

分子模型とコンピュータ演習を援用してシクロヘキサン類の配座異性を捉える学習プログラムの開発

(広島大院人間社会科学) ○廣田 倫太郎、網本 貴一

A Learning Program to Recognize the Conformational Isomerism of Cyclohexane Derivatives by Using Molecular Models and Computational Exercises (*Graduate School of Humanities and Social Sciences, Hiroshima University*)) ○Rintaro Hirota, Kiichi Amimoto

This study was designed a learning program in which provide students with an understanding of the conformers of cyclohexane derivatives and their transformations using molecular models and computational exercises. In this program, students construct the structures of the conformers of cyclohexane, explore the process of their conformational transformations using molecular models by hand, and then perform structural optimization and energy calculations for each conformer using computational exercises. Through a series of the program, students are expected to grasp the concepts of stable structures, transition states, and activation energies in the conformational transformation of cyclohexane.

Keywords : Chemical Education, Molecular Models, Computational Exercises, Cyclohexane, Conformer

高等学校化学「有機化合物」の単元において、生徒はシクロアルカンの構造と変化、中でもシクロヘキサンの配座異性とその変換を学習する。本研究では、シクロヘキサン類の配座異性体とその変換を、分子模型とコンピュータ演習を用いて理解させる学習プログラムを検討した。

この学習プログラムは、分子模型を扱う段階とコンピュータ演習を行う段階の、2つから構成される。生徒ははじめに分子模型を用いて、エタンやブタンを素材として立体配座の基礎を習得した後、シクロヘキサンの配座変換の過程や安定構造・遷移構造を学習する。その後コンピュータ演習に移り、それぞれの配座異性体の最適構造の導出とエネルギー計算を行う。さらに、一置換シクロヘキサンであるメチルシクロヘキサンの配座変換（図1左）について、これまでの知識や技能を活用させる発展的な探究に取り組ませる。有機化合物の構造に関する段階的な演習にエネルギー図（図1右）を作成する学習活動を組み合わせることで、配座変換における安定構造や遷移状態に加えて配座変換の活性化エネルギーに関する概念を理解できるようになることが期待される。

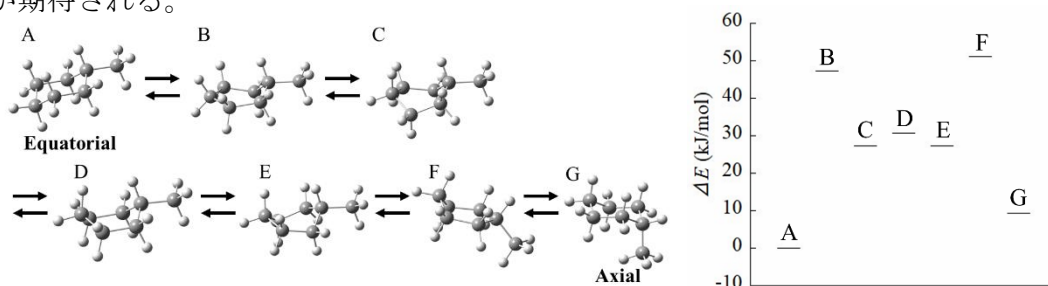


図1. メチルシクロヘキサンの配座変換と計算により得られたエネルギー図