラクティブ性を持たせるので操作により、分子が反応する相手をどのように認識し、どのようにして生成物に至るのか、反応により分子構造がどう変化するかなど、物質変化の疑問に対する答えを見いだしていく発想支援型の教材となる。作製する電子教科書は他に例を見ない独自のものであり、それをタブレットパソコンに入れてユビキタス型教材として作成し試行するので、化学教育における可視化教材やユビキタス型教材の先導的な研究となる。この電子教科書は個別学習に対応するので、進度別学習や遠隔地教育にも利用できる。電子教科書は、web上で配信することが可能となるので、広範囲な利用が期待される。

## 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

大学の化学実験用電子教科書向けに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。作成したiBook形式の電子教科書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、前述のCG動画教材により反応物から生成物に至る構造やエネルギー変化、静電ポテンシャルの変化を表示することができる。実験には防水ケースに入れたタブレットパソコン中の電子教科書を用いることとした。

高校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から、劇的な構造変化を伴う反応の例としてWalden反転を題材とする実験学習プログラムを作成した。プログラムにはメタノール生成、1-プロモブタン生成、そして2-ブタノール生成の反応経路を示すCG動画やスモールスケールで行う1-プロモブタン生成の実験が含まれる。このプログラム用の電子教科書を大学生に試行した。学生は教科書によりスムーズに実験を行うことができた。また、教科書中のCG動画や分子モデルはWalden反転における構造変化のイメージを伝えるのに有効であった。

より複雑な反応として、酢酸とエタノールのエステル化についても実験学習プログラムを作成した。応用実験として反応速度の温度依存性から見かけの活性化エネルギーを求める内容も加えることができた。反応プロファイルと分子構造の変化およびその際の静電ポテンシャルの変化をCG動画として電子教科書を作成し大学生に試行することができた。

#### 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16件)

Haruo Ogawa, Hiroshi Nagashima, and Akira Ikuo, Proc. International Conference on Pure and Applied Chemistry, Crystallising Ideas: The Role of Chemistry, 査読有, Chapter 16,

印刷中.

Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Proc. International Conference on Pure and Applied Chemistry, Crystallising Ideas: The Role of Chemistry, 査読有, Chapter 19, 印刷中.

Akira Ikuo, Yosuke Kojima, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, J. of Computer Chemistry, Japan, 査読有, 2016, 15(1), 1-6, DOI: 10.2477/jccj.2015-0005

Haruo Ogawa, Hiroki Fujii, and Akira Ikuo, J. Sci. Educ., 査読有, 2016, 17(1), 28-32, URL: www.accefyn.org.co/rec.

Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Proc. 23rd. Intern. Conf. on Computers in Education, 査読有, 2015, 16-18.

Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Proc. 7th. Intern. Conf. on Computer Supported Education, 査読有, 2015, 2, 553-557.

Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Chem. Educ. J. (CEJ), 査読有, 2014, 15(2), Registration No. 15-112.

Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Chem. Educ. J. (CEJ), 査読有, 2014, 15(2), Registration No. 15-109.

Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Proc. 22nd Intern. Conf. on Computers in Education, 査読有, 2014, 489-493.

Akira Ikuo and Haruo Ogawa, African J. Chem. Educ., Special Issue (Part II), 査読有, 2014, 4(3), pp. 22-33.

Ikuo, A., Yoshinaga, Y., and Ogawa, H., Proc. 6th. Intern. Conf. on Computer Supported Educ., 査読有, 2014, 226-231.

小川治雄, 生尾光, 藤井浩樹, 日本教科教育学会誌, 査読有, 2014, 37(1), 75-83.

生尾光, 前田明希, 小川治雄, 東京学芸大学紀要 自然科学系, 2014, 66, 39-44.

Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Proc. 2013 IEEE 63rd. Annual Conf.: Intern. Council for Educational Media (ICEM), 査読有, 2013, DOI: 10.1109/CICEM.2013.6820170.

Haruo Ogawa, Akira Ikuo, and Marijana Zgela, Proc. 2013 IEEE 63rd. Annual Conf.: Intern. Council for Educational Media (ICEM), 査読有, 2013, DOI: 10.1109/CICEM.2013.6820161.

Akira Ikuo, Kodai Saito, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa Proc. The 21st Intern. Conf. on Computers in Education (ICCE) WIPP, 2013, 査読有, 21-23.

[学会発表](計 13 件)

Akira Ikuo, Hayato Nieda, Nozomi Nishitani, Yusuke Yoshinaga, Haruo Ogawa, Development of Electronic Textbook for College Chemistry-experiment - Walden 's inversion -, 日本化学会第 96 春季年会, 2016 年 03 月 24 日~2016 年 3 月 27 日、同志社大学(京都府・京田辺市)

Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, (2) Making Electronic Textbook for College Chemistry-experiment, 23rd. Intern. Conf. on Computers in Education, 2015 年 11 月 30 日~2015 年 12 月 4 日, Hangzhou (China)

生尾 光, 吉永 裕介, 小川 治雄, 化学実験用電子テキストの開発, 日本科学教育学会年会, 2015 年 8 月 21 日~2015 年 8 月 23 日, 山形大学(山形県・山形市)

生尾 光, 吉永 裕介, 小川 治雄, 化学の実験学習プログラム用電子実験書の開発, 日本理科教育学会第 65 回全国大会, 2015 年 8 月 1 日~2015 年 8 月 2 日, 京都教育大学(京都府・京都市)

Akira Ikuo and Haruo Ogawa Making Electronic Textbook Linked with Computer Graphics for College Chemistry-experiment, (招待講演), Sixth NICE Conference Network for Inter-Asian Chemistry Educators, 2015 年 7 月 29 日~2015 年 7 月 31 日, 日本科学未来館(東京都・江東区)

Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, Development of Electronic Textbook for Chemical Experiment Taking Esterification as an Example, 7th. Intern. Conf. on Computer Supported Education, 2015 年 5 月 23 日~2015 年 5 月 25 日, Lisbon (Portugal)

Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, An Approach to Electronic Textbook Linking Chemical Experiment - Esterification of Acetic Acid and Ethanol - 22nd Intern. Conf. on Computers in Education, 2014 年 11 月 30 日~2014 年 12 月 4 日, 奈良県新公会堂(奈良県・奈良市)

Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, An Approach to Electronic Laboratory Textbook - Esterification of Acetic Acid and Ethanol -, The 23rd IUPAC Intern. Conf. on Chemistry Education, 2014 年 7 月 13 日~2014 年 7

月 18 日, Toronto (Canada)

Akira Ikuo, Yusuke Yoshinaga, and Haruo Ogawa, An Approach to Electronic Laboratory Textbook - Experimental Program of Esterification of Acetic Acid and Ethanol -, ICPAC 2014 (Intern. Conf. on Pure and Applied Chemistry), 2014 年 6 月 23 日~2014 年 6 月 27 日, Wolmar (Mauritius)

Haruo Ogawa, Hiroshi Nagashima, and Akira Ikuo, Visualization of Chemical Reaction Based on Quantum Calculation - Addition of Halogens to Cyclopentene, ICPAC 2014 (Intern. Conf. on Pure and Applied Chemistry), 2014 年 6 月 23 日~2014 年 6 月 27 日, Wolmar (Mauritius)

Akira Ikuo, Visualization of Reaction Mechanism by CG Based on Quantum Chemical Calculation for Acquisition of Image - Approach to Development of Experimental Program - (招待講演), The First African Conf. on Research in Chemistry Education (ACRICE-1), 2013 年 12 月 5 日~2013 年 12 月 7 日, Addis Ababa (Ethiopia)

Akira Ikuo, 他, CG Teaching Materials based on Quantum Chemical Calculation for Basic Chemistry: An Approach to the Electronic Textbook of Basic Chemistry Linking Chemical Experiments, ICEM 2013 (63rd Annual Conf.: International Council for Educational Media Conference) Conference, 2013 年 10 月 1 日~2013 年 10 月 4 日, Nanyang Technological Univ. (Singapore)

Akira Ikuo 他, CG Teaching Material Based on Quantum Chemical Calculation An Approach to the Electronic Textbook of Basic Chemistry Linking Chemical Experiments, The 5th NICE Conference International Conference on Network for Inter-Asian Chemistry Educators, 2013 年 7 月 25 日~2013 年 7 月 27 日, Pingtung (Taiwan)

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・准教授

研究者番号: 5 0 1 5 9 5 8 9

(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: 1 0 1 3 4 7 6 9

吉永 裕介 (YOSHINAGA, Yusuke)

東京学芸大学・教育学部・准教授

研究者番号: 6 0 3 2 2 8 4 8