

2 特別研究

2.1 分子軌道法体験（化学分野）

(1) 研究開発の課題（概要）

講義を聞いたり、問題を解いたりして、学力をつけることは以前から行われているが、講義ではできないことをパソコンを用いて扱うことができれば、新鮮味もあり、入力に応じた結果がパソコンの性能にもよるが、即座に返ってくるので、ゲーム機に慣れた世代の生徒には取り組みやすく、興味関心を持たせやすいと思われる。

(2) 研究開発の経緯

数年前に、WinMOPAC Version3.0.3 を用いた演習を行っていたが、コンピュータの OS のバージョンアップなどにより不具合が生じ、できないでいた。MOPAC による演算のできるフリーのソフト「Winmostar」があることを聞き、来年度しかりとした形で実施することを踏まえ、今年度は試用という形で演習を行った。

(3) 仮説（ねらい、目標）

生徒各々について家庭でのパソコンに関する環境が異なり、また1日にどれくらいの時間パソコンに向かっているか、また、パソコンの利用方法によってパソコン操作の速さが異なる。まず、どの生徒も、用いたソフト「Winmostar」の基本的な操作ができるようにし、次に、得られる結果の読み方を知って、いろいろな物質の分子構造などを調べてみようという気持ちをもたせ、実際に調べさせることをねらいとした。また、一人ひとりがパソコンの操作を行うことで、他人任せにしたりせず、自分の力で問題を設定しそれを解決していくこともできたらと考える。

(4) 研究の方法・内容

ア 対象生徒

第3学年普通科理系生徒 1 学級

イ 実施日程

平成23年2月8日（火）2限

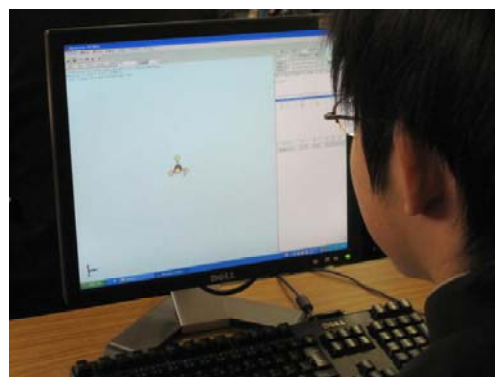
ウ 実施場所

本校 コンピュータ室

エ 内容

Winmostar による化学計算

- ・各パソコンへのソフトの導入
- ・初期画面の見方
- ・分子の構築法
- ・Set upの方法
- ・構造最適化
- ・結果の読み取り方
(結合距離、結合角、生成熱、結合次数、原子価など)
- ・各自で調べたい物質についての検討



Winmostar に取り組む

(5) 検証（結果と反省）

短い時間ではあったが、生徒の反応は良く、取組は良好であった。割と速く操作できる生徒が多かったが、中には不慣れのためか、ゆっくりとしたペースで操作する生徒も見かけた。操作の速い生徒は、配付したプリントを見て先にどんどんと進めていた。また、自ら分子を構築している生徒もおり、興味をもって取り組んでいた。

ア 講義後の生徒の感想から

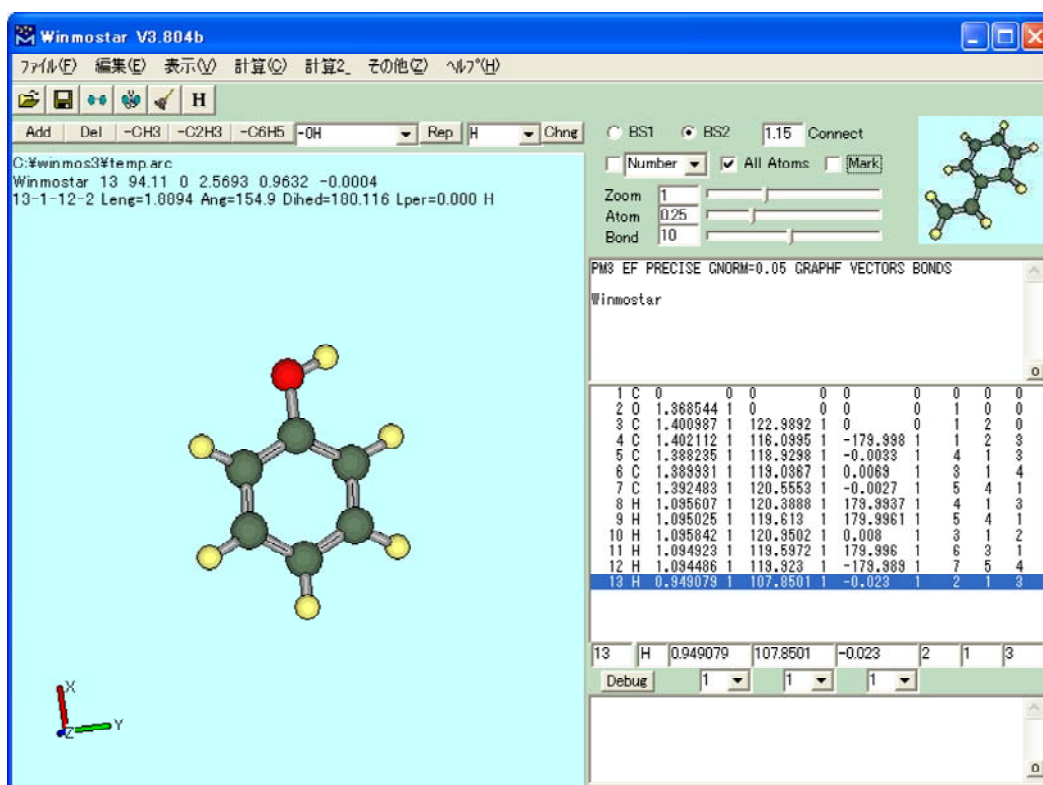
- 全体として、楽しかった、もっとやってみたいという感想が目立った。
- ・分子の形や結合距離がわかり、また自分で簡単に分子を作れて楽しかった。
- ・分子の立体構造がよくわかった。
- ・分子の極性に対称性があったり、配向性を判断できるのはすばらしい。
- ・サリドマイドを作ってみたかった。
- ・複雑な分子の構造を知るのに便利だと思った。

イ 今後の特別研究に向けて

今回は、時間的な制約から十分な演習ができなかったが、現在本校にあるハードで、不具合なく演習できることがわかった。

パソコン世代でパソコンの操作に慣れた生徒が多く、スムーズに行うことができるが、一方で、パソコンにあまり触れていない生徒との差が大きくなることが予想される。チームティーチングなどでカバーする必要がある。

分子の構造を含め、いろいろな計算をさせ、その結果を検証するには、より多くの時間を要する。生徒に、MOPACの操作に慣れさせ、計算結果をどのように解釈するのか。また、こちらの指示する物質だけでなく、生徒各自が計算させたい物質もパソコン上で自らの手で設計し、その結果を解釈できるように、企画・立案したい。



Winmostar でフェノールを構造最適化した画面