

研究課題 (テーマ)		理論計算の簡便化で促進する有機化学反応の直観的理解	
研究者	所属学科等	職	氏 名
代表者	生物工学科	講師	深谷圭介
研究結果の概要			
本教育プログラムでは、有機化学反応に対する理解を深めることを目的として、理論計算に基づく分子のより正確な表現を教育に取り入れ、さらには反応メカニズムの直観的な理解を促進する教材資源の開発と実施を行った。 一般に有機化学教育では、分子を平面的な構造式として書き表し、反応中の電子の移動を矢印で示す。これは教育・研究現場において長年定着してきた優れた表現手法である一方で、本来三次元的な広がりのある有機分子の立体的な要素は、平面図に落とし込む過程でその多くが省略され、重要な情報が失われることも少なくない。そのため特に初学者にとっては、有機化合物の空間的な理解や反応選択性の背景にある構造的要因を直観的に捉えることが難しいという課題がある。 そこで、本教育プログラムでは、学生にも扱いやすい簡便な理論計算手法を用い、実際の反応の遷移状態を三次元的に可視化し、そのエネルギープロファイルを提示することで、有機反応の空間的な側面を理解しやすくする教材の開発を試みた。対象となる反応の背景や基本的な反応様式を学習した上で、量子化学計算ソフトを用いて遷移状態を取得し、反応経路の解析を行った。次に、得られた計算結果をもとに、反応座標に沿った分子の三次元構造モデルを視覚的に提示した。 学生はこれらを参照しながら、反応の進行に伴う構造変化やエネルギー障壁を直観的に理解することができた。また、実際に反応を実施し、生成物の確認や選択性の比較を通じて、計算結果と実験結果との整合性を考察する課題にも取り組んだ。従来の模式的な説明では捉えにくかった反応の概念を、具体的な構造と数値を伴って理解できるようになった点は、本教育プログラムの大きな成果である。 さらに、講義や演習にとどまらず、一部の学生は自身の研究対象となる反応についても理論計算を試み、自主的に解析を進めるなど、教育効果が研究活動にも波及していることが確認された。このように、理論計算を融合した教育演習は、従来の教育方法では補いきれなかった有機反応の三次元的な深い理解を可能にし、学生の論理的思考力や主体的な学習意欲を育む上でも有効であることが示された。今後は、扱う反応の多様化や教材内容の段階的展開を通じて、より広範な有機化学教育への応用を目指していく予定である。			
今後の展開			
本教材は今後、学生からのフィードバックをもとに内容を拡充し、年度を超えて継続的に使用可能な教育資源として整備していく予定である。			