

中学生への先進的科学研究における 計算化学の可能性

愛媛大学 教育学部 理科教育講座
准教授 大橋 淳史
ohashi.atsushi.mu@ehime-u.ac.jp

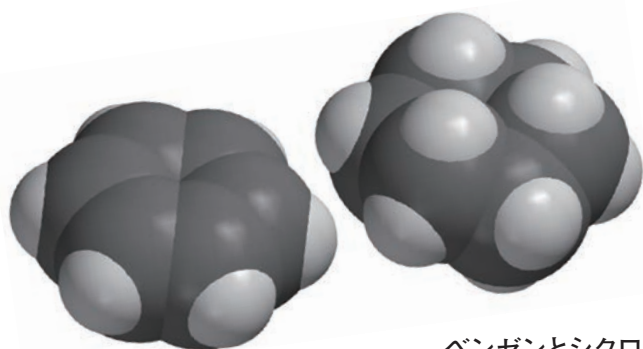
1 はじめに

現在、日本国では若手の研究者が急減している。これは複合的な問題によるものであるが、早急な対応が求められている。そこで、科学技術振興機構では、次代の科学者を養成する、次世代科学者育成プログラムが開始された。平成25年度に開始された次世代科学者育成プログラムメニューBは、中学生を対象としており、理科に対する高い意欲・才能を有する生徒に対して先進的な科学教育を施し、次代の科学者として育成することが目的である。

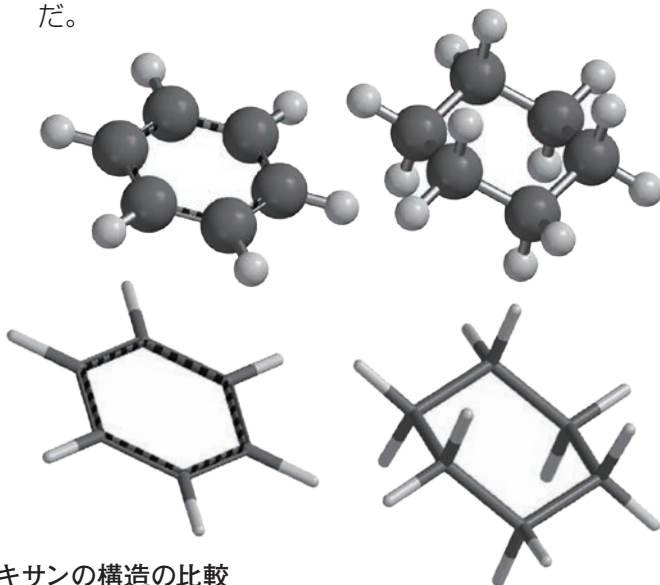
愛媛大学はメニューB第1期事業として参画し、プログラム名『科学イノベーション挑戦講座（以下、本講座とよぶ）』を開催している。本講座は、松山市教育委員会および松山市内の29校の公立中学校の理科主任によって組織される松山市中学校理科主任会と連携しながら開講されている。具体的には、松山市教育委員会が主催する理科体験授業『おもしろ理科教室（以下、連携事業とよぶ）』の参加者の中から特に理科に高い意欲・才能を持つ生徒を選抜して開講されている。実施においても同日の午前・午後3時間ずつ開講しており、本講座受講生徒が講座で学んだ内容を連携事業で発表するなどの綿密な連携を行いながら運営されている。

2 実施対象について

本講座に参加する生徒は、中学校1年生から3年生まで幅広く、平成26年度は14名（男子8人、女子6人；1年生4人、2年生6人、3年生5人）を対象にして実施が行われた。中学校課程は、小学校から大きく学習内容が広がる時期であり、1年生と3年生では知識量が全く異なる。中学校第1学年では物質の区別と物理変化、第2学年では原子・分子と化学変化、第3学年でイオンと水溶液の性質を学習する。そのため、2年生後期以降は原子・分子について知識を持っているのに対し、1年生は原子・分子について粒子という理解しか持っていない。本講座では、このような学年間の学力差を考慮する必要があった。そこで、小学校～大学までの分子と化学結合に関する解説資料を作成して、実施1ヶ月前に配付し、予習によって理解を深めた後、計算化学を用いた分子シミュレーションとフーリエ変換赤外吸光光度計を用いて、物質の性質に分子の構造がどのように関係しているのかを学んだ。



ベンゼンとシクロヘキサンの構造の比較



3 iSpartanを用いる利点

分子の構造を学ぶには分子模型が一般的である。分子模型は手を動かして模型を組む過程を通して、分子の構造に習熟できる点で優れている。しかしながら、平成25年度に分子模型で試行したところ、化学結合には結合長があること、炭素原子は結合によって2種類の模型を使い分けることの理解に時間を要し、ベンゼン環とシクロヘキサンを分子模型で組み立てることに多くの時間を必要とした。そこで、平成26年度は前年の反省を活かし、計算化学によるシミュレーションを導入した。計算化学アプリとしてiSpartanの利点は以下の通りである。

- (1) iPadに導入できるアプリであり手軽に使用できる
- (2) 分子模型を組むよりも早く操作に習熟できる
- (3) 3Dモデルで表示することで立体構造を確認できる
- (4) データベースを持ち一般的な化合物はIR, NMRのシミュレーションデータを表示することができる
- (5) IRのシミュレーションデータのピークから、変角振動と伸縮振動をアニメーションで表示可能
- (6) データベースにない化合物でもSpartan'14で計算することで、(4)と同様に表示が可能

そこで、中学生にiSpartanを用いた計算化学に挑戦してもらった。結果として、中学生も段階を踏めばアプリの操作には問題がなく、すべての分子を短時間で描画できるようになった(図1)。



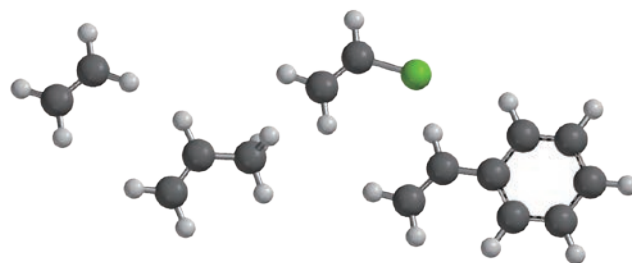
図1 iSpartanを使う中学生

4 iSpartanを用いた分子構造学習

4-1 シクロヘキサンとベンゼン

生徒のiSpartanの基本的操作修得と分子構造の理

解確認を兼ねて、シクロヘキサンとベンゼンのモデル作成を行った。シクロヘキサンとベンゼンは分子構造ではどちらも「正六角形」をしているように見える。そこで、このふたつの構造は、どのように違うのかを予想した後、iSpartanでモデルを作成し、3Dモードに切り替え、CPKモデルとBall&Stickモデルによって、立体構造を確認した。シクロヘキサンの立体構造を両モデルで表示し、Ball&Stickで舟形・椅子型の構造の違いの確認を、CPKモデルでシクロヘキサンとベンゼンとの最大の違いは水素原子の結合方向であることを確認した。そして、シクロヘキサンとベンゼンの性質の違いが、分子の構造に由来していることを解説した。



さまざまなプラスチックの単量体
(左から) エチレン、プロペン、塩化ビニル、スチレン

4-2 エチレンの分子構造と赤外吸収

エチレンを選んだのはプラスチックの原料だからである。中学校第1学年「身のまわりの物質」単元では、ポリエチレン(PE)、ポリエチレンテレフタレート(PET)、ポリ塩化ビニル(PVC)、ポリスチレン(PS)、ポリプロピレン(PP)の5種類のプラスチックを、手触り、水への浮き沈み、密度、熱したときの変化、燃焼性などによって区別する。そのため、本講座を受講している生徒にとって、プラスチックは生活でも授業でも身近な存在と言える。そこで、生徒にとって身近なプラスチックを題材にして、物質の構造と性質の関係について、中学校の学習を下敷きに先進的科学教育を試みた。

まず、iSpartanでエチレンを作成し、CPKモデル、Ball&Stickモデルによって立体構造を確認した後、データベースからIRを表示した。そして、IRデータから赤外線を吸収する波数を選択して、どの波数で分子のどの部分が、伸縮振動および変角振動するのかを学んだ。次に、実際にバネを用いて、伸縮振動と変

角振動のどちらにエネルギーがたくさん必要かを考えた。バネを曲げることは人の力でも簡単だが、伸縮は人の力では難しい。そこで、伸縮振動と変角振動では変角振動に必要なエネルギーが少ないことを確認し、波数=10⁴/波長であることからエネルギーと結合の関係について学んだ。

4-3 その他プラスチックモノマー

PETを除いた残り3種類のプラスチックのモノマー、塩化ビニル、スチレン、プロペンをiSpartanで作成し、エチレンと同様にIRデータから結合と伸縮振動、変角振動の関係を学んだ。

4-4 分子構造とプラスチックの性質の関係

PETを除いた4種類のモノマーを10分子繋げたオリゴマーを作成し、CPKモデルを表示した。そして、炭化水素鎖しかもたないエチレンのオリゴマー、ウンデカンと炭化水素鎖のまわりに大きな置換基がある塩化ビニル、スチレン、プロペンのオリゴマーの構造を比較した。オリゴマーのCPKモデルを比較すると、塩化ビニルは塩素、スチレンはベンゼン環、プロペンはメチル基が炭化水素鎖のまわりに張り出しており、これら置換基によって炭化水素鎖の自由な運動が阻害されている。ポリ袋などの柔らかい素材として使われるPEに対して、水道管に使われるPVC、CDケースに使われるPS、ペットボトルのフタに使われるPPが硬い理由は、この炭化水素鎖の運動性に起因しているかどうかを、シミュレーション結果を比較しながら考察した。

5 フーリエ変換赤外吸収測定によるプラスチックの同定

計算化学の予想が正しいかどうかを実際の測定か

ら検証した。全反射測定装置(ATR)を接続したフーリエ変換赤外吸収測定装置による測定は、プラスチックを挟むだけで測定が可能であるため、中学生でも問題なく測定が可能であった(図2)。

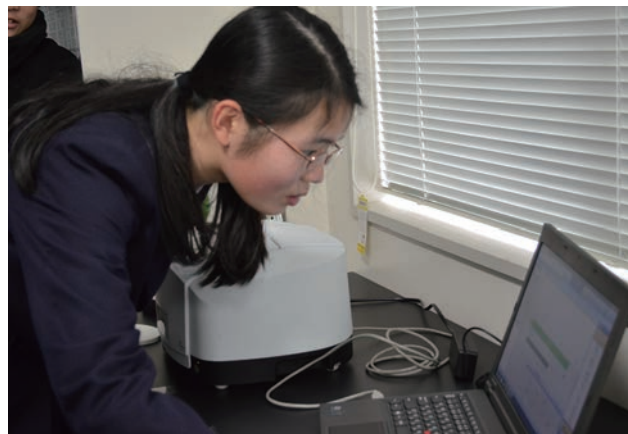
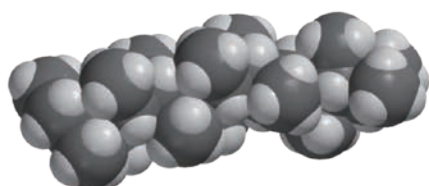
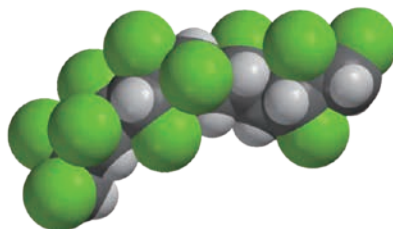


図2 プラスチックの赤外吸収のATRによる測定

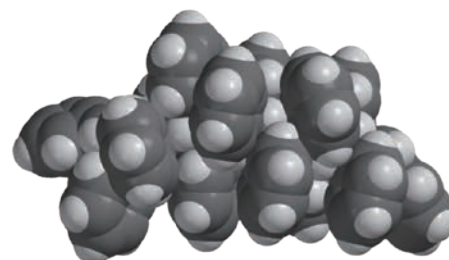
中学生は、PETを含む5種類のプラスチックを測定し、そのIRデータとiSpartanのデータベースにあるモノマーのIRシミュレーションデータを比較して、プラスチックの同定に挑戦した(図3)。シミュレーションデータはモノマーで、測定データはポリマーであるため、若干のピークシフトを伴う。エチレンとウンデカンのIRシミュレーションデータを示して、ピークシフトに関する助言・解説を加えながら、5種類のプラスチックの同定に挑戦した。PEおよびPPの同定は半分の中学生が正答したが、PVCとPS、PETの区別に苦労したようで、すべて同定に正解した生徒は1名であった。これらの区別については、詳細な構造に関する基礎学力が必要であろう。最後に、フーリエ変換赤外吸収測定装置のデータベースで同定した結果を示し、どこを区別するのか、何が見えているのかを、もう一度確認した。



ポリプロピレン (PP) のオリゴマー



ポリ塩化ビニル(PVC)のオリゴマー



ポリスチレンのオリゴマー



図3 実測値とシミュレーションを比較してプラスチックの同定に挑戦

6 分子の構造と物質の性質

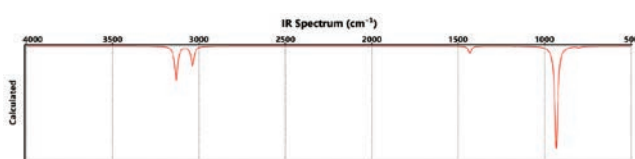
炭化水素鎖の運動性が、プラスチックの性質を決めているという推論について、PETから検討した。iSpartanでエチレングリコールとテレフタル酸の10分子オリゴマーを作成し、minimizerでオリゴマーの運動する位置から、この分子は炭化水素鎖による柔らかい性質とベンゼン環による硬い性質、ふたつの性質を兼ね備えているかどうかを考察した。その後、PETの炭化水素鎖をベンゼン環に置換した、ポリ(p-フェニレンテレフタルアミド)を紹介し、これが防弾チョッキにも使われる強靱な性質を持っていることを解説した。分子の構造は物質の性質に反映されて

おり、だからこそ化学は、目に見えない原子や分子の振る舞いを対象としていること、原子や分子は目に見えないが、その構造が私たちの生活に大きな影響を与えていることについて考察した。

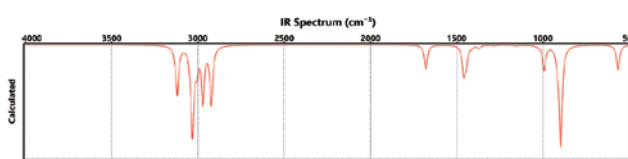
7 最後に

iSpartanを用いた計算化学的手法とフーリエ変換赤外吸収測定装置による実際の測定結果を通じて、中学生への科学教育における計算化学の可能性について検討した。本来であれば、大学専門レベルの内容であるため、理科に高い意欲・才能をもつ中学生にとっても理解が難しいようであった。しかしながら、実施後に行った調査では、プラスチックの同定における正答率も高くなかったにも関わらず、中学生の満足度は高い傾向を示した。高い意欲・才能をもつ生徒にとっては、「すべて理解できる」ということが必ずしも満足度と直結しておらず、活動において「自分の能力が試されるか」という点が重要であることが示唆された。本講座は平成27年度も実施される予定である。平成27年度は、iSpartanを利用した計算化学による分子構造について、より理解しやすい教育法の開発を検討したい。また、本講座を補助している大学生から分析化学の理解が容易になると高い評価を得たため、大学の講義でも実施を検討したい。

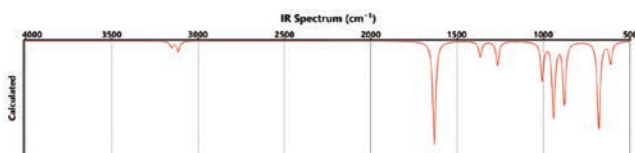
単量体のIRスペクトル (EDF2/6-31G*による計算結果)



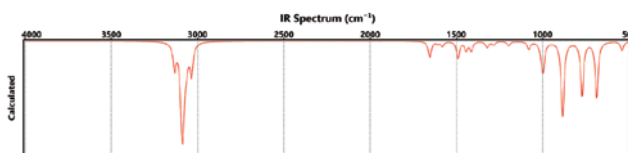
エチレン



プロペン



塩化ビニル



スチレン

表紙の分子モデルはポリp-フェニレンテレフタルアミドの4量体同士が水素結合をしている様子とポリエチレンテレフタレート (PET) 3量体

※本書に掲載された写真は、科学技術振興機構次世代科学者育成プログラムメニューB事業「科学イノベーション挑戦講座」に参加した生徒および保護者から、あらかじめ掲載に関する同意を得ております。



米国法人 WAVEFUNCTION, INC. 日本支店
〒102-0083 東京都千代田区麹町3-5-2 BUREX麹町
Tel 03-3239-8339 Fax 03-3239-8340
E-mail iapan@wavefun.com