

### 3 9 化学分野「分子軌道法入門」

#### (1) 研究開発の概要

本校のSSH事業では、理系全員を対象にして行う形式を基本としている。そのため、実験装置や試薬等の関係上、生徒が自ら考え、何らかの試行錯誤を経て、自分にとって新しいことを発見するというプロセスを体験させていない。

そうした反省の中で、この特別研究では「行う内容から自分自身で考えてみる」ことを主眼においてみた。具体的には「分子軌道法ソフトMOPAC」の構造最適化のみを習得させ、あとは夏期の長期休業中を利用して「高等学校で学んだ化学の知識を利用して、自分で調べる対象を考え、その結果をレポートにして報告する」ことを課題として設定した。

#### (2) 研究開発の経緯

昨年度に行った特別研究「超分子」では、コンピューターシミュレーションによる水分子間の水素結合の様子を提示した。その準備の過程で、最先端の科学におけるコンピューターシミュレーションの重要性を認識するに至り、今年度の特別研究のテーマに設定すべく、基本的な構想を構築することにした。

その結果、それなりの解説書があった上で生徒が自宅のPCで自由に計算ができるようにするためには、ブルーボックスの「実践 量子化学入門(平山令明著)」に添付されているWINMOPACを利用することがベストであるとの結論に達した。

次に内容の準備を進めるため、昨年度のうちに岐阜大学の橋本 智裕先生を訪問し、分子軌道法の基本的な部分から教えていただいた。また次に名古屋大学工学部の学生実験で分子軌道法のシミュレーションを実践されている沢邊恭一先生を訪問し、その概要を教えただけにとともに、具体的なアドバイスをいただいた。

今年度に入り、具体的な内容の検討に入った。まず基本的なコンセプトを「生徒が現在のところ持っている化学的な知識に準拠させる」とし、分子軌道法の内容はすべてブラックボックスとして、いくつかの化合物に関する構造最適化の計算結果のみを行わせることとした。

こうした理由はいくつかある。もちろん量子化学的な内容を説明することが教員や生徒の負担になるため、それを回避したことはもちろんである。しかし、本質的な理由としては「生徒が持っている教科書的な知識の中から、分子軌道ソフトを用いて自分で何らかの発見をする」ことをメインテーマに設定するするならば、WINMOPACの構造最適化計算に絞っても十分に可能であると判断したことによる。

#### (3) 仮説(ねらい、目標)

この特別研究のねらいは2つある。1つは科学研究の本来的な姿である「自分でテーマを設定し、その中で試行錯誤を繰り返しながら、何らかの結論を得る」というプロセスを本校の生徒に体験させることである。さらにもう1つは、実習のアンケートやレポートの結果を思考類型に基づいた分析を通して、評価の尺度を模索することも併せて行うこととした。

#### (4) 研究の方法および内容

ア 対象生徒 2年理系生徒全員(約240名)

イ 実施日時 平成17年7月~

ウ 実施内容

この特別研究の授業では、資料に示した課題を行うことで、以下の3つのことを生徒に理解させることを目指した。

- 1 WINMOPACによる構造最適化の方法
- 2 計算結果の解釈の方法
- 3 教科書との関連で、計算結果から分かる新たな知見の具体例

なお授業中は、繰り返し「自分で考え出すこと」の重要性を強調し、夏期休業中に自分なりの試行錯誤を繰り返すように指示をした。



計算ソフトの説明

## エ 事業内容全体の評価

本校のように対象生徒が全員という規模の大きい実施形態においては、やはり生徒のモチベーションをどのように維持するのが大きな問題となる。

まず今回の特別研究のねらいを達成する前提条件である「計算ソフトの使い方の習得」に関しては、3時間の授業により十分に達成することができたと思われる。

次に課題を行っていく過程で、計算ソフトの使い方に慣れるにつれて、その面白さに気づいたかどうか、より積極的にソフトを使って調べたくなったかについては、半数以上が否定的な評価をしている。

さらに提出したレポートに関する自己評価に関しても低い結果が得られた。

与えられた問題を解くだけでなく、自らが問題を設定し、その考察を行うことが求められることは当然である。しかしそのことが対象生徒に当然のこととして認識されていなかった。

よって今回の特別研究において、事前の講義で何度も強調したことではあるが、それだけでは十分に生徒に認識されなかったようである。また今年度は実施するまでに多大な準備を必要としたため、実施後のフォローに関してまでは指導が行き届かなかったことも原因のひとつと考えられる。

## オ 今後の課題

この教材は、大きな可能性を秘めている。今回の実習では大学の先生方の講義をお願いする形式を採用しなかった。その理由は、繰り返し述べてきているように、生徒が自ら知識の中で試行錯誤をさせることにしたからである。

しかし、その後実施された実験講習会で有機化学を専門とされる先生から、分子設計の場面における分子軌道法の重要性を教えてください、改めて最先端の実践と繋がる教材であることを認識させられた。

教材の改善点としては、提出されたレポートに対する取り組みの意欲を向上させるフォローも必要なこと、さらに途中で実験を入れることの重要性も必要であると思われる。生徒は、コンピューターシミュレーションよりも実際に薬品を用いる実験実習を好むことが、今回の調査で判明したからである。

ゆえに、次年度以降の教材の組立て方として

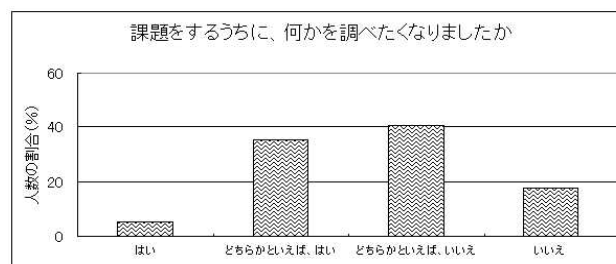
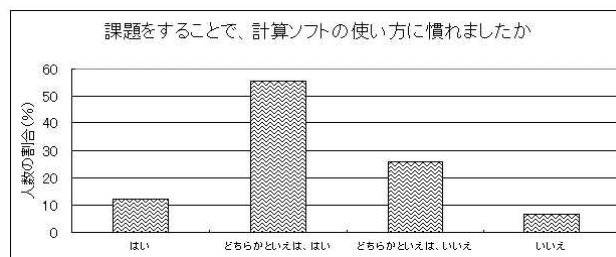
- 1 本校の教員による分子軌道ソフトの使い方の授業
- 2 大学の教員による最先端で用いられるシミュレーションの実践的な例についての講義
- 3 計算化学で示された結果を有機化学の基本的な実験で検証する
- 4 高等学校化学の中から、新しい知見を自らの発想で得る

という4つのステップが、より有効な方法として考えられるのではないかと。つまり、「1」で計算ソフトに馴染みを持たせておきながら、「2」で興味や関心を持たせ、「3」でさらに実感を持たせながら、本来の目的である「4」をより高いモチベーションで行わせるのである。

ともかく WINMOPAC はブルーボックスに添付されているので、1500円で生徒に購入させることができる。また本校のパソコン教室にある相当に古いPCでも問題なく動いた。ゆえに他校でも気軽に行うことのできる最先端科学とのつながりを持たせることのできる教材であると考え、是非とも他校でも実践してみようことをお勧めする。



計算をする生徒達



資料 授業で行ったことの一覧

- 1 エタンの構造最適化を行い、結合距離や結合角、さらにエタンの生成熱をしらべよ。さらに図説等でエタンの結合角や生成熱を調べ、計算値と比較せよ。
- 2 エタノールの構造最適化を行い、ヒドロキシル基中の酸素原子と水素原子の分極の大きさを調べよ。
- 3 プロペンとプロパンの構造最適化を行い、それぞれの生成熱を求めよ。またその結果から、水素付加反応の反応熱を求めよ。なお図説等で結合エネルギーを調べ、その値から計算した反応熱と比較せよ。
- 4 シクロプロパン、シクロヘキサンの構造最適化を行い、それぞれの生成熱を調べて、安定性の違いを説明せよ。
- 5 1-クロロプロパン、2-クロロプロパンの生成熱を求め、プロペンに塩化水素を付加させたとき、それぞれの反応熱の違いを求めよ。
- 6  $\text{CH}_3 - \text{C}^+\text{H} - \text{CH}_3$  と  $\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{C}^+\text{H}_2$  の構造最適化を行い、生成熱をしらべよ。このことでプロペンに塩化水素を付加させたときに多くできる物質を推測せよ。
- 7 エタン、エテン、ベンゼンの構造最適化を行い、炭素原子間の結合距離を求めよ。また結合次数を調べよ。
- 8 トルエンの構造最適化を行い、すべての結合の分極を調べよ。
- 9 フェノールの構造最適化を行い、すべての原子の分極を調べよ。またフェノールが置換反応を受けるとき [o, p-配向] になることを示せ。
- 10 フェノキシドイオンについても、同様に調べよ。その結果から、フェノールとナトリウムフェノキシドの [o, p-配向] の強さを比較せよ。
- 11 ニトロベンゼンの構造最適化を行い、ベンゼン環の炭素原子の分極を調べよ。これによってニトロベンゼンが [m-配向] になることを説明せよ。
- 12 酢酸の構造最適化を行い、原子間距離を求めよ。さらに酢酸イオンの構造最適化を行い、同じく原子間距離を求め、酢酸分子との違いを指摘せよ。
- 13 各自でテーマを設定し、このソフトで調べてみよ。

資料 生徒の設定したテーマの一部

- ・アルコールの水溶性とアルコールの炭素数の関係について
- ・フマル酸とマレイン酸の生成熱の比較から、リンゴ酸の脱水生成物を推測する。
- ・ザイツェフ則を検証する
- ・シクロヘキサンの椅子型と船型の安定性の違いについて
- ・ビニルアルコールの不安定性について
- ・二酸化硫黄や硫酸中の結合について
- ・マレイン酸とフマル酸の異性化反応について
- ・アセトアニリド合成におけるアニリンと無水酢酸の分極について
- ・TNTの不安定性について
- ・シス-2-ブテンとトランス-2-ブテンの安定性の違いについて