

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			
<p>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、理論計算および分子構造の三次元可視化を教育に活用するための環境整備を進めた。有機化学では、分子構造や反応機構を平面的な構造式で表現することが一般的であり、これは反応を簡潔に理解する上で非常に有効な方法である。一方で、実際の有機分子は三次元的な構造を有しており、立体配置や分子全体の形状が反応性や選択性に影響を与える場合も多い。そのため、平面的な構造式に加えて、分子を立体的に把握することは、有機化学反応の理解を深める上で重要である。</p> <p>本年度は、これまでの取り組みで明らかとなった可視化ソフトウェアの操作性や利用環境に関する課題を踏まえ、より簡便に分子構造を確認できる Web ベースの分子可視化環境の整備に取り組んだ。特に、専用ソフトウェアのインストールや複雑な設定を必要とせず、ブラウザ上で分子構造を表示できる仕組みを構築することで、講義・演習・研究指導において利用しやすい教材基盤の整備を進めた。分子構造を URL や QR コードを通じて共有できるようにすることで、学生が各自の端末から立体構造を確認できる教育環境の実現を目指した。</p> <p>また、理論計算によって得られる反応中間体や遷移状態構造などを、教育目的でわかりやすく提示する方法について検討した。これにより、従来の構造式だけでは理解しづらい分子の空間的な配置や反応点同士の位置関係を、視覚的に捉えやすくするための基盤を整えることができた。</p> <p>本取り組みについては、FD 研修会においても紹介し、理論計算と分子可視化を組み合わせた有機化学教育の可能性について学内で共有した。以上の取り組みにより、有機化学反応を平面的な構造式だけでなく、三次元的な分子構造やエネルギー変化と結びつけて理解するための教育基盤を前進させることができた。今後、教材内容の拡充や利用方法の改善を進めることで、学生の直観的理解と主体的な学習を支援する教育資源として発展させていく。</p>			
今後の展開			
<p>本年度整備した分子可視化環境を活用し、講義・演習・研究指導において利用可能な教材としてさらに発展させる。具体的には、学生が分子の三次元構造を確認しながら、反応機構や反応選択性について考察できる環境の整備を進める。また、対象とする反応の種類や難易度を段階的に広げることで、学習段階に応じて活用できる教育資源として継続的に改良していく。</p>			