

## 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）

コンピュータを用いることにより、視覚的にも立体構造が見やすく、結合距離、結合角、生成熱、結合次数、原子価などの情報容易に得られる。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考える。

#### (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、昨年度から「Winmostar」を用い実施している。

#### (3) 仮説（ねらい、目標）

各家庭によってパソコンに関する環境は異なるが、多くの生徒は、インターネットでの検索や動画の閲覧など多少なりともパソコン操作には慣れていると考えられる。

有機化学の反応での「なぜ？」をパソコンを使って、計算化学の分野からアプローチし、理論的な観点からも有機化学反応の必然性を知らせる機会とした。

#### (4) 研究の方法・内容

- ア 対象生徒 第3学年普通科理系生徒 5学級  
イ 実施日 平成23年7月上旬～中旬 各学級2時間  
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）

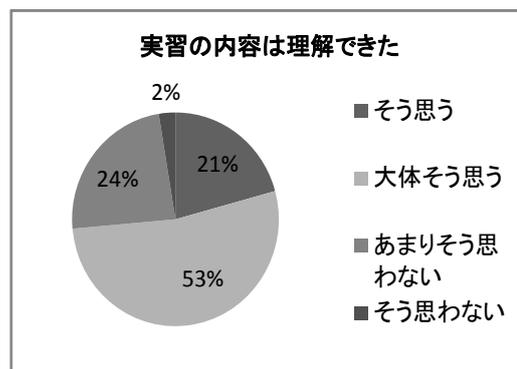
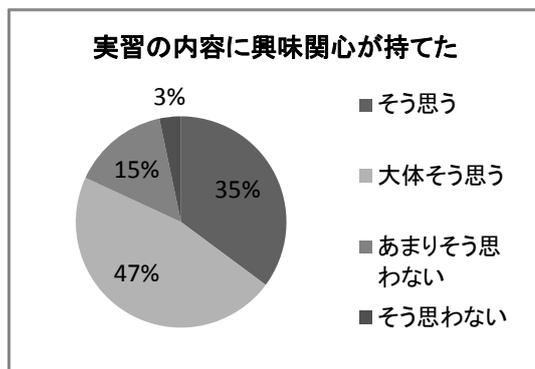
- ・各自の課題の設定と演算



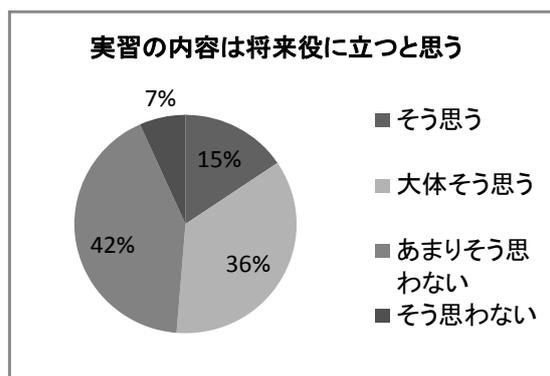
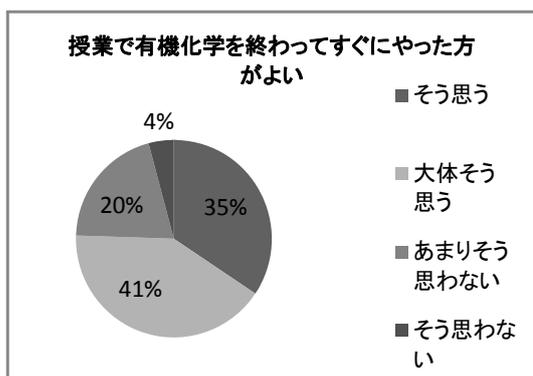
Winmostarに取り組む

#### (5) 検証（結果と反省）

##### ア アンケートから



実習の内容に興味・関心が持てたかという問いには「そう思う」「大体そう思う」が全体の8割と興味・関心を持たせる教材としては適していると言えた。一方で、理解度に関しては興味・関心には劣る結果となった。また、将来役に立つかという問いには肯定的意見と否定的意見がほぼ同数であった。実施時期については有機化学学習後すぐの方が良いという結果だった。これらの結果を踏まえ来年度の改善に取り組みたい。

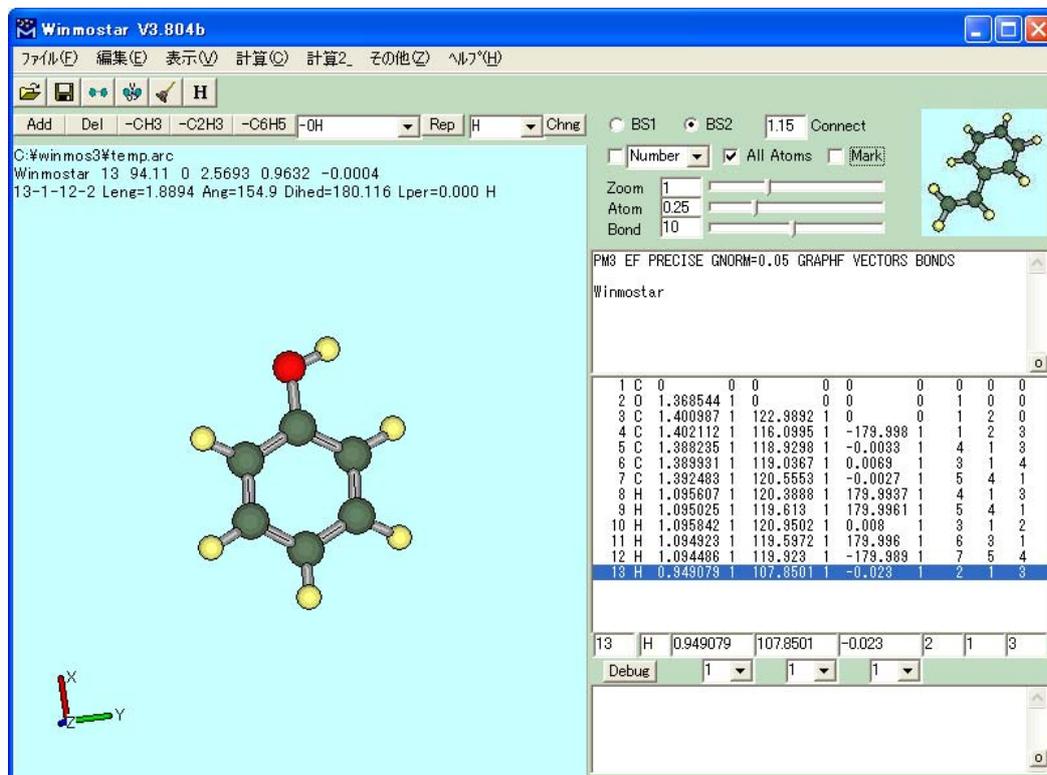


#### イ 生徒の感想から

- ・有機の授業のときにやったらよかった。
- ・パソコンの使い方が分かりにくい。
- ・分子の構造を可視化できて理解しやすかった。
- ・新しい話題で面白かった。

#### ウ 検証と今後に向けて

- ・パソコンの操作で戸惑う生徒から、結果の解釈の仕方を尋ねる生徒までさまざまであった。ティームティーチングなど検討し、与えた個々の課題をゆっくりとしたペースで結果の解釈の仕方まで確認すると理解・満足の程度が高くなったと考えられる。
- ・一人1台ずつパソコンを割り当てることができたが、日によっては、不調のパソコンも出て、一人1台ずつ割り当てることができないこともあった。このことも踏まえると2～3人ぐらいの小グループでの演習ならば、お互いに教え合いながら演習を進められ、効果的だったことが考えられる。
- ・反応機構よりも分子構造の視覚化に興味を持った生徒が複数いた。分子構造に重点をおいた演習も興味・関心を持たせるにはよいと思われる。



Winmostar でフェノールを構造最適化した画面

