

# 見えない化学から 見える・イメージできる化学へ

— ODYSSEYとSpartanを用いた高専における教育実践 —

富山高等専門学校 物質化学工学科

河合 孝恵

kawai@toyama-nct.ac.jp

## 1. はじめに

1994年に本校に赴任して以来、一貫して積極的なIT活用による教育を実践してきた。また2002年から物理化学の講義を担当することとなり、この中でも理想的な授業を目指した積極的IT活用型講義を始めた。当初より物理化学で扱う分子や原子の挙動をイメージしながら学び、しっかりと身についた役立つ知識の涵養を目指し講義を行ってきたが、化学で扱う分子・原子は実際には目に見えない。また本に載っている分子等は動くことはなく、立体的に眺めることもできない。そこでこれらの問題を解決することを目的として、気体の分子運動を視覚的に理解するインタラクティブ授業教材を、プログラミング言語としてJavaを用い作成した[1]。しかし作成したものは紙の教材よりかなりイメージはつかみやすいものの、実際の分子運動から見ると、まだ完全とはいえないものであった。そこで、何か良いアプリケーションがないか探していたところ、Wavefunction社が開発したODYSSEYに出会った。初めてこのアプリケーションを知ったとき、それまで無料あるいは自作のアプリケーションを駆使して実現しようと努力してきた理想形に極めて近く、なおかつそれを超える完成度を持っており、深い感動を覚えた。それ以降、導入する機会をうかがっていたところ、2009年6月ようやく導入することができ、実際の授業での実践を開始した。本稿では、富山高専におけるWavefunction社製品を活用した授業実践について紹介する。

## 2. 環境について

富山高等専門学校は富山工業高専と富山商船高専が2009年10月に統合して誕生した高専で、本郷キャンパス(旧富山工業高専)と射水キャンパス(旧富山商船高専)に6つの学科が設置されており、化学系の物質化学工学科は本郷キャンパスにある。本郷キャンパスには3つのコンピューター室(以後、演習室と表記)があり、いずれも学科所属ではなく、英語やプログラミング教育、専門科目教育等でフル活用されている。中でもマルチメディア演習室は1998年3月にLL教室からPCを備えたマルチメディア演習室にリニューアルされ[2]、さらに2009年6月に改修され[3]、さらに使いやすさを増した(図1)。各演習室はCALLシステムとしてCHleru(チエル)社製CaLabo EX(フルデジタルCALLシステム)が導入されており、学生モニタの巡視・教員画面提示・インターネットブラウザの禁止・学生氏名表示等、コンピューターを利用した教育において必要なものはほぼすべて完備されている。PC-Clientのスペックは表1のようになっており、ODYSSEYの

分子シミュレーションやSpartanのab initio計算においてストレスを感じることは皆無である。



図1. マルチメディア演習室

表1. 本校 Client-PC 仕様

- Athlon x2 4050E-2.1GHz
- 2GB-RAM
- 80GB-HDD
- Windows Vista Business

また全クライアントの管理にはCitorix Provisioning Serverを用いたネットワークブートシステムが採用され、運用されている[4]。

## 3. 担当科目

現在担当している科目・内容・使用アプリケーションを表2に示す。

他学科 3年	化学生物基礎工学 (3週分)	化学情報リテラシー	Spartan
学科 3年通年	物理化学I	物理化学基礎	ODYSSEY
学科 4年前期	物理化学II	熱力学	ODYSSEY
学科 4年後期	物理化学III	量子化学	Spartan
学科 5年	先端化学(3週分)	計算化学基礎	Spartan・ODYSSEY
専攻科 1年	物理化学特論	反応速度論	ODYSSEY

表2. 担当科目、内容および使用アプリケーション

表2の科目に加えて、物理化学実験やプログラミング教育も担当しており、これら全てを1教員で行っている。これらの授業はすべて前述の演習室で行っている。講義資料はパワーポイントは使用せず、Wordファイルを基本とし、HTMLによる提示も行っている。これはパワーポイント画面はノートがとりにくいとの学生の意見に答えた結果で、Excelで作成したグラフ等はWeb上からダウンロードしてノートに貼り

付けられるようにしている。また学生の習熟度をリアルタイムに把握しながら行うスタイルの授業実践 [5] や、授業中の集中力の維持を目的とした、e-Learning システムやゲーム性を持たせた e-Learning 教材 [6]、インタラクティブな教材、iPhone 向け e-Learning 教材 [7] を自作し、実際の授業で実践を行ってきた。化学情報リテラシー教育 [8] として、安価なシェアウェアである Free Wheel を 1 クラス分購入し、2 年生の情報処理教育内で用いた。また Chem Draw は購入せず、アカデミックフリーの ISIS Draw を導入し、レポート作成に利用させた。その他にも分子立体表示プラグインの Chime や Jmol 等の無料アプリケーションも導入し活用してきた [9]。そこに新たに Wavefunction 社製のアプリケーションを導入し、現時点で考え得る理想的な形にほぼ近い学習環境を構築することができた。

#### 4. ODYSSEY

ODYSSEY は本格的な分子シミュレーションを備えた教育アプリケーションであり、他に類を見ないアプリケーションである。一般的な分子シミュレーションソフトは研究・開発向けであるため、販売数も望めず、価格も数十万円以上もするものがほとんどである。一方、無料アプリケーションはユーザーインターフェースが不十分で、学生が自由に利用できるような完成度にはない。それに対して、ODYSSEY は教育現場をターゲットとしており、研究者を対象としている一般的な分子シミュレーションソフトとは、まったく対照的なアプリケーションである。しかし内蔵されている分子シミュレーションエンジンは、分子間力パラメーター等の変更ができない程度で、本格的なものが内蔵されており、ユーザーインターフェースも洗練されており、初めての学生でも利用できるレベルの完成度となっている。

ODYSSEY には Student Edition と Instructor's Edition があり、Instructor's Edition には演習問題の解答が付属している。

ライセンスは Student Edition Version 2.4.1 を 50 ライセンス、Instructor's Edition を 2 ライセンス購入した。ODYSSEY は USB ドングルを用いたハードウェアキーによるライセンス管理形式となっており、USB ドングルには 10 ライセンス以上から購入できる Net 型 USB ドングルと、普通の USB ドングルがある。

今回の導入に際しては ODYSSEY Student Edition を 47 ライセンス、ODYSSEY Instructor's Edition を 1 ライセンス、そして Spartan Student Edition Version 3.1.2 を 47 ライセンスを 1 つの Net 型 USB ドングルに集約した。その Net 型 USB ドングルを本校のサーバー室に設置した Windows Server に刺し、運用を行った。ODYSSEY はアプリケーションの同時起動数を Net 型 USB ドングルを刺したライセンスサーバーで管理するため、本校の 3 教室分 約 150 台の演習室端末全てに ODYSSEY Student Edition をインストールしている。本校の演習室端末はディスクイメージ配布による管理を行っているため、このようなライセンス形式は本校の運用に適している。3 つの演習室の全ての提示用 PC および筆者教員室の PC には ODYSSEY Instructor's Edition も同時にインストールして、Net 型 USB ドングルを刺したライセンスサーバーで管理している。学内ネットに接続できない環境、すなわち学外でのプレゼンテーションや、学内ネットに接続せず教室で提示する

等のシチュエーションを想定して、普通の USB ドングル版の ODYSSEY Student Edition を 3 ライセンス (他の教員使用分も含む)、ODYSSEY Instructor's Edition を 1 ライセンス準備した。

図 2 に ODYSSEY Instructor's Edition の起動メニュー画面を示す。起動メニュー画面は Student Edition も全く同じである。ODYSSEY は日本語化されているため、英語が苦手な学生でも、問題なく利用することができる。主に使用するのは「計算機実験」であり、対象となる物質が特定されている場合は、「分子保管庫」を利用する場合もある。



図 2. ODYSSEY Student Edition の起動メニュー画面

図 3 に「計算機実験」のメニュー画面を示す。全部で 77 項目の実験があり、「化学物質」の項目では一般的な物質の状態等の基礎項目を扱い、「原子と分子」の項目では、分子動力学ではなく、同社の Spartan 同様のエンジンを使用した原子軌道・分子軌道の可視化による学習が行える。「液体と固体」の項目の中には、立方結晶格子や最密充填構造等の結晶構造について、教科書等の紙媒体では体験できない、コンピューターグラフィックスを用いたインタラクティブな学習が行える。さらに「遷移金属錯体」では、金属錯体の構造が、「生化学」ではタンパク質構造や DNA の構造等について学べる。このように ODYSSEY は、物理化学の分野だけにとどまらず、有機化学・無機化学・材料化学・生化学等幅広い分野での利用が可能なアプリケーションとなっている。

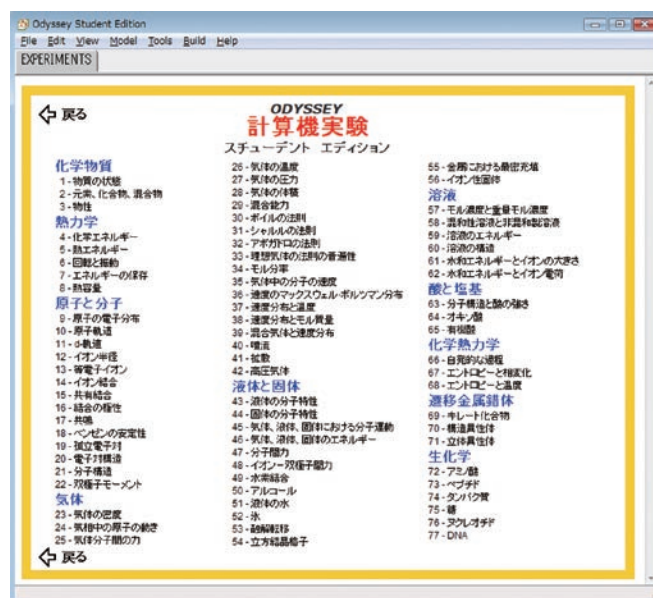


図 3. 「計算機実験」のメニュー画面

図 4 に「分子保管庫」のメニュー画面を示す。元素単体から、無機化学・有機化学・生化学まで幅広い分野にわたって、モデルが準備されている。



図 4. 「分子保管庫」のメニュー画面

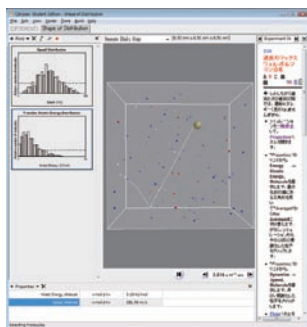


図 5 に「計算機実験」の中の「気体」の項目のうちの「36. 速度のマクスウェル-ボルツマン分布」の演習画面を示す。

図 5. 「36. 速度のマクスウェル-ボルツマン分布」の演習画面

ODYSSEY では画面の右側に詳細な操作説明が表示され、ここに記述されている指示に従って、ODYSSEY を操作していただくだけで各種シミュレーションが可能のように工夫されている。そのため講義でいくつかの項目について、実際に演習を交えて教えるだけで、後は学生自身で自由に演習を行うことも可能である。中央には実際に動いているシミュレーション画面が表示されており、これを眺めていると、実際の原子や分子の運動の様子が手に取るようにわかる。このシミュレーション画面も、様々な表示オプションが用意されており、速度別に色分けしたり、軌跡を表示したり、水素結合を表示したりすることができる。左側にはグラフを表示することができ、系全体の速度やエネルギーの分布をリアルタイムに表示したり、系の温度を変化させた場合の他の状態変数の変化をプロットしたりすることができる。下側には系の温度や圧力等の状態変数を表示することができ、スライダーを操作し、その値を変化させたりすることができる。そのため、系の温度を高くしていくと速度分布がどのように変化するか、分子の運動がどのように変化するかを、コンピューターグラフィックスを駆使した画面を通じて知ることができ、まさにコンピューター上で実験を行うことができる。一度 ODYSSEY を学習した好奇心旺盛な学生は、授業が終わった後や休憩時間も、自ら積極的に ODYSSEY で演習を行っている状況である。

## 5. Spartan

これまで Free Wheel というシェアウェアを用いて分子モデリング演習を行ってきた。しかし FreeWheel は分子力学しか備えていなかったため、分子軌道の可視化や、分子軌道計算から導出される物性等は求めることができず、その利用は限定的であった。個人的に Fujitsu 社製の WinMOPAC を購入し、講義資料等の作成を行ってきたが、予算措置が行われなかったため、導入アプリケーションの選定を行った。

ChemBio3D はメジャーではあるが、価格が高価であり、なおかつ固定端末ライセンスであるため、ディスクイメージ配布による本校の演習室端末管理の場合、このようなライセンス形式は非常に運用がしにくくなる。また ChemBio3D は分子軌道計算エンジンを備えておらず、代表的な半経験的分子軌道法プログラムパッケージである MOPAC を別途ダウンロード（教育機関は無料）する形式をとっている。

富士通社製の計算化学アプリケーションとして SCIGRESS MO Compact (以前は WinMOPA) があり、このアプリケーションは MOPAC エンジンを内蔵している。WinMOPAC の初期のバージョンの頃は手頃な値段であったが、SCIGRESS MO Compact は高価であり導入しなかった。

アカデミックフリーのアプリケーションとして日本人研究者が開発した Winmostar があり、一般的な MOPAC を用いて分子軌道計算ができ、分子軌道の可視化も可能である。良いソフトであるが、ユーザーインターフェースに多少クセがあるため導入しなかった。

Wavefunction 社製の Spartan は分子力学・半経験的分子軌道法・非経験的分子軌道法を備えており、このアプリケーションだけで分子モデリングから、分子軌道法計算、解析結果の表示まで、全ての作業が可能となっている。Wavefunction 社製品は研究向けの製品だけではなく、エントリークラスの製品は教育での使用も視野に入れて開発されているため、コストパフォーマンスも高く、本格的な分子軌道計算エンジンも含んでおり、教育で使用できるサンプルも多く付属しており、ライセンスもドングルによるネットワーク管理により自由度が高くなっていることから採用した。

Spartan には強力な分子モデリング機能が備わっており、一般的な有機分子だけでなく、無機化合物や、アミノ酸等の分子作成機能を有している。

また分子力学エンジンによる構造緩和も容易にできためフラレン分子等の複雑な分子も比較的容易にモデリングすることができる。

Spartan において最も多用する機能は、各種分子の分子軌道法計算による解析およびその結果の表示である。Spartan は分子力学法、半経験的分子軌道法、非経験的分子軌道法を備えており、要求される解析精度により計算方法を使い分けることができるが、単に分子軌道の可視化であれば半経験的分子軌道法で十分であるため、授業中の演習では半経験的分子軌道法を用いることが一番多い。計算化学の演習では、各種計算方法による計算結果と実験から得られた物性値とを比較させる演習を取り入れることにより、計算手法の違いによる精度の差について考察させている。Spartan の分子軌道法計算による解析結果の表示のうち、最も多用するのが、分子軌道表示機能および全電子密度面表示機能である。これらの表示方法には不透過(図 5)、透過、メッシュ、

ドットがあり、分子軌道や全電子密度面を主体として表示したい場合は不透過を選択し、分子の立体構造もいっしょに表示したい場合は、透過やメッシュを選ぶこととなる。ドットは見にくいいため、あまり利用することはない。

また Spartan には各配座でのエネルギー変化をグラフ化する機能があり、グラフ上の各点での配座も同時に表示され、アニメーションとして表現することも可能となっている(図 6)。そのためどのような構造が安定か不安定かについて容易にかつ興味を持って正確なイメージをつかむことができる。

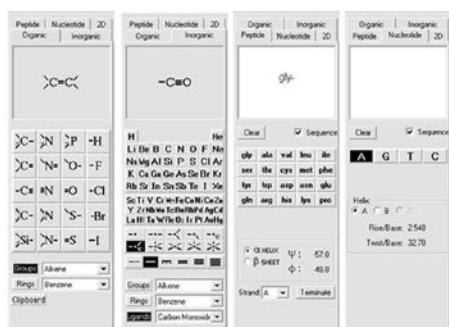


図 6. Spartan の分子モデリングメニュー画面

さらに赤外吸収スペクトル(図 7) もプロットすることができ、各吸収スペクトルに対応する、分子の振動モードをリアル

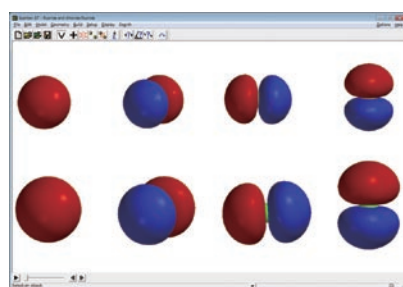


図 7. Spartan の原子軌道表示(不透過)画面

なアニメーションにより表現することができ、機器分析の分野においても役立つ機能を備えている。

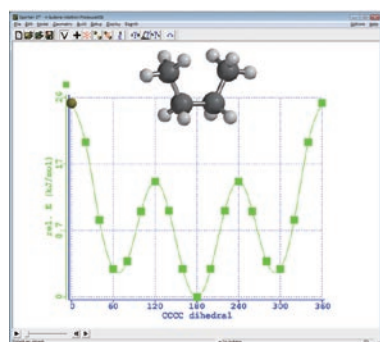
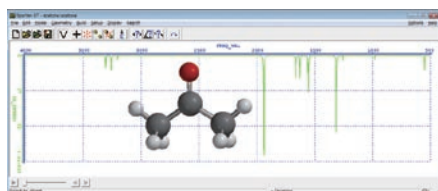


図 8. Spartan による回転障壁のグラフ化

図 9. Spartan による赤外吸収スペクトル描画



## 6. おわりに

現在、授業の様々な場面で ODYSSEY や Spartan を用い、学生に演習させ、極めて高い学習効果を発揮している。3 年生から始まる物理化学 I における物理化学の導入では

ODYSSEY を、4 年生後期から始まる物理化学 III で学ぶ、量子力学基礎において分子軌道の可視化、5 年生での先端化学における計算化学演習において分子軌道法による解析に Spartan を用いている。これらの演習を通じて、身近な PC が単なるワープロだけでなく、化学反応の予測や実験結果の理解に大いに役立つことを体験させ、理解を促している。

また 2009 年度、中学生向けの体験入学を担当した際、この ODYSSEY を参加中学生 198 名に演習させた結果(図 6)、83% もの高い満足度が得られ、非常に好評であった。



今後 ODYSSEY や Spartan の、より効果的な授業への導入方法について詳細に検討し、さらに学習効果を高めていきたいと考えている。

図 10. 2009 年度、中学生向けの体験入学の様子

## 7. 参考文献

- [1] 河合孝恵, IT を効果的に用いる物理化学教育の実践、平成 22 年度工学・工業教育研究講演会講演論文集、p.448-449 (2010)
- [2] 河合孝恵、立野彰、土田敏雄、語学および情報処理教育を統合したマルチメディア演習室の構築と運用、情報処理教育研究発表会論文集第 18 号、p.128-131 (1998)
- [3] 立野彰、増山圭一、土田敏雄、坂本佳紀、河合孝恵、椎名徹、コンピューター支援学習環境の構築 - より授業で使いやすいシステムを求めて -、情報処理教育研究発表会論文集第 29 号、p.271-274 (2009)
- [4] 坂本佳紀、立野彰、椎名徹、金子慎一郎、石黒農、中島栄次、河合孝恵、土田敏雄、富山高専におけるネットワークと仮想化を利用した教育支援システムの更新報告、情報処理教育研究発表会論文集第 29 号、p.267-270 (2009)
- [5] 河合孝恵、非択一型の e-Learning システムの構築およびリアルタイムに学生習熟度を把握しながら進める新しい形の講義の実践、論文集「高専教育」、第 33 号 p.97-102 (2010)
- [6] 河合孝恵、理想的な授業を目指した IT 活用型授業の実践 国立高等専門学校機構教育教員研究集会研究論文、101-104 (2010)
- [7] 河合孝恵、携帯型情報端末上での e-Learning システムの構築、情報処理教育研究発表会論文集第 30 号、p.164-167 (2010)
- [8] 河合孝恵、化学系情報リテラシーの実践、情報処理教育研究発表会論文集第 29 号、p.167-170 (2009)
- [9] 河合孝恵、分子 Viewer を利用した教育環境の構築、情報処理教育研究発表会論文集第 30 号、p.156-159 (2010)