大阪公立大学
Osaka Metropolitan University
学術情報リポジトリ

高校生のための授業

メタデータ	言語: jpn 出版者: 公開日: 2010-08-12 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 麻田, 俊雄 メールアドレス: 所属:
URL	http://hdl.handle.net/10466/10935

高校生のための授業

麻田俊雄[注1]

1. はじめに

平成9年8月22日、海南高等学校の学生を対象に午前と午後の2つのグループに分けて、本学総合情報センター第1実習室で計算機実習「コンピュータを利用したケミストリー~分子設計と分子の構造計算と~」と題した体験学習を行いました。

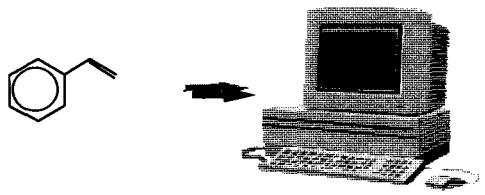
化学は大きく分けると実験・理論・計算化学の三つの柱からなりたっていると言えます。理論化学は1929年にシュレーディンガー方程式が発表されてから発展した分野であり、計算化学もコンピュータの高速化につれて今世紀半ばから成長してきた分野です。本テーマでは、新しい分野である理論化学と計算化学の概要について説明した後、学生に計算機を使った分子構造計算を体験していただきました。

1グループあたり、20人程度と小規模であったため1スパンのみを利用し、実習は

1. 計算化学の紹介
2. コンピュータの使い方([Windows-NT]の説明)
3. 分子構造の描画・表示プログラム(MOLDA[注2])の説明と実習
4. 力場計算プログラムMM3の使い方(エネルギー安定構造を求める)

の流れにそってすすめ全体で約2時間にまとめました。

高校生にとって、量子化学や量子力学は耳なれないうえ、自宅にコンピュータを持っている一部の学生を除けば計算機の使用方法にいたるまで全くの素人ですから、無意味な授業になるかも知れないという恐れもありました。しかしながら、最先端と言えないまでも計算化学に関連した知識を高校生の段階で知っておくことができれば、将来の専攻すべき進路をきめる上で貴重な体験になることは確かなので、単調な作業だけに終始しないように気をつけながら演習を進めました。最低限の予備知識を学んだうえで実習にとりかかれるように学生には、予めA4で2枚程度の予習用レジメを作成して配付しておき、高校側でも配付したレジメにそって予習時間を設けていただいた結果、演習はほぼ当初の計画どおりスムーズにすすめることができて学生には思いの他興味を持っていただけたように思います。



2. 計算機環境

第1実習室には、教員用のコンピューターの画面が大型のプロジェクターを通して教室前面にあるスクリーンに投影できるしくみになっており、各端末コンピュータにはプレゼンテーション用にMicrosoft PowerPointが入っています。学生への説明をPowerPointで行うと動画も簡単に利用することができるため高い教育効果が期待できます。しかしながら私の場合、本学でMacintoshを利用しているのですが、あいにく第1実習室にはMacが1台も設置されていないため、そのまま利用することができませんでした。PowerPointのファイル変換も試みましたが、テキスト部分の変換は可能でも動画ファイルであるQuick Timeが動作しなかったため、結局は重いデスクトップMacを実習室へ担ぎ込み利用しました。このような形でプレゼンテーションを行うことができたわけですが、第一実習室はプレゼンテーションも快適に利用できるべき実習室なので、せめて1台のMacintoshを導入していただけたならば大変助かったはずだと感じました。今後の導入に期待しています。

また、利用するコンピュータソフトのライセンスの問題があるので、本来演習に最適と思われるソフトウェアを安易に使用することができず、ライセンスフリーなソフトウェアを利用されていただくことにしました。今回はWindowsベースの分子構造設計支援プログラムとして、広島大学のYoshida Hiroshi先生が作成されたMOLDA を使用させていただき、分子構造最適化にはDOSベースのAllinger先生が作成されたMM3というFortranソースつきプログラムをWindows-NTの"DOS窓"を利用して使わせていただきまし

[注1] 大阪府立大学　総合科学部物質科学科助手

[注2] http://cssj.chem.sci.hiroshima-u.ac.jp/molda/molda.htm

た。プログラム間のインターフェイスについては、MOLDAがMM3の旧バージョンにあたるMM2の入力データ書き出しをサポートしていたので、MM3プログラムのファイル読み込み部分をわずかに変更してコンパイルの上利用できるようにしました。

3. 授業の概要

演習の手順を書いたテキストを配付して、量子化学と化学反応の理論について図とmovieをまじえたプレゼンテーションを約30分程度行い、その後、実際にテキストを読み進める上で必要となる最低限度のパソコンの使い方を説明したのち、残りの1時間強で演習していただきました。使用したテキストから操作内容に関する部分を一部抜粋して示します。

3.CとHが生成した後(図１－２), [Model]-[Group]-[Cn]メニューを用いてC6zと入力してから、リターンキーを押すことにより(右下の箱に文字が書き込まれる)、z軸に対して対称なベンゼンを作成することができる。(図１－３)。

4.[File]-[Save As]メニューを選ぶと、Molecular Nameの窓が開くので、ここでは自分の名前をいれる(例えば、Asada)。次にOKを選ぶと、ファイル名を付けて保存の窓が開くので、benzene.molとファイル名のところに入力して、保存ボタンを押す。これで、データが保存できた。

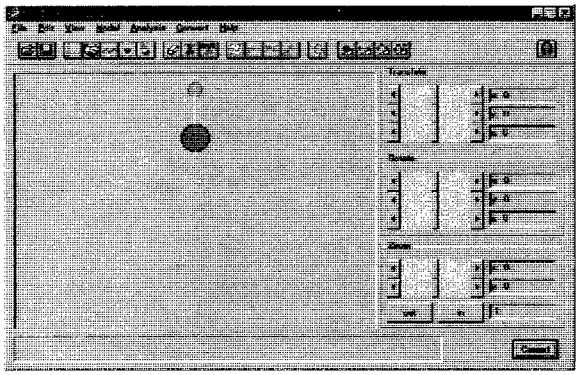


図1－2

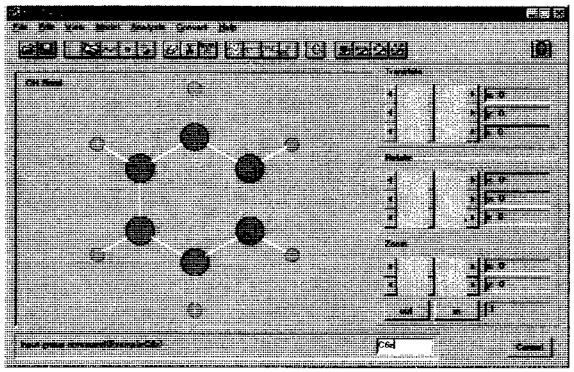


図1－3

ウィンドウをキャプチャしてから印刷し、個々の操作方法を懇切丁寧に説明したつもりでしたが、実際にはいくつかのトラブルが生じて、時間的な無駄が生じたように思います。演習中の質問で多く見受けられたのは、コンピュータのファイル操作やプリンタに関するもので、例えば上書きしてもとのファイルを削除してしまい以後の操作に支障をきたす、あるいは印刷がうまくいってスプールされているにも関わらず出力されるまでの時間に不安をおぼえて何度も印刷のコマンドを実行してしまうなどのミスが目立ちました。その結果、テキストを越えて様々な興味ある分子の構造計算を試してもらおうと考えていたのですが時間不足になったことが反省すべき点です。

4. 今後

今回行った課外学習に類した教育活動の機会は今後益々増大してくることでしょう。研究をはじめ、専門教育に力を注ぐことは大学の教員として当然のことですが、それだけにとどまらず一般の人たちにプレゼンテーションできる環境、体験できる環境を整えていくことが望まれているのではないでしょうか。そのためには、体験学習のために共通で利用できるソフトウェアを充実させていく必要性があるでしょうし、利用環境を益々便利にする必要があるでしょう。たとえばWindows搭載コンピュータが台頭していることは事実としても、プレゼンテーションを考慮して非Windowsコンピュータも小数台は導入していただきたいと思います。

また一般的な質問にはホームページを活用したFAQで対応できる環境が充実すれば、教育現場の効率があがるでしょうし、ネットワーク利用を含めたコンピュータの基礎知識を予め学習できる機会が多く設けられれば、応用演習をスムーズに行うことができて効率アップやトラブル回避に繋がるのではないかと考えます。