

有機化学教育におけるコンピュータの活用（第2報） —教育用のデータベースの作成とその利用—

山口 和美¹⁾，徳田 昌生²⁾

1) 苫小牧工業高等専門学校

2) 北海道大学工学部

Utilization of the Computer in Teaching Organic Chemistry (Part 2) — Preparation of Data Bases for Education and Their Use —

Kazumi Yamaguchi¹⁾ and Masao Tokuda²⁾

1) Tomakomai National College of Technology

2) Faculty of Engineering, Hokkaido University

Abstract—We have prepared data bases of chemical compounds and English chemical terminology. The students can easily learn the characters of various organic compounds by using the personal computer in which the compound data base program is always available in the laboratory. Furthermore, the use of a word game program for studying English chemical terminology resulted in an enhanced interest of the students in organic chemistry.

1. はじめに

先に我々は，コンピュータのグラフィックス機能を利用して有機化学反応を動的に表示することが反応機構などの理解の助けになったことを報告した（1996年）。

グラフィックス機能以外のコンピュータの特徴のひとつとして大量のデータの蓄積が可能であること，必要なデータをすばやく検索できることが挙げられる。化学の分野においてもコンピュータによる文献検索や化合物の検索などは研究を進める上で必要不可欠なものであり，多くの化合物データベースや検索ソフトなどがある。しかし，それらのデータベースはいずれもデータがあまりにも多すぎることや利用コストなどの面で学生実

験の際に手軽に利用できるものではない。そこで我々は学生実験や通常の講義などの際に手軽に利用するために有機化合物の性質などの簡単なデータベースを作成した。本報告ではそれらの化合物のデータベースの作成とその利用，化学英語の単語集の作成とその利用など，コンピュータ上でのデータベースの作成とそれを利用した結果などについて述べる。

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：N 88 BASIC（86），QUICK BASIC（MS-DOS）

3. データベースの例

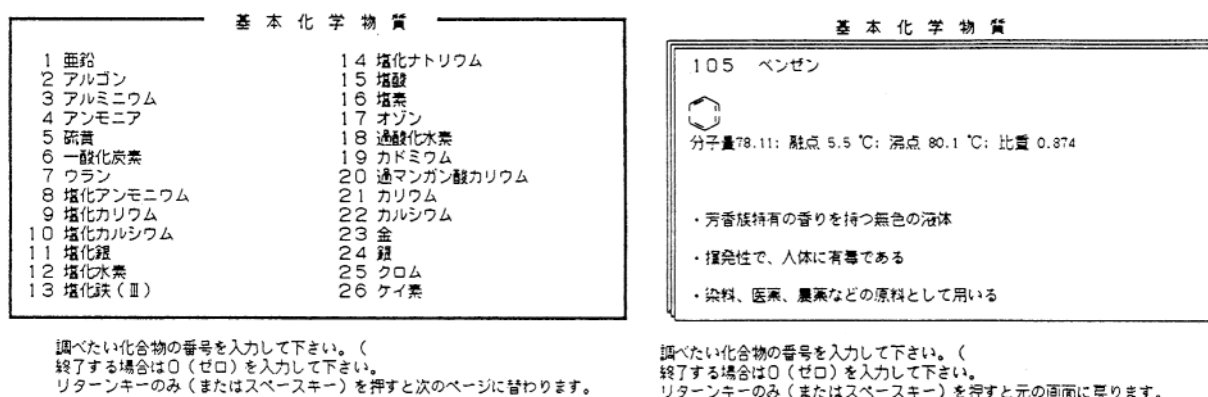


図1 化合物データベースの例

3.1 テキストベースの化合物データベース

市販のデータベースソフトや表計算ソフトを利用した化合物データベースの作成も可能であるが、その場合には、化学式の添え字が表示できない、フェニル基などの表示ができないなどの問題があり、それらの問題は特に有機化学の初学者にとっては重大な欠点になる。また、研究用のデータベースでは検索の際の約束事などが多く、初心者が気軽に検索することができないなどの不都合がある。

そこで基本的な化学物質約100種類についてテキストベースの化合物データベースとそれらを表示するプログラムを作成した(図1)。プログラムを起動すると五十音順に並んだ化合物の一覧が表示され、参照したい化合物を選択すると、その化合物の名称、構造式、融点、沸点、比重、主な性質などが表示される。学生実験室にパソコンを1台用意してこのプログラムを動作させておくと、実験に使用する試薬の性質などを学生が自由に調

べることができる。また、化合物のデータの変更や削除が容易なので、特殊な試薬であっても必要な試薬のデータの追加が自由にできる。

便覧や辞典類の調べ方を学生に学習させる事も重要であるが、実際には図書館に常備されている便覧の冊数が限られるために、他人のデータを写す場合が多いのが実情である。それに対してパソコンであれば実験室で検索でき、検索結果を数人で見ることもできるという利点がある。実際、学生は実験の空いた時間を利用して自分たちの使った試薬の性質を積極的に調べて記録するようになった。

このプログラムを改良して例えば特定の官能基を持つ化合物を選び出す機能や融点や沸点がある範囲にある化合物を選び出す機能などを付加すると有機系の研究室における試薬の在庫管理や研究用としてもさらに利用価値のあるものになると考えている。

なお、本間ら(1993)は、表計算ソフトのデー

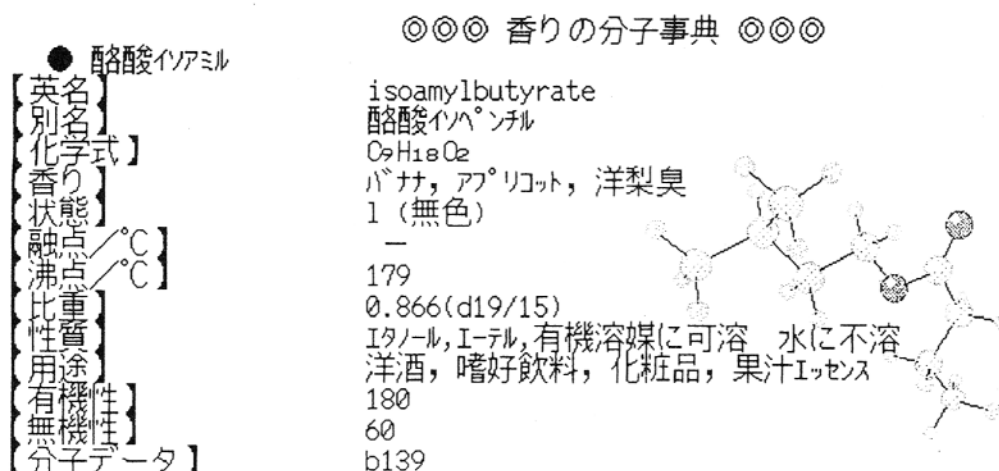


図2 化合物データベースの例（本間ら）

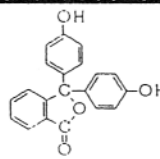
基本有機化合物	化合物を選んで下さい	フェノールフタレイン phenolphthalein $C_{20}H_{14}O_4$ 分子量 318.33
2,4,6-トリニトロトルエン 2,4,6-トリニトロフェノール トルエン ナイロン 6 ナイロン 66 ナトリウムエトキシド ナフタレン ナフトール ニトログリセリン ニトロベンゼン 乳酸 安息香 パラメチン酸 ビニルアルコール ピリジン フェノール ★ フェノールフタレイン 1,3-ブタジエン 1-ブタノール	★の移動: ↑ ↓ 選択: リターン	 3,3-bis(p-hydroxyphenyl) phthalide 白色結晶性粉末 溶解度 水に不溶, エタノールに易溶. 融点 °C 258~262 沸点 °C 比重 屈折率
42T:ESCキー		1物性 2製法 3反応 4用途 5生物 6モデル 7立体視 8関連 9その他 10終了

図3 分子の電子図鑑（獅々堀ら）

タを変換して添え字や分子モデルを画面に表示することを可能にしたデータベース用のソフトを作成し、医薬品や農薬などの化合物のデータと共にインターネット上で公開している（図2）。

3.2 「分子の電子図鑑」

大学初級程度の学生にとっては、有機化合物の分子の立体的な構造をイメージすることは大変困難であるが、獅々堀ら（1991年）が作成したプロ

グラムでは、化学構造式と立体的な分子モデル（棒球モデルと空間充填モデルの切替が可能）を対比させることができるため特に初学者にとっては大変わかりやすいものになっている（図3）。このプログラムでは化合物名の一覧から表示させたい化合物を選択すると、その化合物の化学構造式と共に立体的な分子モデルが表示され、ファンクションキーを押すことによってその化合物の物理的・化学的性質・製法・反応性、用途・生物学的

性質などを表示させることができる。現在まで一般の有機化合物，タンパク質・核酸・生理活性物質など数百種類の化合物のデータが蓄積されている。ただし，データの変更や追加はできない。

3.3 化学英単語の学習プログラム

有機化学関係の英語の専門書や論文を読むためには，一般的な英単語の知識のみでは不十分であり，名詞に限らず動詞，形容詞などでも専門分野で使う特殊な訳語がある場合が多い。そのため初めて有機化学関係の英文に接する者にとってはそれを正しく翻訳することは大変困難である。

そこで，我々は専門分野で使う英単語のデータ集をパソコン上で作成し，更にそれらのデータを使ってゲーム形式で楽しみながら化学英単語を学習できるプログラムを作成した（図4）。

プログラムは，MS-DOS上のQUICK-BASICで書かれている。単語データはテキストファイル形式であるため，自由に追加・訂正ができる（図5）。

ゲームの概要は，英単語のスペルを当てるものである。1問ずつ単語の意味やヒントが表示され，学生はそれを手掛かりとして，その単語のスペルに含まれると思われる文字を1文字ずつキーボードから入力する。間違った文字が入力されると，風船が割れ，規定回数以上間違えると宙に浮かんでいた主人公が地面に落ちてしまう。正しいスペルを入力するか，間違いが規定回数を越えると，次の新しい単語が出題される。

終了キーを押すと，個人名，実施日時，出題単語数，正解数などがファイルに記録されゲームが終了する。ゲームの制限時間やミスの許容回数などは対話形式で変更が可能である。

苫小牧高専では化学英単語については単独のパソコン上で運用されているが，このプログラムを利用して一般の英単語を学習するプログラムをネットワーク上で運用している。サーバーとしてはVAX 4000（日本DEC），端末としてはPC-9801US（NEC）40台を用いている。学生は端末に起動用のディスクを入れて，プログラム名を入力す

るだけで自動的にゲームが開始される。学生個人毎の単語データファイルがサーバー上にあり，終了時には正解した単語が削除された新しい単語データファイルが作成される。やればやるほど単語数が減ってゆくので学習の励みになると同時に，不正解の単語は何回も出題されるという反復学習の効果も期待できる。

単語データは現在も追加中であるが，元素名・化合物名，器具名，実験項に良く出る簡単な動詞や形容詞などを中心に作成した。また，化合物名などについてはヒントの中に特に重要な化学的な性質や，化合物名の由来などを入れ，化学的な知識の習得にも効果があるように工夫した。

学生の実施結果は，すべて1つのファイルに記録されるので教師がいつでも情報を参照することができる。

授業でこのプログラムを実施した後，学生に対してアンケート調査を行なった。その結果，半数以上の学生が興味を持ってゲームを進めることができたと回答している。また同じ単語が複数回出題されるのでスペルの勉強になったという回答や，知っている単語でも別の意味や用法が分かり勉強になったという回答も多かった。

問題点としては，用意した単語データのレベルが高過ぎ，ほとんど正解できなかったために興味を失ってしまったと見られる学生がいたことなどが挙げられるが，全体的にはこのプログラムが単語の学習に対して有効であるという肯定的な意見が多かった。

また，本来このプログラムは個人学習用に作られたものであるが，1台のパソコンに向かって数人でやると，お互いの知識を補完し合えるため正解率も上がり，非常に熱心に行う傾向が見られることがわかった。従って，例えば実験室にこのプログラムを入れたパソコンを数台用意して自由な時間にゲームを行わせるなどの利用方法も考えられる。

4. まとめ



さあ考えましょう！ 10問中8問正解

元素名 原子番号18、原子量40

希ガス、1原子分子

空気中に約1%含まれます

語源はギリシャ語の「不活性」

『□□g□n』

(e☆☆☆☆)ミス 54

ありそうな文字を入力して下さい []

大文字と小文字の区別を忘れずに

ギブアップは[B S]を終了は[ESC]を押して下さい

図4 化学英語の学習用ゲーム

aromatic, 形容詞, 芳香族の,, aromatic compound 芳香族化合物, 脂肪族は aliphatic,
aspirator, 名詞, アスピレーター,, 水道水を流して減圧する装置,,
assign, 動詞, 同定する、割当てる,, あてはめる, be assigned to ~、~と帰属する,,
atmosphere, 名詞, 大気、雰囲気,,,,
atmospheric pressure, 熟語, 大気圧,, 大気の圧力, 約 1 atm、760 mmHg、101325 Pa,
atomic weight, 熟語, 原子量,, 原子の体重、陽子の数+中性子の数にほぼ比例,
C-12の質量との比なので単位はつかない,
available, 副詞, 手に入れうる、利用できる,, 可能を表わす接尾辞が付く,,
average, 副詞, 平均の、平均的な,, average molecular weight 平均分子量,
on the average 平均して,
azeotropic mixture, 熟語, 共沸混合物,, 一定の沸点を持つ混合物, 例 水とベンゼン,
balance, 名詞, 天秤、はかり、平衡,, 日本語にもなっている,,
barium, 元素名, 原子番号56、原子量137.3,, 2価の陽イオンになる、イオンは有毒,
硫酸との塩は白色で水に不溶, 語源はギリシャ語の「重たい」,

図5 化学英単語のデータの例

有機化合物について簡単なデータベースソフトを作成し学生実験の際に使用した。その結果、学生は積極的に化合物の特性や性質などを調べるようになってきた。また、化学英単語をゲーム形式で学習するソフトを作成し使用した。ゲーム形式であるため学生は興味を持って取り組んだ。今後は、化合物データベースについては検索機能の充実、単語データベースについてはデータの追加や機械・電気などの他の専門分野の単語データの作成などを行う予定である。

参考文献

- 徳田昌生，山口和美 (1996)，『高等教育ジャーナル』（北大），**1**, 125
 本間善夫 (1994)，『化学ソフトウェア学会 1994 研究討論会』，**9**，28，インターネットアドレス

http://irws.eng.niigata-u.ac.jp/~chem/itou/resource/h_home.html

獅々堀彊，倉橋研吾 (1991)，『化学 PC ソフトウェア研究討論会』，**6**，50

山口和美，尾田智彦，笹村泰昭 (1994)，『工学・工業教育研究講演会講演論文集』，**8**，1

なお，本間のソフトと獅々堀らのソフトについては化学ソフトウェア学会の無償利用ソフトとして登録されている。

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

インターネットアドレス

<http://cssjweb.chem.eng.himeji-tech.ac.jp/Welcomej.html>