

マルチメディア情報を含んだ電子教材の開発

情報処理センター 湊 敏

本研究では、マルチメディア情報を含んだ電子教材の開発を試みた。教材のテーマとして、マルチメディア情報を有効に活用できる化学を選んだ。マルチメディア情報として、分子構造の画像およびその3次元構造、分子軌道の3次元図、分子振動の動画を選んだ。これらのマルチメディア情報に基づいて化学現象を説明する教材を作成した。その結果、電子教材を利用することにより、これまで説明が困難であった、分子構造や分子軌道、分子振動の説明が容易になることが分かった。

近年よく、e-learning や電子教材といった言葉をよく耳にするようになった。これは、コンピュータのハードウェアやソフトウェアの進歩と通信技術の進歩によるものと思われる。コンピュータの進歩により、これまでパソコンでは不可能であった動画の作成や3次元の擬似的体験が可能になった。また、通信技術の進歩によりインターネットを利用した音声・動画の配信・受信が一般家庭でも可能になった。

本研究では、e-learning でも活用できるマルチメディア情報を含んだ電子教材の作成を行った。この電子教材は、これまでの文字及び静止画像のみの教材と比較してどのような利点があるかを検討した。教材のテーマとしては、化学の分野の原子・分子の世界を選んだ。この原子・分子の世界は現実には人間の目で見ることにはできない。このため原子・分子が引き起こす種々の化学現象を理解することは非常に困難である。この目に見えない世界をコンピュータの助けにより視覚化し、仮想的な原子・分子の世界を目で見ることができるようにし、化学現象をより分かりやすく解説できる教材の作成を行った。

(1) 電子教材作成のためのマルチメディア情報の準備

分子構造および分子の振動モードは、Gaussian98¹⁾を用いて求めた。分子構造および振動モードは、B3LYP/6-31G(d)法で求めた。分子軌道は、B3LYP/6-31G(d)法で求められた構造について、RHF/STO-3G法で求めた。Gaussian98によって求められた分子構造の数値データや分子軌道は、GaussView 3.0²⁾を用いて視覚化した。これらのプログラムにより選られたデータから分子の3次元構造や振動のアニメーションを作成した。

(2) 電子教材について

分子構造：

分子構造については、ブタジエン分子およびその置換体である2, 3-ジメチルブタジエ

ン分子の異性体についての解説を作成した。これらの分子は、*c i s*体と*t r a n s*体の2つの異性体をもっている。これらの分子構造は、一般的な教科書では図1のような分子式で表わされている。この記述方法では、すべての構造においてブタジエン骨格を形成する4つの炭素原子が同一平面上にあるように見えてしまう。ところが現実の分子構造では、*c i s*体では平面からのずれが生じている。とくに2, 3-ジメチルブタジエンではそのずれが非常に大きい。

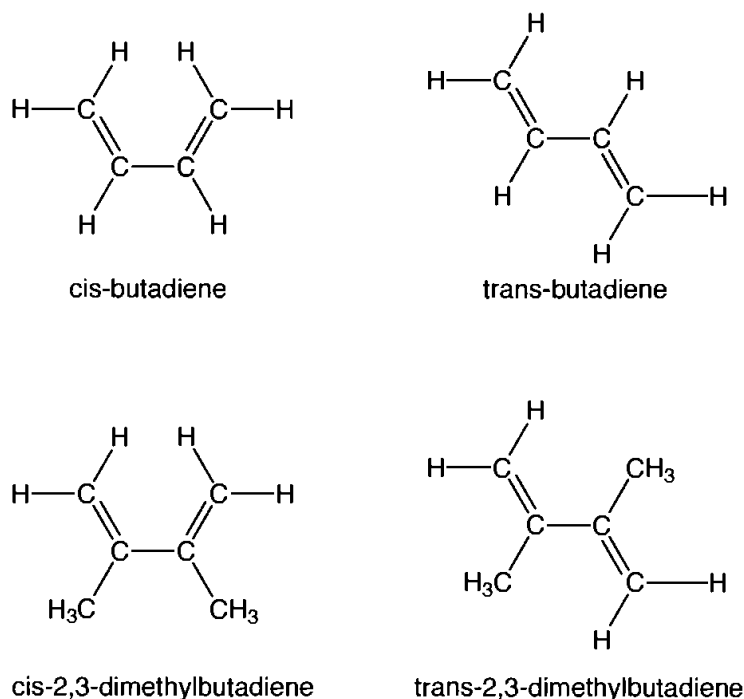


図1. ブタジエン分子およびその置換体である2, 3-ジメチルブタジエン分子の構造

図2 aには、分子軌道計算から求められたブタジエンの*c i s*体と*t r a n s*体の分子構造を示した。

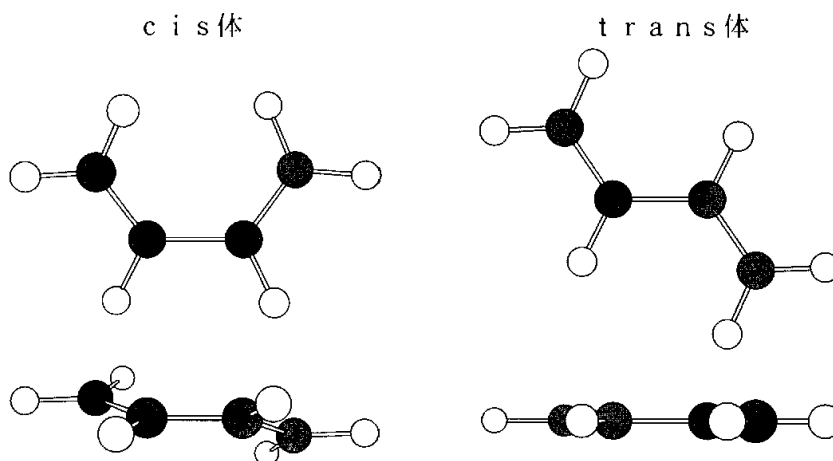


図2 a. ブタジエンの分子構造

灰色丸は炭素原子を、白丸は水素原子を表わす。

図2 aの上段には、図1と同様にブタジエン分子平面の真上から見た図を、下段にはブタジエン分子の平面内真横から見た図を示した。この図から、*t r a n s*体のブタジエン骨格をつくる炭素原子4つは同一平面上にあるが、*c i s*体のそれらは平面からずれていることが分かる。この理由は、*c i s*体の場合、2つの末端炭素に結合している水素原子が接近し、その立体反撥を避けるためと考えられる。

図2 bには、分子軌道計算から求められた2, 3-ジメチルブタジエンの*c i s*体と*t r a n s*体の分子構造を示した。

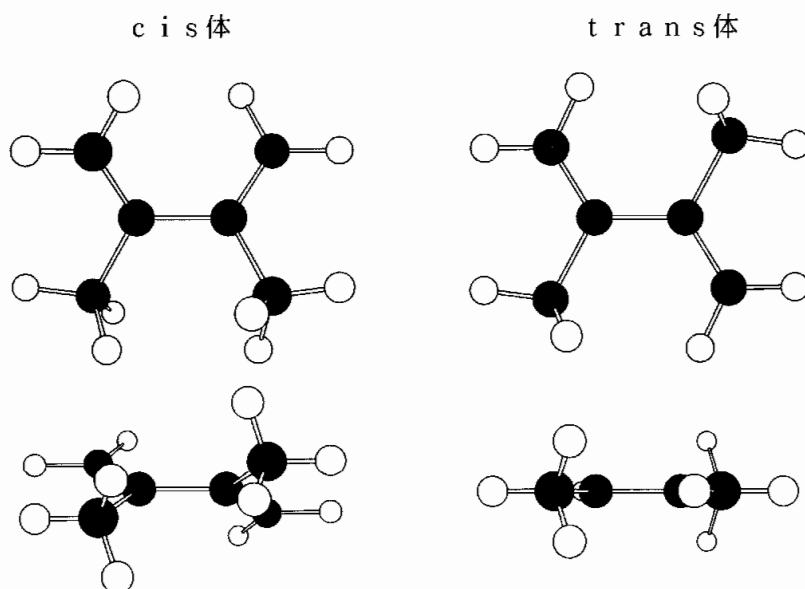


図2 b. 2, 3-ジメチルブタジエンの分子構造

灰色丸は炭素原子を、白丸は水素原子を表わす。

図2 bの上段には、図1と同様に2, 3-ジメチルブタジエン分子平面の真上から見た図を、下段には2, 3-ジメチルブタジエン分子の平面内真横から見た図を示した。この図から、*t r a n s*体のブタジエン骨格をつくる炭素原子4つは同一平面上にあるが、*c i s*体のそれらはブタジエンと比較して平面から大きくずれていることが分かる。この理由は、2, 3-位に結合したメチル基同士の立体反撥のためと考えられる。また、*t r a n s*体においては、ブタジエン骨格の末端炭素と結合している水素原子とメチル基の立体反撥が考えられるが、メチル基が回転することによりこの立体反撥を避けていることが分かる。

以上のことから分子構造を理解するには、分子構造の3次元構造の視覚化は非常に有効であることが分かった。

分子軌道：

分子軌道の視覚化を行うことにより、ナフタレンのニトロ化の反応を解説した。ベンゼン置換体のニトロ化の反応位置については、有機電子論で説明することができる。図3に

ニトロニウムイオン (NO_2^+) の攻撃位置を示した。ニトロ化においては、陽性のニトロニウムイオンがベンゼン置換体を攻撃する。電子受容性の置換基をもったニトロベンゼンでは、オルト位およびパラ位の炭素が陽性、 $\delta+$ 、になるため、ニトロニウムイオンはそれを避けるためメタ位を攻撃する。一方、電子供与性の置換基をもったフェノールでは、オルト位およびパラ位の炭素が陰性、 $\delta-$ 、になるため、ニトロニウムイオンは陰性のオルト位またはパラ位を攻撃する。ところが、置換基をもっていないナフタレンの場合、その攻撃位置が予測できない。

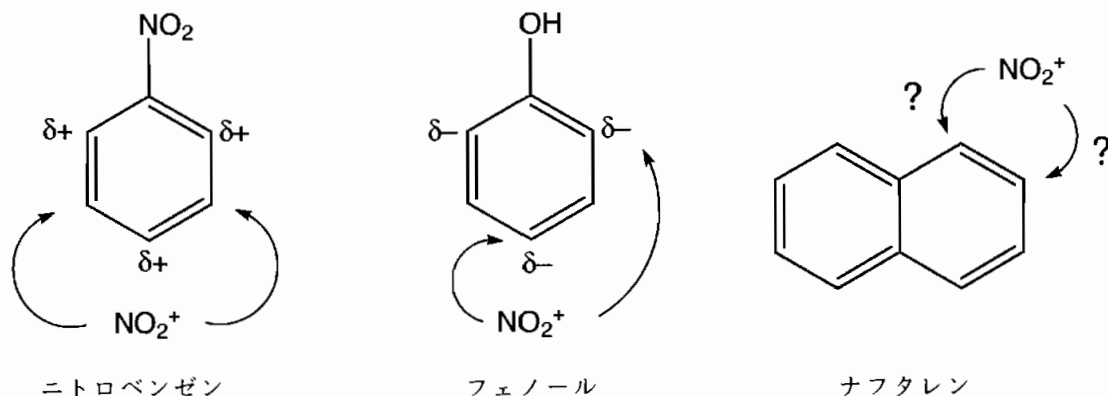


図3. ベンゼン置換体とナフタレンのニトロ化の反応位置

このためナフタレンのニトロ化の起こる場所を予測するためにはフロンティア軌道論³⁾が用いられる。フロンティア軌道論によると陽性のニトロニウムイオンが攻撃試薬である場合は、反応基質であるナフタレンのHOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) の形状を調べればよい。図4にナフタレンのHOMOの等電子密度線を示した。ナフタレン分子は平面であるため、ナフタレン平面から2オングストローム離れた平面上のHOMOの等電子密度が示してある。実線部は正の領域で、破線部は負の領域である。等高線の内部に行くほど電子密度の値は大きくなる。ニトロニウムイオンは、電子密度の大きいところを攻撃するので、ニトロ化は図4の α 位で起こることが予測できる。この結果は、実験と一致している。

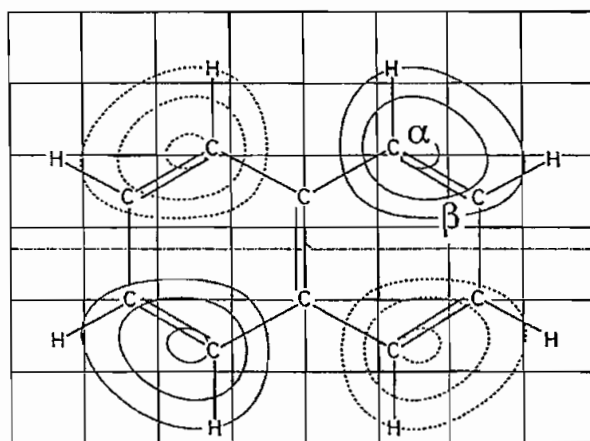


図4. ナフタレンのHOMOの等電子密度

ところが、この図では分子軌道の概念を理解することは困難である。分子軌道は線で表わされものではない。分子軌道は、空間的な広がりや正負の位相 (正と負の領域) をもったものである。

この軌道の空間的な広がりや正負の位相を表わすために、図5にナフタレンのHOMOの3次元図を示した。図5の左側にはHOMOをナフタレン平面の真上から見た図を、右側には斜め上方から見た図を示した。この図から、HOMOは空間的な広がりを持っていることがよく理解できる。また、空間的な広がりや表わすアレイ体からニトロニウムイオンの攻撃位置も予測できる。ニトロニウムイオンはアレイ体の広がりやの大きな位置を攻撃する。すなわち、ニトロニウムイオンは図4で示されたナフタレンの α 位を攻撃する。

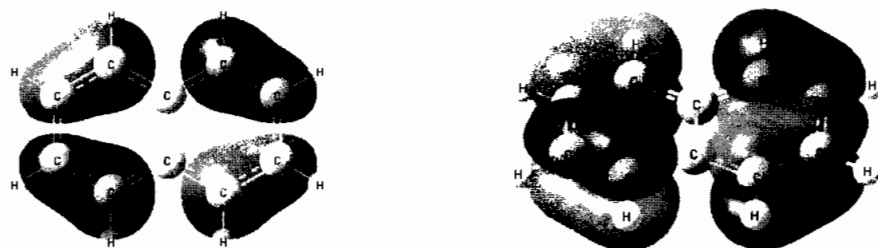


図5. ナフタレンのHOMOの3次元図（本来はカラー表示）

左図の右上アレイ体は褐色で正の領域を表わす（図4では実線部）。
左図の左上アレイ体は緑色で負の領域を表わす（図4では破線部）。

以上のことから、分子軌道の3次元的な視覚化は、分子軌道の概念を理解する上で非常に有効であることが分かった。

分子振動のアニメーション：

分子振動のアニメーションとして、水分子の偏角振動を選んだ。図6に分子軌道計算から得られた振動モードを示した。左側には通常の振動モードの図を、右側にはアニメーションを作成したときの図の1部を重ねて表示した。

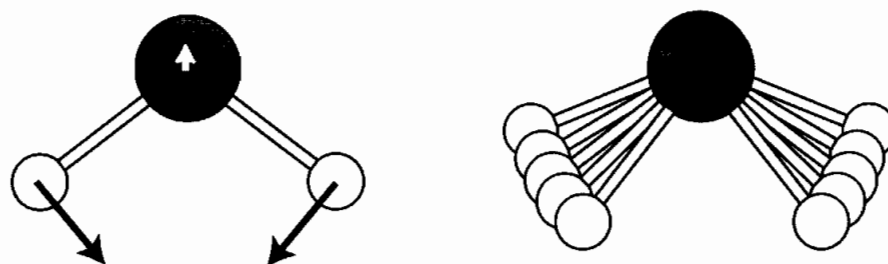


図6. 水分子の偏角振動

灰色丸は酸素原子を、白丸は水素原子を表わす。

分子はその最安定化構造を基準にして振動している。通常分子の振動は、分子の最安定化構造に振動の変位を表わす矢印を書き加えることによって、図6の左図のように表わされる。この水分子の偏角振動の場合、2つの水素原子が接近し、酸素原子が上方に移動する。しかし、振動は逆向きのもの、すなわち2つの水素原子が離れ、酸素原子が下方に移

動するものもある。この様子を静止画で表わすことは困難である。一方、振動をアニメーション化すれば理解しやすい。図6の右側にはアニメーションの様子を示した。この図には、5枚の絵を重ねて表示してある。ちょうど真ん中の図が、水分子の最安定構造である。

(3) まとめ

本研究では、マルチメディア情報を含んだ電子教材の開発を行った。マルチメディア情報を利用することにより、これまでの静止画（プリント、OHP等）だけでは表現することが困難であったものが表現できることが分かった。例えば、分子構造を3次元表示するとこれまでの分子式では把握することが困難であった立体構造が理解でき、また分子構造を変形させる原因も説明できることが分かった。分子軌道の3次元表示では、分子軌道は地球や月の軌道のように線で表わされるものでなく、空間的な広がりを持つたものであることを容易に説明できることが分かった。また、分子軌道の空間的な広がり的大小で反応基質の反応位置も説明できることが分かった。さらに、分子振動のアニメーション化は振動そのものを表示できるので、分子振動を理解する上では非常に有効な方法であることが分かった。本研究では教材のテーマを化学に焦点を絞ったが、他の分野においてもマルチメディア情報を教材に有効に活用する方法の開発が望まれる。

謝辞

本研究は、平成15年奈良大学研究助成の補助を受けて行った。

文献

- 1) Gaussian 98, Revision A.7, Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Zakrzewski, V. G.; Montgomery, Jr., J. A.; Stratmann, R. E.; Burant, J. C.; Dapprich, S.; Millam, J. M.; Daniels, A. D.; Kudin, K. N.; Strain, M. C.; Farkas, O.; Tomasi, J.; Barone, V.; Cossi, M.; Cammi, R.; Mennucci, B.; Pomelli, C.; Adamo, C.; Clifford, S.; Ochterski, J.; Petersson, G. A.; Ayala, P. Y.; Cui, Q.; Morokuma, K.; Malick, D. K.; Rabuck, A. D.; Raghavachari, K.; Foresman, J. B.; Cioslowski, J.; Ortiz, J. V.; Baboul, A. G.; Stefanov, B. B.; Liu, G.; Liashenko, A.; Piskorz, P.; Komaromi, I.; Gomperts, R.; Martin, R. L.; Fox, D. J.; Keith, T.; Al-Laham, M. A.; Peng, C. Y.; Nanayakkara, A.; Gonzalez, C.; Challacombe, M.; Gill, P. M. W.; Johnson, B.; Chen, W.; Wong, M. W.; Andres, J. L.; Gonzalez, C.; Head-Gordon, M.; Replogle, E. S. and Pople, J. A., Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1998.
- 2) GaussView 3.0, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA USA, 2003.
- 3) Fukui, K. *Molecular Orbitals in Chemistry, Physics and Biology*; Löwdin, P.-O.; Pullman, B. Ed.; Academic Press: New York, 1964.