

有機化学教育におけるコンピュータの活用 (第1報)

—コンピュータグラフィックスを利用した有機化学反応の動的表示—

徳田 昌生, 山口 和美*

北海道大学工学部, * 苫小牧工業高等専門学校

Utilization of the Personal Computer in Teaching Organic Chemistry (Part 1)
-Dynamic Representation of Organic Reactions by the Use of Computer Graphics

Masao Tokuda and Kazumi Yamaguchi*

Graduate school of Engineering, Hokkaido University

*Tomakomai National College of Technology

Abstract — We have prepared several computer programs for teaching of organic chemistry. In these programs, the pathways of organic reactions are shown as continuous animated and graphical representations of organic molecules. As one of those examples, the nucleophilic substitution reactions (S_N2 and S_N1) were shown by continuous animated representations using chemical formulas as well as stereochemical or molecular orbital models. Our dynamic representation utilizing the personal computer markedly improved the understanding of chemistry students in organic chemistry.

1. はじめに

化学は物質を扱う学問である。化学反応をミクロの視点で見ると分子やイオンの衝突や組み換えが起こっている。しかし、ほとんどの場合それらの変化を直接観察することができないために、分光学的な手段などを使って間接的にそれを見ているわけである。また、教科書などでも、本来は連続的で三次元的な反応を紙の上に何段階かに分けて静止した図として示している。そのような変化をあたかも原子や分子を直接見ているかのように示すことができれば、化学に対する学生の興味も増し、化学的な現象に対する本質的な理解も深まるであろう。市販のビデオやテレビの映像には

今までにもそのようなものがあつたが、大学での授業に役立つような映像はなかなか見つからないのが実情であつた。しかし、パソコンの普及と性能の向上によって、最近では個々の教官が自分自身でそのようなアニメーションを作成することが可能になり、また、優れた教材も市販されるようになってきた。

有機化学は化合物や反応が非常に多様であるため、一見暗記科目のような印象を与え、学生の勉強意欲を低下させている場合がある。しかしながら、置換反応・脱離反応・付加反応などいくつかの基本的な反応の機構を理解することができれば、様々な反応の推測が可能となり、有機化学を暗記ではなく理解できる科目として認識させるこ

とができる。また, 有機化学の分野では分子の立体的な構造が反応性に大きく影響する場合が多いため, 三次元的なアニメーションは特に初学者が有機化学の反応を理解する際の大きな助けになると予想される。

そこで, 我々はいくつかの有機化学反応について, パソコンのグラフィックス機能を使って, 電子の移動にともなう結合の形成や切断などの化学反応の経過を, 段階的に動的に示したアニメーションプログラムを作成し, 実際に授業で使用した。それらのプログラムの概要, 実施結果などについて報告する。また, ネットワーク環境下でのプログラムの利用例についても併せて報告する。

2. 使用装置および使用言語

パソコン : PC-9801 シリーズ(NEC), 言語 : N88BASIC(86)(MS-DOS), 信号変換器 (パソコンの RGB 信号を家庭用ビデオの NTSC 信号に変

換する装置) : XPC-1V (電波新聞社), デジタル RGB 分配器 (デジタル RGB 信号を 5 台のモニターに分配する装置) : KSW-05DR (関西電機), 液晶プロジェクター : CUSX1 (シャープ)

一斉授業でパソコンを利用する場合は, モニター画面が小さいことが常に問題になる。大勢に見せる場合は, パソコン用のビデオプロジェクターと直結する方法が最も良い画質が得られるが, パソコン用のビデオプロジェクターは高価で大きいため特別な教室でしか利用できない。しかし, 信号変換器を通して一般のテレビまたは一般のビデオプロジェクターに接続する方法でも半角文字を使用しない限り十分な画質が得られる。従って, テレビが設置された教室であればノート型パソコンと, 信号変換器(ビデオカセット程度の大きさ)を用意することによって, いつでもパソコンを使った一斉授業を行うことができる。

3. アニメーションの例

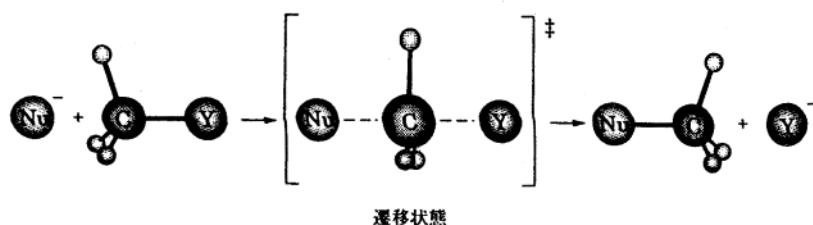


図 1 教科書の図 (S_N2 反応)

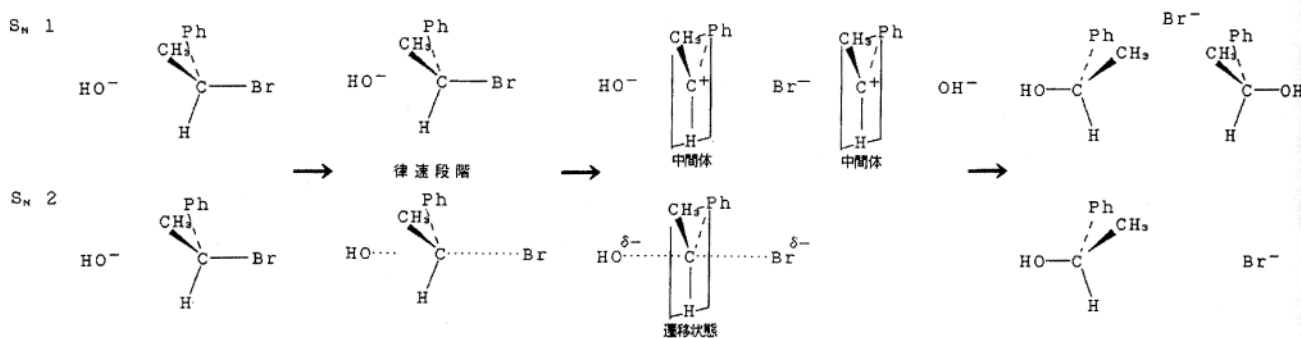


図 2 全角文字の化学式を使ったアニメーション

有機化学の基本的な反応であり立体化学的にも重要な脂肪族求核置換反応を例に, 教科書の図, 我々が作成したアニメーションおよび市販のソフトのアニメーションについてそれぞれの特徴などを述べる。

(1)教科書の図

教科書(文献1)では, S_N2 反応については求核試薬が脱離基の反対側から基質を攻撃する図と, 求核試薬と脱離基の両方が部分的に結合した遷移状態を示す図, および脱離基が脱離し, 求核試薬が結合して立体配置が反転した新しい化合物の生成を示す図の3つの図が示されている(図1)。また S_N1 反応については, 脱離基が脱離して生成した平面状のカルボカチオン中間体と, ラセミ化した生成物の図が示されている。

従って, 教科書ではいずれの場合も反応前, 遷移状態または中間体, 反応後が示されているだけで反応の経過は示されていない。

(2)全角文字の化学式を使ったアニメーション - 図2

全角文字をグラフィック画面に表示して反応のアニメーションを行うプログラムを作成した(山口他 1985)。同じ画面で上に S_N1 反応が, 下に S_N2 反応が表示される。

初めに1-ブロモ-1-フェニルエタンが表示され, 左側から求核剤である OH^- が次第に近づいて行く。求核試薬がある程度近づくと, それぞれの反応の律速段階となり, 結合角が順次変わって S_N1 反応では中間体のカルボカチオン, S_N2 反応では遷移状態が表示され, 次に, 立体配置保持, または反転で反応が進み, 1-フェニル-1-エタ

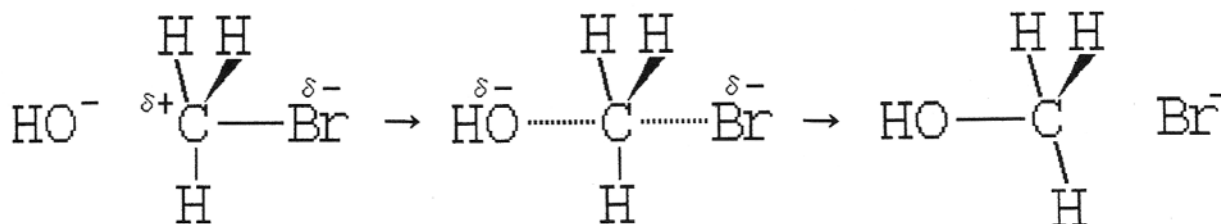


図3 全角文字の化学式を使ったアニメーション (S_N2 反応)

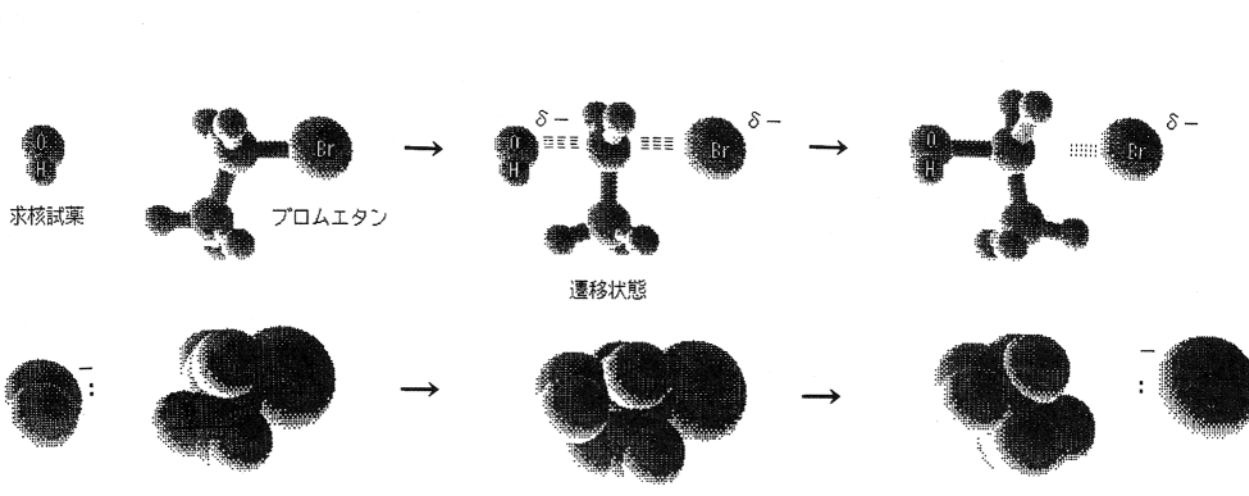


図4 立体的なモデルを使ったアニメーション (S_N2 反応)
(上 棒球モデル、下 空間充填モデル)

ノールが生成する。最後に脱離基 $B r^-$ が次第に遠ざかって反応が終了する。 $S_N 1$ 反応と $S_N 2$ 反応の両方が同じ画面上に動的かつ連続的に表示されるので、両者の反応機構の違いがよく分かる。

(3)大きな化学式を使ったアニメーション - 図3

パソコン画面に表示させる通常の大きさの文字(全角文字)では、授業で多くの学生に見せる場合には反応式が小さいため、それを拡大してアニメーション表示するプログラムを作成した(笹村他 1993)。最初に $S_N 1$ 反応が表示され、次に $S_N 2$ 反応が表示される。アニメーションの動きは全角文字の化学式を使ったものと同じである。この程度の大きさがあれば一斉授業でも十分良く見える。

(4)立体的なモデルを使ったアニメーション

獅々堀ら(1995)が作成したアニメーションである。各分子について原子間距離、原子のファンデルワールス半径などを計算した結果に基づいて、棒球モデルと空間充填モデル(図4)でアニメーションが行われる。表示する絵は、あらかじめ描かれてディスク上に圧縮して保存されているので、複雑なモデルを表示しているにも拘らず表示は非常にスムーズである。分子のかさ高さが良くわかるアニメーションである。しかし、各原子の元素名がわからないこと、空間充填モデルでは原子が混み合い過ぎて反応する場所がわかりにくいことなど、実物に忠実なモデルであるための欠点もある。

(5)軌道モデルを使ったアニメーション - 図5

これも獅々堀らが作成したアニメーションであ

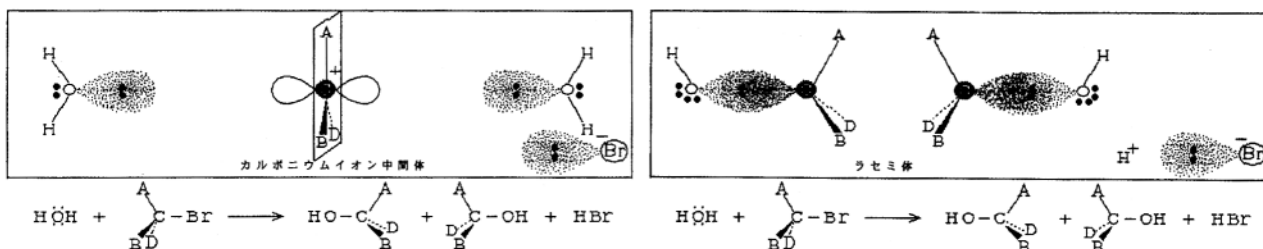


図5 軌道モデルを使ったアニメーション ($S_N 1$ 反応)

```

~~~~~ MAIN MENU ~~~~~
1 CHARGE                11 ETHANOIC ACID
2 METHANE                12 AMINES
3 PROPENE                13 AMINO ACIDS
4 PROPYNE                14 MALONIC ESTER
5 ACETANILIDE           15 CANNIZZARO
6 SN1, SN2 REACTIONS    16 LITHIUM ALUMINUM
7 ORGANIC HALIDES       17 CLAISEN
8 ETHANOL                18 GRIGNARD
9 ALDOL                  19 BECKMANN
10 PROPANONE             20 E N D
    
```

HIT ANY NUMBER ?

図6 その他のアニメーション

る。反応に関与する物質の軌道が立体的に示されている。求核試薬, 基質, 脱離基の軌道の様子や軌道の重なりが良くわかり, 求核置換反応における電子の状態が非常に分かりやすく示されている。

(6) その他のアニメーション

求核置換反応の他に, 授業に利用するために図6に示すようにアルドール縮合など約20種類の有機化学反応のアニメーションを作成した。

以上の例から明らかなように, パソコンによるアニメーションではプログラムを自作できるように, ひとつの反応について様々な見方に立ったアニメーションの作成が可能である。この点が, 市販のビデオ教材と大きく異なる点である。従って, パソコンを視聴覚機器として捉えた場合には, OHPやスライドのように比較的手軽に教材の作成や変更ができ, しかも色と動きを持たせることができる機器であると言えることができる。

4. 実施結果

デジタルRGB分配器と5台の14インチモニターを使って, 2年生の有機化学実験の際に, 約40名の学生に対してこれらのアニメーションなどを使って実験のガイダンスを行った。また, 1年あるいは2年生の有機化学の授業でも教室で同様な装置を使用したり, 情報処理教育センターの視聴覚室でビデオプロジェクターを使用したりしてアニメーションを見せ, 反応機構についての説明を行った。

学生に実施したアンケートの結果から, 黒板を使った授業と比較して特に化学反応式の動的表示や実験のシミュレーション, 分子模型などが分かりやすかったという意見が多く, やはり動き・色・立体的な表現力がパソコンの長所であることが分かった。

授業にパソコンを使うことに対しては, パソコンを使うことが理解の助けになったという答えが多く, 普通の講義にもパソコンを使って欲しいと

いう意見も多かった。実際に, 求核置換反応の動的な表示を見せる以前の学生とそれ以後の学生とでは実験レポートの求核置換反応についての考察の充実度が全く違っていた。

5. ネットワーク環境下での利用

苫小牧高専ではこれらの有機化学反応のアニメーションプログラムを学内のネットワーク上で利用できるようになっている(笹村他 1995)。サーバー上に用意されたプログラムはCAI室の端末から自由に呼び出すことができるので, 授業だけでは理解できない学生は好きな時にCAI室で個別に学習することができる。また, 現在整備中の学内LANが完成すれば, 各研究室の端末で自由に学習することが可能になる。カナダのダルハウズィー大学では種々の化学教育用のプログラムをLAN上で運用し, 学生の成績評価の際に最高6%の評価点を与えている(Silverthorn他 1993)。

6. まとめ

いくつかの有機化学反応について, パソコンを使って三次元的なアニメーションプログラムを作成し, 授業で実際に使用した。その結果, パソコンアニメーションが反応機構などの理解の助けになることが明らかになった。今後は, 分子モデルなどの新しいプログラムの作成を行う予定である。

参考文献

- McMurry J. (1994), マクマリー有機化学(第3版)(上), 東京化学同人, P 368
笹村泰昭, 藤本茂樹, 山口和美, Newbold B.T. (1995), 苫小牧高専紀要, 30, 47
笹村泰昭, 山口和美, Newbold B.T. (1993), 苫小牧高専紀要, 28, 87
Sasamura Y., Yamaguchi K., Fujii K., and Newbold

B.T., (1993), Chemistry and Software, 15, 157
Silvert D. J., Forrest T. P. and Warren C. H. (1993),
76th Canadian Society for Chemistry Conference
and Exhibition, CE-B2, No.96
獅々堀彊 (1993), 「パソコンアニメによる立体化学」, 共立出版
山口和美, 横田和明 (1985), 化学PC研究会会報,

7, 72

なお, 化学ソフトウェア学会では化学の分野での研究・教育用ソフトウェアのカタログを発行し, ソフトウェアの頒布も行っている。

連絡先: 郵便番号 916 福井県鯖江市下司町
福井高専気付 化学ソフトウェア学会