

課題を解決する高い能力を有する若い学生の育成を目指して(1) —低学年科目における積極的コンピュータ活用を通して—

城石 英伸^{1*}, 工藤 節子¹, 雑賀 章浩², 中野 雅之¹, 大野 秀樹³

東京工業高等専門学校¹ 物質工学科, ²産業技術センター, ³物理学科

(〒193-0997 八王子市櫛田町 1220-2)

[*h-shiroishi@tokyo-ct.ac.jp](mailto:h-shiroishi@tokyo-ct.ac.jp)

Development of the Problem-Solving Ability in Students (1)

Hidenobu Shiroishi^{1*}, Setsuko Kudo¹, Akihiro Saiga², Masayuki Nakano¹, Hideki Ohno³

¹Departments of Chemical Science and Engineering, ²Industrial Science and Technology Center, ³Physics, Tokyo

National College of Technology (Kunugida 1220-2, Tokyo 193-0997, Japan)

(Received March 2, 2011; Accepted April 1, 2011)

In order to develop problem-solving abilities in students, it is important to get them to acquire a lot of means through laboratory experiments based upon understanding the theories and procedures. In this study, we introduced Computer Chemistry, which consists of safety education, molecular modeling, and numerical simulation using a freeware Maxima, in a class named Fundamental Engineering Laboratory for the first-year students. We also introduced a point system, advanced problems using Maxima and/or Excel solver and instructions for the use of software, such as Word/Writer and Excel/Calc, on the day following the experiment, in a class named Experimental Analytical Chemistry for the 2nd-year students. We also improved the content in the Information Processing I for the 2nd-year students.

Keywords: Computer Chemistry, Excel, Maxima

1. はじめに

日本は資源がなく、化石燃料や食料を輸入するために外貨を獲得しなければ、国民生活が立ちゆかない。そのために、高等教育機関は、外貨獲得に貢献できる有能な人材を日本社会に送り出さなければならぬ。しかしながら、ゆとり教育導入によって授業内容の希薄化が進行し、上位レベルの質・意欲の低下が顕著に起こってきている。このような状況が我が国の国際競争力の著しい低下をもたらすのではないかと懸念している。

インターンシップの際に、ある企業の人事部の方に伺ったところ、高専卒の人材に求めるものは、専門の基礎学力と課題を解決する能力ということであった。しかしながら、現在ごく一部の学生を除き、そのどちらも満足しているとは言い難い状況である。

著者の一人は本科5年の「電気化学」を担当しているが、表計算ソフトを使ったほうが圧倒的に早いという課題を課したところ、ほとんどすべての学生が電卓を使い、答えが合っていなかったという恐るべき状況に出くわした。情報系科目で学習した知識

を、他の科目に活用できない「縦割り」人間となってしまったのは、それを活用するトレーニングが不足しているからである。今や紙と電卓だけで科学的あるいは技術的課題を解決する時代ではない。課題を解決する高い能力を有する学生を育成するためには、高専生は手だけ動けばよいという古典的な発想を排除し、理解の上に立った実験・実習を体験させ、発展応用する手段を身につけさせていくことが重要である。発展応用に結びつける一つの手段として、コンピュータ活用を学習するというのは、その応用範囲を考えると、低学年から行うべき内容であると考えられる。

本研究では、それらの状況を鑑み、課題を解決する能力を有する若い学生の育成を目指すことを目的に、我々が取り組んできた内容について概説する。

2. 東京高専物質工学科における基礎学力の定着状況

物質工学科4年の後期における基礎学力の定着状況を定点観測テスト[1]によって2005年度から調査した結果を図1に示す。

年々さまざまな施策によって平均点が向上し基礎学力が定着しつつあることが明らかとなった。試験の詳細な内容については、以下のような濃度計算、滴定等の化学Iおよび分析化学実験の内容である。

1) 特定の濃度の水溶液を作る時に必要な水和水を含む物質の必要な重さの計算問題

「硫酸銅5水和物の結晶 $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ を水に溶かして 0.100 mol/L の水溶液を作るには次のどの方法がよいか。($\text{CuSO}_4=160$ 、 $\text{H}_2\text{O}=18$ として計算してください。)

- ア. 結晶 7.98g を水 500mL に溶かす。
- イ. 結晶 12.5g を水 487.5g に溶かす。
- ウ. 結晶 12.5g を水に溶かして 500mL にする。
- エ. 結晶 25.0g を水に溶かして 500mL にする。
- オ. 結晶 25.0g を水 1l に溶かす。」

2) モル濃度と重量%濃度の関係

「濃度 $c \text{ (mol/L)}$ 、密度 $d \text{ (g/cm}^3\text{)}$ の希硫酸について空欄を埋めよ。

$c \text{ (mol/L)}$ の希硫酸 1L 中には $c \text{ (mol/L)}$ の硫酸 H_2SO_4 が含まれている。この希硫酸 1L の質量は、密度が $d \text{ (g/cm}^3\text{)}$ だから (ア) (g) である。また、 $c \text{ (mol)}$

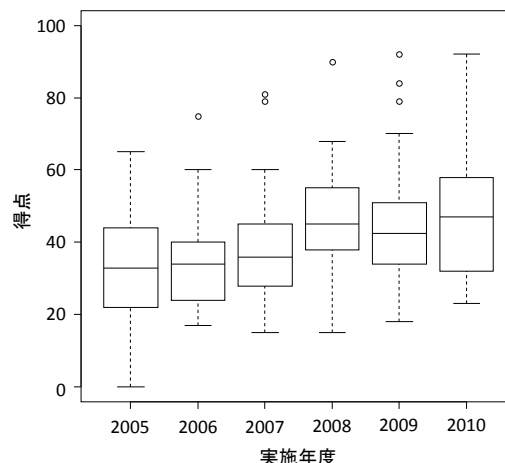


図1 物質工学科4年次に対する定点観測テストの箱ひげ図(4年次の10月に実施。ただし2009年度に関しては事情により5年次4月に実施)。図中の○はその点数をとった学生が1名いるという意味である。

の硫酸(分子量 M) の質量は (イ) (g) である。よって、質量パーセント濃度は (ウ) (%) である。」

3) 特定の濃度の水溶液を作る時に必要な液体の物質の必要な重さに関する計算問題

「 $98\% \text{ H}_2\text{SO}_4$ から約 $\text{pH}1$ の H_2SO_4 水溶液を 500 mL 作りたい。 98% の硫酸は何 mL 必要か。ただし、 H_2SO_4 は完全解離しているものとする。($\text{H}_2\text{SO}_4=98$ として計算せよ。必要なら密度 1.84gcm^{-3} を用いてもよい)」

4) 非水溶液の希釈法

「ある物質の 5% メタノール溶液を 2.5% に希釈したい。どうすればよいか。」

5) 中和滴定における器具の適切な使用方法

「次の(ア)~(エ)の器具を用いて中和滴定を行う際、純粋な水で洗ってそのまま使用してよいものを選びよ。」

(ア)メスフラスコ (イ)ホールピペット (ウ)ビュレット (エ)コニカルビーカー」

6) 希釈時における器具の適切な使用方法

「ある物質のメタノール溶液を 10 倍に希釈しようと思ったら、メスフラスコおよびホールピペットが純水でぬれていた。それぞれの器具を使う際どうすればよいか答えよ。」

A)メスフラスコ, B)ホールピペット」

7) 酸塩基の濃度問題

「(1)濃硫酸の原液の濃度はおよそ何 mol/L か? また、濃塩酸の原液の濃度は何 mol/L か?

(2) $[\text{OH}^-] = 1.0 \times 10^{-3} \text{ mol/L}$ の溶液の pH はいくらか?」

8) 緩衝溶液の pH の計算問題

「1M H_3PO_4 と 1M NaH_2PO_4 を使って pH3 の緩衝溶液を作りたい。どうすればよいか。ただし H_3PO_4 の酸解離定数は $\text{p}K_{a1} = 2.1$ とする。」

9) 吸光度測定法の測定条件に関する問題

「ある物質の 452nm におけるモル吸光係数 $\epsilon_{452} = 1.4 \times 10^4 \text{M}^{-1}\text{cm}^{-1}$ である。一般的な分光光度計で光路長 1cm のセルで測定するためには濃度は何 mol dm^{-3} 以下でなければならないか。」

10) 吸光度測定法の原理に関する問題

「ある試料を分光光度計で測定したら吸光度が 2 であった。この試料は測定光の何%を透過したか。」

3. 一年基礎実験での物質工学分野の取り組み

東京高専では平成 17 年度から「くくり入試」を実施し、入学した 1 年次全員に機械、電気、電子、情報、物質工学分野の基礎実験を週 5 時間、各分野 6 回(本年度から 5 回)ずつ受講させている。学生達はこれらの実験を受講することによって自分の適性を判断し、1 年次の最後で学科を選択している。物質工学分野では当初、化学 I の内容と連携し化学事象を確認する実験をメインとして実施してきた。しかしながら、物質工学科では、事象を確認することがメインであるという誤解や、コンピュータは重要視されないという間違った認識が広がった(物質工学科 3 年次のグループ毎にテーマを考えて研究・発表する「創造実験」という科目の発表会で、化学に関するソフトを自作・発表した学生に対して、聞いていた 2 年生や教員の一部から「物質工学科ではソフトウェアを作るべきではない」という抗議が出るなどした)。また、安全教育を推進する必要が生じたため、「コンピュータ化学」というテーマを設定し、Material Safety Data Sheets (MSDS)検索、Winmostar [2]を使った分子モデリング、環境とシミュレーション(ロトカ・ヴォルテラモデルの Maxima[3]による数値解法)という内容を新たに実施した。学生には、まず、NHK スペシャル気候大異変第 1 回「異常気象 地球シミュレータの警告」の冒頭の 15 分だけを見せ、地球温暖化への関心を高めると共に、かつて日本が世界に誇ったスーパーコンピュータ「地球シミュレータ」がどのように役立ったのかを理解させた。その後、地球シミュレータなどのスーパーコンピュー

タが、化学の分野にとっても物性・化学反応・創薬・プラント等のシミュレーションで重要である事を、テキストを使って説明した。

一年次にシミュレーションをさせる際に問題となることは、彼らがまだ微分方程式を学習していないことである。そこで、テキスト(図 2)を用いて、物理で学習した「速度」と「位置」の関係をグラフで理解させ、「速度」がわかればその面積が「位置」となることを認識させた。その後、速度という概念を物体の運動以外に拡張し、ウサギとキツネの食物連鎖の速度式を立式させ、Maxima を用いてシミュレーションを行わせた。年度末にすべての実験実習を体験したあとで、本実習について以下のようなアンケートを行った。

[問 1] 実習は楽しかったですか?

[問 2] 今回行った実験はどの程度経験したことがありましたか?

[問 3] 速度がわかれば、未来の事象を予測できることがわかりましたか?

[問 4] Maxima を使うと、速度式から未来の事象を予測できることがわかりましたか?

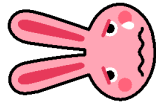
[問 5] 環境のシミュレーションにもコンピュータが使われていることがわかりましたか?

アンケート結果を図 3 に示す。8 割以上の学生が、楽しかったと答え、9 割以上の学生が、これらの内容について初めての体験に近かったと答えた。また、学習内容についても、9 割近い学生に対してある程度理解させることができた。

4. 2 年の分析化学実験及び情報処理 II における取り組み

物質工学分野においても情報系の知識の重要さは年々増大しているにもかかわらず、情報系の授業の時間数は極めて少ないのが現状である。また、ゆとり教育の影響で、従来レベルのレポートを現在の学生に課すことが困難になってきており、保護者からも学生が徹夜しているので負荷軽減してほしい等の要望が寄せられるようになった。そこで我々は現状を鑑み、以下のような改善を行った。

まず、従来 18 テーマあったものを 12 テーマに厳選するとともに、実験の翌日にコンピュータ室で 90 分間レポートの内容や Word/Openoffice Writer,



食物連鎖をシミュレートしてみよう!

地球上の生態系は、太陽エネルギーからデンプンや糖を作り出す生産者(植物)と、その植物を食べる第一消費者(草食動物)、その草食動物を食べる成長する第二消費者(肉食動物)、生物の死骸やフンなどにより成長する分解者(細菌類、菌類)などにより成り立っていることを中学校で学習したと思う。

地球の長い歴史の中で、生物種の進化・絶滅が食物連鎖の中で繰り返されてきた。今回は、ウサギ(草食動物)とキツネ(肉食動物)の食物連鎖をシミュレートしてみよう。今回は簡単のために以下の仮定をしよう。

- (1) ウサギのえさは豊富にあり、無くなる心配はない。
- (2) 生まれてくるウサギはウサギの数に比例する。比例定数は a_{10} 。(r は rabbit の r, b は birth の b) 数式で表すと

$$[\text{ウサギの増加速度}] = a_{10} \times [\text{ウサギの数}]$$
- (3) キツネに食べられてしまうウサギはウサギの数とキツネの数の両方に比例する。比例定数は a_{01} 。(d は death の d)

$$[\text{ウサギの減少速度}] = a_{01} \times [\text{ウサギの数}] \times [\text{キツネの数}]$$
- (4) (2)と(3)をあわせて考えると

$$[\text{ウサギの正味の増加速度}] = [\text{ウサギの増加速度}] - [\text{ウサギの減少速度}] = a_{10} \times [\text{ウサギの数}] - a_{01} \times [\text{ウサギの数}] \times [\text{キツネの数}]$$
- (5) キツネの出生率はウサギの数とキツネの数の両方に比例する。比例定数は a_{10} 。(f は fox の f)

$$[\text{キツネの増加速度}] = a_{10} \times [\text{ウサギの数}] \times [\text{キツネの数}]$$
- (6) 死んでいくキツネはキツネの数に比例する。比例定数は a_{01} 。

$$[\text{キツネの減少速度}] = a_{01} \times [\text{キツネの数}]$$
- (7) (5)と(6)をあわせて考えると

$$[\text{キツネの正味の増加速度}] = [\text{キツネの増加速度}] - [\text{キツネの減少速度}] = a_{10} \times [\text{ウサギの数}] \times [\text{キツネの数}] - a_{01} \times [\text{キツネの数}]$$

3 環境とシミュレーション ～食物連鎖をシミュレーションしよう!

他の学科と同様に、物質工学科でもコンピュータは君たちを助けてくれる重要なツールである。シミュレーションという方法を使えば、コンピュータによって未来が予測できる。ここでは、コンピュータを使って簡単な環境に関するシミュレーションを試してみよう。

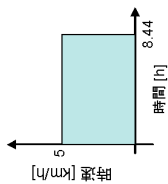
【実習】

- ・ 装置 : パソコン
- ・ 使用するソフト : Maxima

速度がわかれば未来がわかる!

例えば、平均時速 5.00km で歩く A 君が、8.44h 歩くと、どのぐらいの距離を歩くことになるのだろうか?
 $8.44(\text{h}) \times 5.00(\text{km/h}) = 42.20 (\text{km})$

と計算できるだろう。このように、速度がわかれば、未来(A 君の位置)を予測することができる。
 これを時速と時間のグラフで表してみると右図のようになる。A 君の位置はグラフ上の四角形の面積と等しいということがわかるだろう。つまり、A 君の位置を求めるということは、グラフで言えば、**面積を求めることなのだ。**



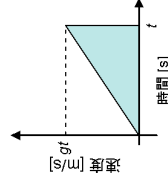
これは、速度が一定でなくても、速度がどのように変化するかがわかれば、同じように求めることができる。例えば、自由落下運動の速度 v (m/s)は重力加速度を g (m/s²)、時間を t (s)とすると、

$$v = g t \tag{1}$$

であり、 t 時間後の位置をグラフに描いてみると、右図のようになる。グラフの三角形の面積 y (m)は

$$y = \frac{1}{2} \times t (\text{s}) \times g t (\text{m/s}) = \frac{1}{2} g t^2 \tag{2}$$

となり、物理で学習した公式と一致することがわかる。
 そして、速度という概念は、何も物体の運動に限ったことではない。
 例えば、地球の温暖化速度(°C/年)、CO₂の増加による珊瑚礁の溶解速度(g/年)、人口増加速度(人/年)、化学反応速度(s⁻¹)、など、単位は速さと「速度」なのである。



つまり、速度の変化がわかれば、どのような事象も未来を予測することができる。いかにすると、速度がどのように変化するかを考えれば、未来はコンピュータが予測してくれる。

図 2 「環境とシミュレーション」で使用したテキストの一部(解答付)。

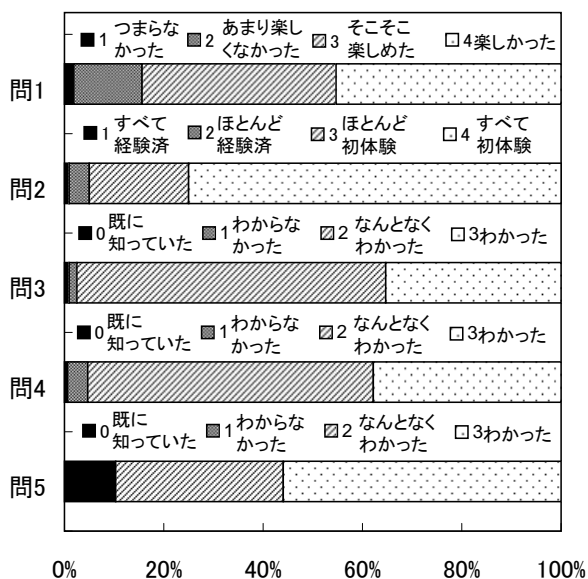


図3 「コンピュータ化学」受講者へのアンケート結果。

表1 2010年度分析化学実験の内容

講義1	実験の安全、レポート作成法、定性分析とは
実験1	操作練習と第1属、2属イオン (1属: Ag^+ , Pb^{2+})(2属: Cu^{2+} , Cd^{2+})
実習1	コンピュータ室でのレポート作成
実験2	第3属、4属イオン(3属: Fe^{3+} , Al^{3+} , 4属: Ni^{2+} , Zn^{2+} , Mn^{2+})
実習2	コンピュータ室でのレポート作成
実験3	金属イオンの分析(未知試料)
実習3	コンピュータ室でのレポート作成
講義2	定量分析とは、滴定法(測容器の重要性と操作法解説)、酸化還元滴定
実験4	0.1M HCl標準液の調製と標定
実習4	Excel/Calcの使い方を学習する(1)
実験5	中和滴定によるソーダ灰中の全アルカリの定量
実習5	Excel/Calcの使い方を学習する(2)
実験6	0.005M $KMnO_4$ 標準溶液の調製と標定
実習6	コンピュータ室でのレポート作成
実験7	COD測定
実習8	コンピュータ室でのレポート作成
講義4	実験8の解説(緩衝液とは、ICPとは、金属錯体とは)
講義5	実験9,10,11の解説(クロマトグラフィとは、酸塩基指示薬の酸解離定数の決定)
実験8	* ICP-原子発光分析とEDTA滴定による海洋深層水中のCa・Mgの定量
実習8	コンピュータ室でのレポート作成
実験9	* アルミ箔中の鉄の定量
実習9	コンピュータ室でのレポート作成
実験10	* クロマトグラフィによる分析(ガスクロマトグラフィ、ペーパークロマトグラフィ)
実習10	コンピュータ室でのレポート作成
実験11	* 酸塩基指示薬の酸解離定数の決定
実習11	コンピュータ室でのレポート作成
	テスト(実験の復習)

*4班に分かれてローテーションで行う実験

Excel/Openoffice Calc の使用方法を指導する時間を設けた(表1)。

最近、中学校でも Word や Excel を実習するところが多いので、従来、実習は不要であると考えていたが、いざ、実習時間に学生の様子を見てみると、Word や Excel の操作がおぼつかない学生が多い事がわかった。そこで Word/Writer については、文字の入力方法、上付、下付、表の作成方法、特殊記号の入力、数式の入力、ページ番号の入力方法などのレポートを書くために必要となる一通りの内容を学習させたのち、はじめのレポートに関しては見本レポート通りに打つことからはじめた。Excel については、実験4の定量分析の実験開始時に、数式の入力方法、絶対参照と相対参照、セルのコピー方法、グラフの書き方、よく使う関数(平均、標準偏差、合計)などの学習をした後、実際の彼らが測定した実験データを Excel で解析させることにより、より効果的に実験と表計算ソフトの両方を学習させることができた。

低学年の実験では、レポートの中身と共に、レポート提出期限を守るというしつけが重要な要素の一つである。また、学生のやる気を如何に出させるかというのが重要である。2010年度は現代学生のゲーム好きな気質に合わせ、表2のようなポイント制を取り入れた。レポートが複数貯まってしまうのを防ぐために、実験日から最終レポート合格期限までは3週間とした。

これらのポイントおよび成績は、Microsoft Access[®]を用いて一元管理することによって、複数教員に評価がまたがるときに生ずる集計の煩わしさを無くした(図4)。

表2 分析化学実験に取り入れたポイント制

項目	得点
レポート評価点	
S	10
A	8
B	4
C	0
D	-4
レポートを期限3日以 上前に提出	2
レポート提出遅れ	-5
一日遅れる毎に	-1
レポート再提出遅れ	-5
一日遅れる毎に	-1
理由無し欠席	-10
スペシャル課題	+2~5

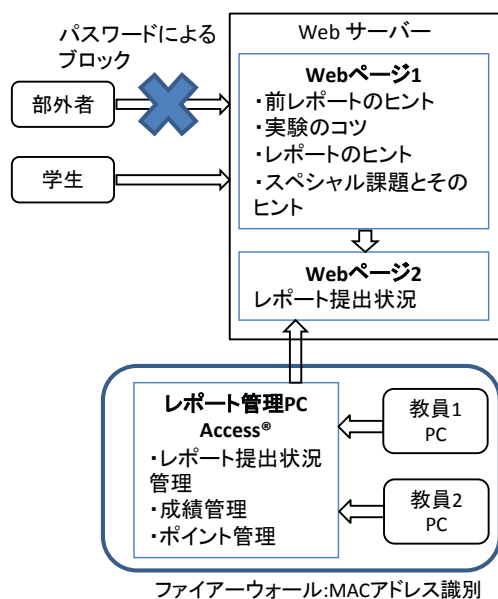


図 4 分析化学実験で用いた IT ソリューション。

また、提出の際に、不備のある状態で出すことを防ぐために、表紙にチェックシート欄(図 5)を設け、学生が提出前に自らチェックさせるようにした。チェック漏れや内容に重大な不備があったレポートは、不受理とした。

また、課題の提出状況を Access[®]の標準機能を用いて分析化学実験用の web ページ(図 6)に逐一アップロードし、パスワード保護のもとで受講者のみに

実験1-3

1 届の分属

前レポート情報

- ・1届の試験液に6M HClを入れた後は、氷水で5~10分冷やそう!!
(PbCl₂を十分落とすため)。冷却時間が短いとPb²⁺が検出できなくなってしまうぞ!!

2 届の分属

前レポート情報

- ・Cd²⁺の確認がうまくいかない場合、溶液のpHが低い可能性がある。
6Mアンモニアさらに加えてpHを高くしよう。

3 届の分属

前レポート情報

- ・教科書p.32を読むとわかるが、はじめに濃硝酸を加えて乾固寸前まで煮沸するのは、2届からのろ液を使うときだけでよい。(鉄イオンは通常空気中では3個になっている。)
- ・授業で連絡したように、Cr³⁺イオンはないので、Cr³⁺イオンに関連する操作部分は書かないこと。
- ・教科書p.32図3-5中の(二分)と書いてあるのは「にぶん」と読み、溶液を二つに分けることです。

レポート情報

ヒント

- ・Fe³⁺がK_x[Fe(CN)₆]と反応してできる青色沈殿の化合物はKFe[Fe(CN)₆]である。
- ・Fe³⁺がKSCNと反応してできる赤色溶液は[Fe(NCS)_x]^{3-x}(x = 3~5)である。
Fe³⁺ + xSCN⁻ → [Fe(NCS)_x]^{3-x}(x = 3~5)
- ※[Fe(SCN)_x]^{3-x}も慣用的には認められているが、Fe³⁺に配位するのはN原子である。

図 6 分析化学実験用 web ページ。

セルフチェック	
<input type="checkbox"/>	表紙に記入もれはない。
<input type="checkbox"/>	実験目的、器具と試薬、参考文献は書いてある
<input type="checkbox"/>	実験方法と結果は文章で且つすべて過去形で書いてある。
<input type="checkbox"/>	考察には実験目的に関連する項目がすべて書いてあり且つ実験で行った化学反応式を調べて文章で考察に書いた。
<input type="checkbox"/>	表やグラフにはキャプションを正しい位置に書いてある。
以下再レポート	
<input type="checkbox"/>	(ワープロの場合)指摘箇所は赤・黒字以外で訂正後すべてのページを印刷し、はじめに提出したものも綴じてある。
<input type="checkbox"/>	(手書きの場合)指摘箇所は、レポートに赤字以外で書き込みし、足りない場合は別紙を追加した。

図 5 レポート表紙に導入したチェックシート。

公開した。こうすることによって、友人がどの程度レポートを出したのかわかり、お互いを切磋琢磨させることができた。

基礎的で重要な部分については、具体例を挙げて学習できるようにした。例えば、有効数字と丸め誤差に関しては、濃度計算という身近な内容を取り上げ、有効数字を考慮して計算すると、計算方法の違いによって、答えが違ってしまおうという例を挙げて、その対策を学習できるプリントを準備した(図 7)。

スペシャル課題も、同様の web ページに掲載して活用を促した。その内容であるが、「ゴールシークやソルバーを使ってプロモクレゾールグリーン の pK_a を求める」課題や、「Na₂CO₃ を HCl で滴定するときの理論曲線を描く」という発展学習的なものから、「COD の計算式を誘導する」といった基本的なものまで幅広い内容とした。発展的な課題については、学生が自学自習で課題を解決できるように、手順を詳しく書いたプリント(図 8)を印刷または PDF 形式で配布するとともに、これら内容を、実習時間に詳しく説明し、学生の個別質問にも答えるようにした。これらのことによって、前述の保護者からのクレームは一切なくなったばかりか、演習室でレポートを書かせている間、我々が巡回をするため、他人のレポートを写して提出する学生の数も減らすことができた。

2 年次で実施している情報処理 I の時間は、今まで Word や Excel, Powerpoint の実習をメインとしてきたが、情報リテラシー、プレゼンテーションソフト、表計算マクロ言語、数式処理ソフト習得とし、物質工学系においても今や必須ともいえる情報技術講義の充実を図った(表 3)。その際、くくり入試で問題になっている、学科の友人とあまり打ち解けず、

10/05/06
分析化学実験(工藤・城石・雑賀)

有効数字

1と1.0では意味が違ふ!

…1は()以上()未満、1.0は()以上()未満、

有効数字とは…測定結果などを表わす数字のうちで、位取りを示すだけのゼロを除いた意味のある数字

12.2345	有効数字 6桁	0.00023	有効数字 2桁
0.009500	有効数字 4桁	120000	有効数字 5桁

科学表記…有効数字を明確にした表現

(1以上・10未満の数字) $\times 10^{\circ}$

<例>

1.03×10^{-1} 有効数字()桁(コンピュータでは1.03E-01と表示される)
 9.000×10^{10} 有効数字()桁(コンピュータでは9.000E+10と表示される)

測定値の計算

1) 加減算…最終結果は位取りの最も高いものH1桁目を四捨五入。

$$5.69 + 3.214 = 8.904(x) = 8.90$$

左辺第1項は小数点以下2桁目に誤差を含むので、小数点第3位を採用するのは意味がない。

$$2.21 - 2.20 = 0.01 = 1 \times 10^{-2} \quad (\text{有効数字が減少して1桁になった})$$

$$9.91 + 3.14 = 13.05 = 1.305 \times 10^1 \quad (\text{有効数字が増加して4桁になった})$$

2) 乗除算…最終結果は有効数字の桁数が最も少ないものに合わせる。(有効数字H1桁目を四捨五入)

$$3.14159 \times 2.1 = 6.597339 (x) = 6.6$$

なぜか…分解除して考えてみる。誤差を含む桁にアンダーラインを引いてみる

$$3.14159 \times 2.1 = 3.14159 \times 2 + 3.14159 \times 0.1 = 6.28318 + 0.314159 = 6.597339$$

丸め誤差

有効数字を考慮して計算していると、計算の順番や方法によっては出てくる答えが異なってしまうことがある。例えば以下の例題を2種類の方法で解いてみる。

【問】36%濃硫酸(密度1.18g/cm³)から0.10mol/Lの硫酸水溶液を0.50L作りたい。濃硫酸は何g必要か。ただし、HClは完全解離しているものとする。(HCl=36.46として計算してください)

【解法1】

必要な硫酸の重さは

$$36.46(\text{g/mol}) \times 0.10(\text{mol/L}) \times 0.50(\text{L}) = 1.8 \text{ g} \quad (a)$$

36%なので必要な濃硫酸の重さは

$$1.8(\text{g}) \div 0.36 = 5.0 \text{ g}$$

必要な硫酸の量をx(g)とすると

$$x = \frac{0.1 \times 0.5 \times 1000 \times 1.18}{12} = 4.9 \text{ (g)}$$

1

10/05/06
分析化学実験(工藤・城石・雑賀)

解法1についてまとめて計算すると

$$36.46(\text{g/mol}) \times 0.10(\text{mol/L}) \times 0.50(\text{L}) \div 0.36 = 5.06 \approx 5.1 \text{ g}$$

解法2についても最後の式にまとめてみる

$$x = 0.10(\text{mol/L}) \times 0.50(\text{L}) \times \frac{36.46(\text{g/mol})}{10 \times 1.18(\text{g/cm}^3) \times 36(\%)} \times 1.18(\text{g/cm}^3) = 5.06 \approx 5.1(\text{g})$$

となる。このように計算の途中で数値を丸めてしまうと、無理数を丸めることにより誤差が増加していき、約分等で本来1となる部分が小さくずれてしまったりする。

よって、これらの丸め誤差を抑制するためには式を最適化してから計算するようにすること、有効数字は最後に丸めるほうがよいといえる。

もし、解法1および2の途中式で有効数字H1桁およびH2桁で計算すると

【解法1】(有効数字H1桁)

必要な硫酸の重さは

$$36.46(\text{g/mol}) \times 0.10(\text{mol/L}) \times 0.50(\text{L}) = 1.82 \text{ g} \quad (a)$$

36%なので必要な濃硫酸の重さは

$$1.82(\text{g}) \div 0.36 = 5.05 \approx 5.1 \text{ g}$$

必要な硫酸の量をx(g)とすると

$$x = \frac{0.1 \times 0.5 \times 1000 \times 1.18}{11.7} = 5.04 \approx 5.0(\text{g})$$

となり解法1は一度に計算した場合と答えが一致した。

【解法2】(有効数字H2桁)

濃硫酸のモル濃度は

$$c = \frac{10 \cdot d \cdot w}{M} = \frac{10 \times 1.18 \times 36}{36.46} = 11.65 \text{ (mol/L)} \quad (a)$$

必要な硫酸の量をx(g)とすると

$$x = \frac{0.1 \times 0.5 \times 1000 \times 1.18}{11.65} = 5.06 \approx 5.1 \text{ (g)}$$

となり解法2の場合も有効数字H2桁で計算しておかないと答えが一致しないことがわかるだろう。このことから、途中式で計算の途中結果を出す場合はおおよそ有効数字H2桁で計算しておき、最後に有効数字に丸める(四捨五入する)のがよいといえる。

2

図7 分析化学実験での有効数字と丸め誤差のプリント。

(発展) Na_2CO_3 を HCl で滴定するときの滴定曲線を描こう!! (+5点Get)

編入試験に使われる分析化学意義 1

酸塩基関係の問題は

1. 酸解離平衡式
2. 電気的中性則に関する方程式
3. 酸解離前後での物質収支に関する方程式を連立させて解くべし。

LIFE 協会の印

まずは下準備をする。
 C_N (mol/L) の Na_2CO_3 を C_{HCl} (mol/L) の塩酸の混合溶液の pH を考えよう!!
 $\text{Na}_2\text{CO}_3 \rightarrow 2\text{Na}^+ + \text{CO}_3^{2-}$

酸解離平衡式は



電気的中性則より

$$[\text{H}^+] + [\text{Na}^+] = \quad (3)$$

Na_2CO_3 の物質収支は

$$C_N = \dots [\text{Na}^+] = \quad (4)$$

$$C_N = [\text{CO}_3^{2-}] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{H}_2\text{CO}_3]$$

$$\dots [\text{H}_2\text{CO}_3] = C_N - [\text{CO}_3^{2-}] - [\text{HCO}_3^-]$$

HCl の物質収支 (仕込み量と考える)

$$C_{\text{HCl}} = \quad (6)$$

$$K_W = \dots [\text{OH}^-] = \quad (7)$$

さて、(1)~(7)式を連立させて $[\text{H}^+]$ の濃度を出せばよい。

(1) 式より

$$[\text{CO}_3^{2-}] = \frac{K_{a2} [\text{HCO}_3^-]}{[\text{H}^+]}$$

(2) 式に (5) 式を代入すると

$$K_{a1} = \frac{[\text{H}^+] [\text{HCO}_3^-]}{C_N - [\text{CO}_3^{2-}] - [\text{HCO}_3^-]} \quad (2')$$

(2') 式に (1) 式を代入すると

$$K_{a1} = \frac{[\text{H}^+] [\text{HCO}_3^-]}{C_N - \frac{K_{a2} [\text{HCO}_3^-]}{[\text{H}^+]} - [\text{HCO}_3^-]} = \frac{[\text{H}^+]^2 [\text{HCO}_3^-]}{[\text{H}^+] C_N - K_{a2} [\text{HCO}_3^-] - [\text{H}^+] [\text{HCO}_3^-]}$$

$$\dots [\text{HCO}_3^-] = \quad (2'')$$

(2'') 式を (1') 式に代入すると

$$[\text{CO}_3^{2-}] = \frac{K_{a2}}{[\text{H}^+]} \cdot \frac{K_{a1} C_N [\text{H}^+]}{K_{a1} [\text{H}^+] + K_{a1} K_{a2}} = \frac{K_{a1} K_{a2} C_N}{[\text{H}^+] + K_{a1} [\text{H}^+] + K_{a1} K_{a2}} \quad (1'')$$

(4), (6), (7), (1'), (2'') を (3) 式に代入すれば OK なのだが、(4), (6) 式は別として直だるい(ただし大学編入したい人は別)。そこで、フリーの数式処理ソフトの Maxima を使おう。

Maxima を使うとラクラク!!

Maxima で計算しやすいように (3) 式の右辺を左辺に移項し、(4), (6) 式を代入すると

$$[\text{H}^+] + 2C_N - C_{\text{HCl}} - 2[\text{CO}_3^{2-}] - [\text{HCO}_3^-] - [\text{OH}^-] = 0 \quad (3')$$

1) [スタート] → [プログラム] → [Maxima (Version の数字)] → [twmaxima] を立ち上げ、(1''), (2''), (7) 式を定義する。変数としてギリシャ文字や下付、[]、+ は使えないので、 $C_{\text{HCl}} \rightarrow \text{Ch}$, $C_N \rightarrow \text{Cn}$, $K_W \rightarrow \text{Kw}$, $K_{a1} \rightarrow \text{Kac11}$, $K_{a2} \rightarrow \text{Kac12}$, $[\text{CO}_3^{2-}] \rightarrow \text{CO32}$, $[\text{HCO}_3^-] \rightarrow \text{HCO3}$, $[\text{H}^+] \rightarrow \text{H}$ などと置き換え、以下のように入力する。(Maxima は大文字、小文字を区別するので注意しよう!!)

```
CO32:Kac11*Kac12*Cn/(H^2+Kac11*H+Kac11*Kac12);
HCO3:Kac11*H*Cn/(H^2+Kac11*H+Kac11*Kac12);
OH:Kw/H;
```

(3') 式の左辺を簡略化するには radcan コマンドを使って次のように入力する

```
radcan (H+2*Cn-Ch-2*CO32-HCO3-OH);
```

計算させるとは [Shift] キーを押しながら、[Enter] キーを押す。

計算結果は

```
(R04) 
$$\frac{H^4 + (Kac11 + 2 Cn - Ch) H^3 + (-Kw + Kac11 Kac12 + (Ch - Ch) Kac11) H^2 + (-Kac11 Kw - Ch Kac11 Kac12) H - Kac11 Kac12 Kw}{H^3 + Kac11 H^2 + Kac11 Kac12 H}$$

```

となっただけです。(3') 式は右辺が 0 であるから、分母を両辺にかけてしまえば消えてしまふ。

つまり分子のみ使えばよい。

この結果より、(4), (6), (7), (1'), (2'') を (3) 式に代入して整理すると

$$[\text{H}^+]^4 + (K_{a1} + 2C_N - C_{\text{HCl}}) [\text{H}^+]^3 + (-K_W + K_{a1} K_{a2} + (C_N - C_{\text{HCl}}) K_{a1}) [\text{H}^+]^2 + (-K_{a1} K_W - C_{\text{HCl}} K_{a1} K_{a2}) [\text{H}^+] - K_{a1} K_{a2} K_W = 0 \quad (3'')$$

という $[\text{H}^+]$ の 4 次方程式になることがわかった。これを解けば、 $[\text{H}^+]$ の濃度が計算でき、

図 8 スペシャル課題の配布プリントの一部

表3 情報処理 I で実施している内容

内容	時間
Excel/Calcの高度な使い方	
条件付書式, 小数点の位置を合わせる, グラフで Y第2軸を使う, グラフを使わず回帰直線の切片と傾きを求める, ゴールシークを使って最適解を求める	1
ソルバーを使って最適解を求める(連立方程式, 線形計画法), 度数分布を得る, ヒストグラムを描く	1
度数分布を得る, ヒストグラムを描く	1
情報リテラシー一般	
迷惑メールが届くのはなぜ?	0.5
無線でインターネットにつながるのはどうして?	0.5
Excel VBA/Openoffice BASIC入門	
プログラムとは?, コンピュータ言語の種類, 変数とは?, 関数とは?	1
制御文, プロシージャの呼び出し(クリスマスにちなんで★を描こう)	1
オブジェクトとは?, 最小自乗法, 台形積分	1
文字列操作, ファイル入出力, クリップボードを操る	1
モンテカルロシミュレーション	1
ユーザーフォーム(じゃんけんゲーム)	1
参照渡しと値渡し	1
フリーウェアをPowerpointを使って紹介しよう(発表会)	1
実践的Excel/Calc活用法	
アンケートを手早く集計する, 成績を処理する	
条件付き合計を征服する, グラフにエラーバをつける	
グラフの大きさを統一する方法	1
数式処理ソフトMaxima入門	3
簡単な計算・変数と関数, リスト・ベクトル・行列	
Maximaでグラフを描く・数式の展開・方程式	
微分積分	
冬休みの課題発表会	1

表4 2009年度2年次情報処理 I 冬休み作品内容

採点(賞)	タイトル	種類
最優秀賞	COD	VBA
優秀賞	さよなら, ゆっきー	動画
優秀賞	Excelでプチ健康診断	VBA
	3元1次方程式の解と5次方程式の解を求めるプログラム	VB
技術賞	化学に関するO×ゲームの作成	VBA
努力賞	モジュロ演算で今日は何曜日?	VBA
努力賞	分子量演算機	VBA
努力賞	誕生日×血液型による性格診断	VBA
すごいで賞	Excel VBAでフーリエ変換をする関数	VBA
きれいで賞	ミョウバンの結晶のできていく様子	動画
	マクロで可聴周波数を調べる	VBA
	2次方程式を解くプログラム	VBA
	マクロでQ検定	VBA
	標準偏差を求めるプログラム	VBA
	周期表 原子量当てゲーム	VBA
	無機化学単位判定関数	VBA
	氷が溶ける様子	動画
	pHを算出する公式	VBA
	お湯を入れたペットボトルがへこむ様子	動画
	氷が解ける動画と雲の動く様子の動画	動画
	化学平衡についてのゲーム	VBA

卒業まで1年次のクラスの友人達と仲良くする傾向があるという問題点を少しでも解消するため, 3人程度のグループで, 「フリーソフトウェアを紹介しよう!」, 及び「冬休みの課題を発表しよう」という共同作業のテーマを盛り込んだ。冬休みの課題は, 1) Excel や Calc のマクロを使って便利な機能や関数を作る, 2) フリーウェアを使って, 科学的に興味深い動画を作る, 3) 化学を学習する上で役立つゲームを作る, の中からグループ毎に選ばせた。2009年度の作品の内容と採点結果を表4に示す。また, 発表会は, コンテスト形式とし, 順位に応じて成績点に加算するようにし, 自分達のグループ以外を採点させることによって, やる気を引き出させることができた。得点順に賞を決めたが, 技術賞以降はどのが良かったのかがわかりやすくなると考え, 「～賞」という名称を授与した。採点の集計結果は web 上にグラフ化して掲載し, 自分のグループの弱いところを認識できるようにした。また, 情報処理 I に今回導入した内容は, その大部分は4年次の情報処理 II で行ってきたことである。そこで, 2009年度に情報処理 I を受講した学生達に以下のような情報処理 II で行ったときと同様なアンケートを行った[4]。

- [設問 1] パソコンを使い始めた年齢は?
- [設問 2] 自分専用のパソコンがあるか?
- [設問 3] パソコンに対するイメージは?
- [設問 4] プログラミング言語に対するイメージは?
- [設問 5] 物質工学科(専攻)ではプログラミング言語の能力は重要であると思うか?
- [設問 6] 情報系科目を受講して, プログラミング言語に興味を持った。
- [設問 7] 教わったプログラミング言語でどの程度プログラムを作っているか?
- [設問 8] プログラミング言語は, 物質・材料系の分野に就職する場合, 就職後役に立つと思うか?
- [設問 9] プログラミングしなくても, 実験などのデータは処理できると思うか
- [設問 10] プログラミング言語が, 実験データの整理

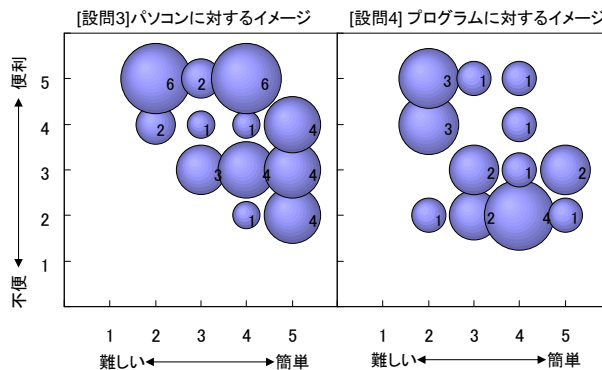


図9 パソコンおよびプログラムに対する学生のイメージ。数値は人数。

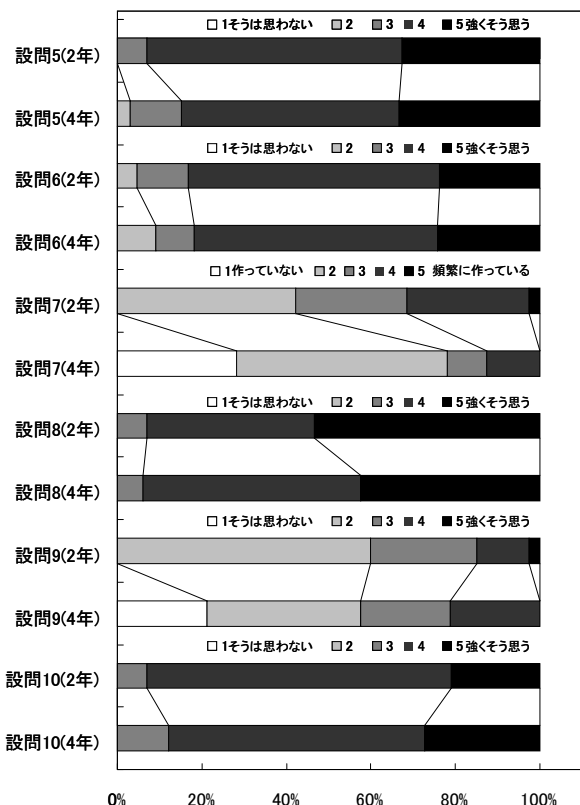


図 10 設問 5 から設問 9 のアンケートの結果。いずれも数字が大きいかほど設問に対して肯定的な回答である。

などの役に立つと思うか？

パソコン及びプログラミングに対するイメージ(設問 3 及び 4)のアンケート結果を図 9 に示す。プログラムに対しては「簡単だが不便」または「難しいが便利」という意見が 4 年次の場合と比べて多かった。今後は、プログラムの利便さを実感できる課題を増やしていくなどの改善を図っていきたい。

設問 5 から設問 9 の結果を図 10 に示す。設問 7 については、2 年次のほうが教わったプログラミング言語でプログラムを作っている割合が高かった。これは前述の冬休みの課題が効果的であったと考えている(4 年次では未実施だった)。それ以外は 4 年次で実施した場合とほぼ同様の効果が得られ、低学年から情報系知識の重要性を学習させることができた。

図 11 に情報処理 I の授業を通して、向上したと感じた技術を複数回答で得たものを示す。向上したと感じた割合が低かったセキュリティ技術に関しては、今後ますます重要となってくるので、深く習得させるように工夫していく予定である。

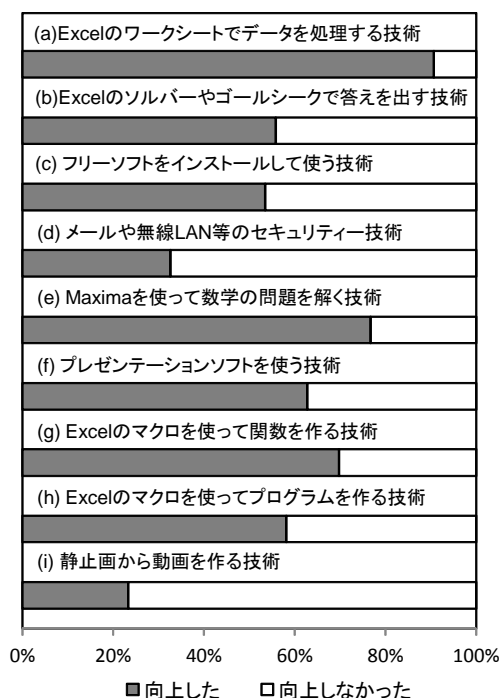


図 11 情報処理 I の授業を通して、向上したと感じた技術。

5. 結論

1 年生の工学基礎実験に、「コンピュータ化学」を導入することによって、MSDS 検索による安全教育を実施するとともに分子モデリング、数値シミュレーションを体験させた。また、2 年物質工学科の分析化学実験においては、ポイント制を導入すると共に、実験日の次の日にコンピュータ室で演習する日を設け、成績下位学生へのフォローを行った。また、Excel のソルバーや数式処理ソフトなどを使う発展課題を出題すると共に、情報処理 I の学習内容を高度化し、課題を解決する高い能力を有する若い学生を育成することができた。

参考文献

[1] 城石 英伸, 雑賀 章浩, 工藤 節子, 東京工業高等専門学校研究報告書, 39(2007) 93.
 [2] 千田, "分子計算支援システム Winmostar の開発", 出光技報, 49 (1) (2006) 106-111.
 [3] <http://maxima.sourceforge.net/>
 [4] 城石 英伸, 工藤 節子, 小島 洋一郎, Journal of Technology and Education, 16 (2009) 23-29.