

【研究報告】

教員養成課程の化学における大学低学年からの 量子論に基づく原子・分子の概念の育成の試み —化学の基礎概念の可視化ツールとしての 量子化学計算ソフトウェアの利用—

船山 智代*

An Attempts to Train Atomic and Molecular Concepts Based on Quantum Theory
from University Lower Grade in Chemistry of Teacher Training Course:
Use of Quantum Chemical Calculation Software As a Visualization Tool
of Basic Concept of Chemistry

Tomoyo FUNAYAMA

要旨 量子論の概念の理解は、化学の本質をどこまで理解し追及できるかに繋がる課題である。特に軌道の概念の理解は、分子の構造やその反応性について考察する際に必要となり重要である。しかし、量子論は実生活と実感を持って結びつきにくい面がある為、学生は量子論の概念の理解に時間を要することが多い。教員養成課程は、専門科目の化学に充てるコマ数が限られている為、学生の量子論の理解の障壁を下げる工夫が必要と考え、化学の基礎概念である量子論の可視化ツールとして量子化学計算ソフトウェアを授業に導入した。授業は、学生アンケートの結果を参考に次の①～⑤の5段階で構成し大学初年次から量子論に基づく原子・分子の概念の育成に取り組むこととした。①量子化学の学術用語の説明（講義）、②量子化学計算ソフトウェアを用いた電子状態、分子運動等の原子・分子情報の可視化（講義と演習）、③可視化された分子構造に関する数値データの確認（講義と演習）、④量子化学の基礎理論の学習（講義と演習）、⑤実験データと量子化学計算結果の対応（スペクトル解析の演習）。本稿には授業内容の検討過程と構成、授業の概要についてまとめた。今後の課題として、実測値とより良く対応する分子軌道計算の条件の検討、一連の学習過程を経た学生の量子論の理解の程度の評価、および評価に基づいた授業内容の改訂が挙げられる。本試みが、学生の量子論に基づく原子・分子の概念の育成に役立つように工夫を重ねたい。

キーワード：量子論 軌道 量子化学計算ソフトウェア 可視化 電子状態 化学教育

1. はじめに

量子論の概念の理解は、化学の本質をどこまで理解し追及できるかに繋がる課題である。化学の本質の理解は、物質の電子状態についての理解とも言え、それには原子・分子及び化学結合の理解が欠かせない。分子の生成は、量子論に基づき原

子核間距離とそのポテンシャルエネルギーにより説明されることから、原子・分子の理解には量子論の基本的な知識が必要となる。本学教育学部理科専修化学では、前任の大橋ゆか子名誉教授より現在まで選択必修科目に量子化学の内容を入れている。量子論はミクロの電子の世界の概念であることから実生活に実感を持って結びつきにくく、学生らは理解に時間を要する場合が多く、専門科目の化学に充てる時間数が限られる教員養成課程

* ふなやま ともよ 文教大学教育学部学校教育課程理科専修

では学生の量子論の概念の理解を助ける工夫が必要と考えた。

量子論に基づいた原子・分子の理解の必要性は、筆者が「化学による科学的思考力の育成」をテーマに、平成26年度文教大学学長調整金による教育改善支援を受け、科学的思考力の育成を目的にした学生主体の化学実験プログラムを作成、実施した際にも感じた。¹⁾ 実験のテーマは「物質由来の化学現象の定量化」であり、高学年生を対象とし、物質のラジカル消去率の測定を行った。学生は、ラジカルが抗酸化物質により消去される現象については割合容易に理解したが、ラジカル消去の機構を電子の動きに基づき考察することは難しく、科学的思考力を深めていく際のハードルとなった。原因の一つとして、電子のエネルギー状態と電子雲の構成、つまり軌道についての理解が十分でないことが挙げられた。分子の構造やその反応性の理解には、軌道の理解が欠かせない為である。よって量子力学に基づく量子論の理解は物質の理解につながり、それは科学的な思考力の育成に役立つと考えた。

また、ディープアクティブ・ラーニング²⁾の観点による授業内容の振り返りから、原子・分子の概念について理解を深めるにはどのようにしたら良いか考察し、外化^{*}の活動を通じた知識の再構築が思考を深める為には必要であり、それには化学の基礎概念を道具として使いこなせていることが必要と考えた。³⁾ 化学の基礎概念とは、化学の基礎となる原理、基本法則のことであり、本稿では量子論を指す。思考の深さとは、化学の基礎概念を理解し活用できる状態を指す。筆者は、化学の基礎概念である量子論を可視化するツールとして、量子化学計算ソフトウェアの使用を考えた。ソフトウェアの使用により、量子論に基づき原子・分子を可視化することで、原子・分子の電子の広がり方、軌道を視覚的に捉えることができ、それにより以降の電子の波動関数に基づく原子・分子および原子・分子に関する現象の理解が容易になり、化学の本質の理解が深まることが期待された為である。

そこで筆者は、学生らが量子論の基礎を学ぶことで原子・分子の電子状態についての理解を深め、理科教員としての素養を高めるべく、「量子論に基づく原子・分子の概念の育成の試み」とテーマを設定し、取り組むことにした。本試みは、平成28年度文教大学学長調整金による教育改善支援を受け計画・実施した。支援により、量子化学計算ソフトウェアである Gaussian[®] 09W, Rev:E.01⁴⁾ 及び Gaussian の全機能を使用出来るグラフィカル・ユーザー・インターフェース(分子の構築、ジョブの設定、計算の実行、計算結果の表示等を行う)である GaussView^{®, Rev:5.0.9}⁵⁾ のサイトライセンスを購入し、情報システム室の協力を得て、文教大学越谷校舎のパソコン教室の windows 版の据え付けパソコンにソフトウェアをインストールし、多くの学生が授業時間の内外を問わず自由に使用し課題に取り組むことが出来る環境を整えた。また、化学の授業への量子論の導入時期と授業内容の構成を検討する為、3年次選択必修科目の「化学実験Ⅲ」で試行実験を行い、併せて理科専修の学生らに量子論の学習状況と理解の状況を調べるアンケート調査を実施した。

本稿では、これらの検討結果を踏まえて決定した授業内容の構成とその概要について報告した。

*外化：学習者がその知識を実際に適用してコンフリクトの解決を試みること。コンフリクトとは、これまでの知識や経験では対処出来ない事態に学習者が直面した時、心に生じる葛藤。

2. 量子論に基づく原子・分子の概念の育成の必要性と日本の高等学校の化学における量子論の学習状況

2-1 量子論に基づく原子・分子の概念の育成の必要性

化学は、分子構造とエネルギーを結びつけて物質について理解しようとする学問である。当初は、エネルギーの中でも物質の変化に伴う熱エネルギーがその対象であったが、19世紀後半から20

世紀初頭にかけて物質の科学は A. Einstein により提出された特殊相対性理論及び物質と電磁波(光)の性質の関連からエネルギーの量子化という概念が確立され量子論が生まれたことで大きく転換した。⁶⁾ 中でも量子論は、分子の形成や結合を原子核間距離とエネルギーの関連でよく説明出来るなど、分子の理解に役立った。化学は量子論を取り入れ量子化学の分野を確立し、量子論に基づき物質を理解する現代化学へと発展してきた。原子・分子の深い理解には、量子論が欠かせないのである。

2-2 日本の高等学校の化学における量子論の学習状況

2003 年 (H15) 発表の細谷らによる「高校化学に量子論を」とした論文⁷⁾には、日本の高等学校の化学に 1970 年代には量子論が取り入れられていたが、1980 年代に入り学習指導要領で Bohr のモデル程度にとどめることと制限されたとの記述があった。齊藤の報告⁸⁾には、1973 年 4 月に施行された学習指導要領に基づいた教科書は本文にも混成軌道の概念などが掲載されていたが、1982 年 4 月に施行された指導要領に基づく教科書からは s 軌道、p 軌道などの記述は姿を消したとあった。論文⁷⁾で細谷らは、諸外国と異なり、日本は量子論を学習しておらず、電子が量子力学的な軌道で表されないことが、結合、分子についての理解を難しくしていると指摘し、中等段階の量子論は自然の表現の手段として限界はあるが、結合、分子の形、大きさがイメージし易くわかり易くなるとし、量子論の基礎が生成した約 20 年分の学習の導入を提言していた。

筆者の調べでは 2000 年に入り、東京書籍の 2003 年検定済の化学 II の教科書の巻末の発展⁹⁾に分子模型の記述があり、スチュアート模型は電子の広がりで分子の形を表したもの、との説明があり、電子雲を意味する記載が見られた。2002 年に学習指導要領の改訂が行われ、2003 年にその一部が改訂され、高等学校では 2007 年から発展的な内

容が教科書に記載出来る様になったことから、2007 年 (H19) 3 月検定済、2012 年 (H24) 1 月発行の実教出版の化学 II 新訂版の本文の発展¹⁰⁾に、「分子の形と電子軌道」として、原子核のまわりの電子の存在の確率は理論的に求めることができるここと、電子の分布状態を表したものを電子雲ということ、電子が存在する空間領域を軌道というこの説明と、s,p,d 軌道や混成軌道についての説明が、細谷らの提言を受けて入ったと推察された。そして 2011 年 (H23) 検定済、2012 年～2014 年発行の 50 音順に啓林館¹¹⁾、実教出版¹²⁾、数研出版¹³⁾、第一学習社¹⁴⁾、東京書籍¹⁵⁾の高等学校の「化学基礎」の教科書では、掲載位置(本文、巻末)と説明のレベルに各社で違いはあるが、軌道について「電子が存在する確率の高い空間」旨の説明があり、s,p,d 軌道と混成軌道を取り上げていた。

そこで、最新の 2016 年 (H28) 検定済の「化学基礎」の教科書^{16,20)}では量子論はどの様に扱われているか、「電子殻」、「電子配置」、「線スペクトル」、「原子軌道(電子軌道)」、「電子の存在確率」、「分子模型と分子のモデル」、「混成軌道」の量子論に関する 7 つの用語をキーワードにして調べた。その結果、本文中に記載があった用語は、「電子殻」、「電子配置」と「分子模型と分子のモデル」であり、他は本文、巻末の違いはあるが「発展」の欄に記載されていた。また教科書により、原子内の電子の存在確率が高い領域を「原子軌道」と呼ぶか「電子軌道」とするかの違いがあり、著作者の高校化学における量子論の認識に違いがあると考えられた。なお、第一学習社の教科書¹⁹⁾のみ「原子軌道」と記述していた。原子軌道から分子軌道への拡張を考えると、この表記が自然であると筆者は考える。

文部科学省は、平成 30 年 7 月公示の高等学校学習指導要領解説 理科編 理数編にて、「化学」における「人間生活の中の化学」の項目中で「化学が築く未来について」として、今後の発展が期待されている化学とその応用についての事例の一つに、「大規模量子化学計算による物質の高精度シミュレーション」²¹⁾を挙げていた。画期的ではあ

るが、量子論について現行の指導要領²²⁾と同様に表立った記載がない²³⁾ことから、学習内容と応用の間の隔たりが大きいと思われた。新学習指導要領に基づく教科書で、量子論がどの様に記述されるか注目される。

3. 化学の授業への量子論の導入時期の検討

教員養成課程の化学の授業への量子論の導入時期と授業内容を検討する為、理科専修の学生らを対象に、高等学校時に量子論に基づいた説明を受けた経験の有無、及び現在の理解の状況についてのアンケートを筆者の化学の授業を履修している1年生から4年生までの計35名に対し実施した。本アンケートの結果は、授業内容の検討の為の参考資料として用い、その詳細は非公開とした。

3-1 アンケートの質問項目

次にアンケートの11個の質問項目を抜粋し示した。

- 1) 高等学校における化学の履習状況と履修した化学の科目名。
- 2) 高等学校で用いた「化学」と「化学基礎」の教科書の出版社名。
- 3) 「量子」という用語を高等学校時に聞いたことがあるか。
- 4) 3)で有と答えた場合、何の授業で聞いたか。授業外で聞いた（知った）場合は、どこで聞いたか、何を読んだか等、具体的に答えること。（例：科学館の名称、書籍名等）
- 5) 「分子模型」を高等学校時に組み立てた経験がある人は、その授業内容、単元名及び組み立てた分子名。組み立てた経験が無い人は、「分子模型」という用語を聞いたことがあるか。
- 6) 「軌道」という用語を高等学校時に聞いたことがあるか。有と答えた場合は、その具体的な説明の内容。
- 7) 「軌道」についての説明。説明が難しい場合は、現時点できちんと理解している内容。

8) 「電子配置」についての説明。説明が難しい場合は、現時点できちんと理解している内容。

9) 水素分子の共有結合についての説明。

10) 高等学校の化学の授業で「混成軌道」について学んだ経験の有無。

11) 10)で有と答えた場合は、メタン CH₄ の構造について混成軌道を用いた説明。

なお今後、一連の学習過程を経た学生らの量子論の理解の程度を評価する際に、本アンケートと同様の質問をし、回答の内容を比較考察する予定である。

3-2 アンケートの結果のまとめと状況分析

先の11個の質問に対する結果と、結果から考察した学生らの量子論の学習状況と理解の状況の概要について以下にまとめた。なお1)～11)の番号は3-1の質問の番号に対応している。

1) 「化学基礎」と「化学」の履修率は極めて高かった。2) 出版社は、先に示した5社¹¹⁻¹⁵⁾のうち2社にやや偏る傾向はあったが、各社万遍なく採択されていた。3),4) 高等学校時において「量子」という用語に馴染みはなく、知っていてもその経緯は物理の授業や本、科学館などであり、化学の授業で知った者はごく僅かであった。5) 高等学校時に「分子模型」を実際に組み立てた者と組み立てた経験は無いが模型の存在は知っていた者を合計すると大よそ半数を超えた。使用した模型は総じてHGS模型であり、スチュアート模型は用いられていなかった。なお、理科専修では1年次必修科目の教科教育法「理科Ⅰ」の授業で分子模型を扱っている。6) 学生らが在籍した高等学校では、電子の「軌道」は話題として取り上げても、概念の説明は行っていないと思われた。7) 理科専修では、2年次選択必修科目の「化学A(化学Ⅱ)」で軌道の説明を行うが、選択必修科目を履修しない者が多く、履修していても電子の広がり方(確率密度)として理解していた者の割合は低かった。8) 「電子配置」の説明は、比較的多くの学生に理解され浸透していた。しかし「電子殻」と「軌道」の区別

がつかない者の割合が高かった。これは質問7)とも関連するが、電子を波動性を持つ粒子として捉えることができず、原子軌道について理解できていないことが原因と考えられた。9) 理科専修では、1年次必修科目の「化学概論」で水素分子の結合について学習しているが、原子核間距離とポテンシャルエネルギーの関連を理解した者の割合は低かった。10), 11) メタン CH₄ の分子構造形成の説明として、混成軌道は、ほぼ全員が学んでいないと答えた。1年生に、メタン CH₄ がなぜ正四面体構造を取るのか考えたことがあるか問うてみたが返答はなく、分子の生成の要因や構造について考える発想自体が無いことが推察された。

3-3 化学の授業への量子論の導入時期の検討

アンケートの結果から、次の(1),(2)の2つの事柄が明らかになった。(1) 理科専修の学生の多くが、高等学校の「化学」の授業で、物質の電子状態について量子論に基づいた説明を受けていなかった。「化学基礎」にある量子論に関連した記載の多くが「発展」として扱われていることも、その原因として考えられた。齊藤⁸⁾の様に、分子の構造をどのように教えるか段階を追って考え方とする高校教員が増えることが望ましい。(2) 学生らの多くが、「電子殻」と「軌道」の違いを理解していないかった。

これらの結果から、量子論の初学者である教員養成課程の学生が、限られた専門科目の開設コマ数の中で、実生活と結びつきにくく、概念の理解に時間要する量子論を理解し活用出来る様になるには、低学年の1年次から継続的に段階を追った学習が必要と考えられた。

4. 量子論の習得を目指した授業内容の構成とその概要

4-1 授業内容の構成

授業内容は大きく5つに分け、解説と演習を含み、次の①から順に⑤へと段階を踏んでいく構成

とした。①量子化学の学術用語の説明(講義)、②量子化学計算ソフトウェアを用いた電子状態、分子運動等の原子・分子情報の可視化(講義と演習)、③可視化された分子構造に関する数値データの確認(講義と演習)、④量子化学の基礎理論の学習(講義と演習)⑤実験データと量子化学計算結果の対応(スペクトル解析の演習)とした。学年配当は、段階①～③は1年次の2つの必修科目、④は2年次の選択必修科目、⑤は3年次の必修科目と選択必修科目(ともに化学実験)とした。なお、各段階毎には試行済みだが、全段階を通して順に経験した学生はまだおらず、現1年生が本試みの最初の学習者である。

4-2 原子・分子の電子状態の可視化

量子論に基づき原子・分子を可視化するツールとして、分子模型、電子雲三次元ガラス彫刻模型NEBULA²⁴⁾、分子軌道計算ソフトウェアとその表示ソフトウェアである Gaussian® 09W, Rev: E.01⁴⁾と GaussView®, Rev: 5.0.9⁵⁾を選択した。分子模型は、学生らに比較的馴染みがあり、結合周りの自由度が高いHGS模型を選択した。NEBULA²⁴⁾は、埼玉大学の時田澄男・時田那珂子らが作成したガラスブロック内で軌道の電子雲が可視化された教材で、分子軌道計算に基づき作成されており、電子の確率密度の分布を視覚で捉えることが出来、学生に好評であった。Gaussian® 09W, Rev:E.01⁴⁾は、世界中で使用されている分子軌道計算ソフトウェアである。授業では、基底関数等の計算条件の検討は省略し、デフォルトに近い設定で計算した。ソフトウェアの使用に際しては、簡易的な操作マニュアルを作成し学生らに配布した。ソフトウェアは英語表記であるが、学生は問題なく使用していた。3年生に対して行った試行実験では、画面上で分子が3次元表示されてわかり易く、赤外吸収スペクトルの伸縮振動や変角振動のピークと対応して分子の振動がアニメーション表示される等、表示ソフトウェアは機能が多彩で分子の電子状態がイメージし易いと、学生らに好評であった。

4-3 授業内容の概要

第1段階：量子化学の学術用語の説明（講義）

1年次必修科目の「化学概論」の授業にて、量子論について紹介し、量子化学分野の学術用語の説明をした。キーワードは、「電子殻」、「電子配置」、「原子軌道（電子軌道）」、「電子の存在確率」、「混成軌道」、「分子軌道」である。軌道は電子の広がりかた（確率密度）を意味し、電子雲で表されること、原子軌道は3次元的な広がりを持つこと、軌道にはエネルギーがあること等について説明した。s,p,d軌道の説明の際には、可視化モデルとしてNEBULA²⁴⁾を用い各軌道の形を視覚的に捉えさせた。

また、水素原子核間距離とポテンシャルエネルギーの関係を模式的に図示し、核間距離と電子雲の重なりの程度が結合形成に関連することを説明した。

第2段階：量子化学計算ソフトウェアを用いた電子状態、分子運動等の原子・分子情報の可視化（講義と演習）

1年次必修科目の教科教育法「理科Ⅰ」の授業にて実施した。まず、HGS模型を用いて、水、メタン、エチレン、アセチレン、ベンゼン、アセトアニリド等の簡単な分子を作成し、次にHGS分子模型で作成した分子についてGaussian[®] 09W, Rev:E.01⁴⁾とGaussView[®], Rev:5.0.9⁵⁾を用い

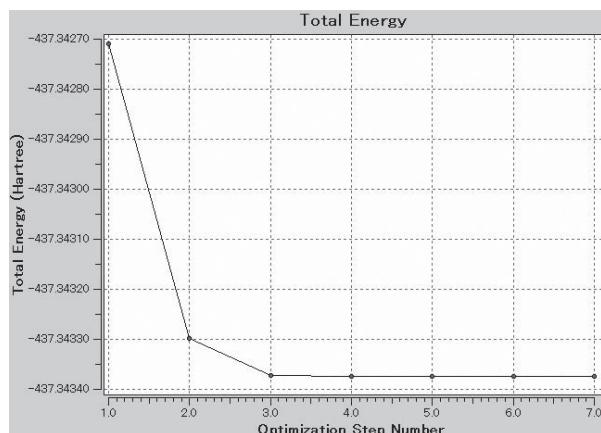
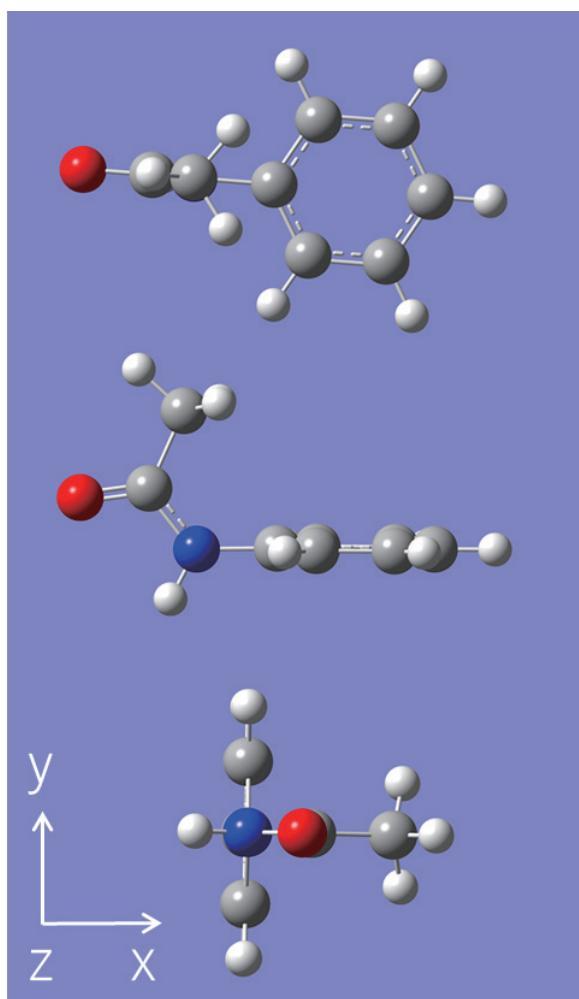


図1 アセトアニリドの構造最適化の過程の全エネルギー

て構造最適化の計算を行う（例として図1）。なお、適切な初期構造を用いないと全エネルギーが下がらなく、計算が終了しても最安定な構造は得られない場合があることを注意した。学生には、構造最適化の過程の分子構造の変化の様子を画面に表示させ確認させた。

第3段階：可視化された分子構造に関する数値データの確認（講義と演習）

第2段階に引き続き、構造最適化により得られた最安定な分子構造（図2）に関する①分子の物理値（結合角、結合距離、全エネルギー、電荷、双極子モーメント、振動エネルギー等）と、②分



灰球:C,白球:H,青球:N,赤球:O

図2 構造最適化されたアセトアニリドの分子構造図
(Hartree-Fock 近似, 基底関数は 6-31G を使用。)

子軌道の情報 (HOMO-LUMO の形状と分子軌道のエネルギー) を計算結果から読み取らせ、用意したプリントに表記させ、分子構造と分子の物性値及び軌道に関する数値データとの対応づけを行った。またこの時、HGS 分子模型と計算で得た HOMO-LUMO 及び x,y,z 軸方向から見た分子構造を比較対応させ、HGS 模型の周囲の電子雲の広がりをイメージさせた。

第 4 段階：量子化学の基礎理論の学習（講義と演習）

2 年次選択必修科目の「化学 A (化学 II)」では、量子化学の理論についてテキスト⁶⁾を用い、数式の導出の説明等を交えて講義する。この段階で学生らは、第 2, 3 段階目で行った分子の可視化の背景には量子論があることを学び、量子化学の基礎理論について学習する。演習の例としては、水素原子の波動関数の動径部分について、学生自身で理論式に基づき表計算ソフトウェアを用いて計算し、図示し、理論式に基づいた量子論の概念の理解に努める。分子軌道計算ソフトウェアの利用は、授業外学習の扱いとする。

第 5 段階：実験データと量子化学計算結果の対応（スペクトル解析の演習）

3 年次必修科目の「化学実験 I, II (化学実験基礎、化学実験 A)」及び選択必修科目の「化学実験 III (化学実験 B)」において、Gaussian[®] 09W, Rev:E.01⁴⁾ と GaussView[®], Rev:5.0.9⁵⁾ を用いて主

としてスペクトル解析を行う。具体的には、化学実験 I と II で行った赤外吸収スペクトル測定の結果と分子軌道計算の結果を対応させ、ピークの帰属を行う。有機化学実験では、これまで有機化合物（アセトアニリド、酢酸エチル）の合成と紅茶葉からのカフェインの抽出を行って来た。実験で得た物質の同定方法の一つに赤外吸収スペクトル法がある。例として図 3 にアセトアニリドの赤外吸収スペクトルの測定結果を示した。これまで学生は、物質の標品のスペクトル（図 3 の黒線）と自身が実験で合成した物質の精製物のスペクトル（図 3 の赤線）との一致の程度を調べ、両エネルギー値が一致したピークに対して、てびき²⁵⁻²⁶⁾等を参考に分子の特性振動のピークのエネルギー値や形状を調べ、その帰属を試みてきた。本試みでは、ピークの帰属の際に分子軌道計算結果を加え、分子の特性振動の帰属に用いることとした。分子振動のアニメーションにより、該当する振動の様子を知ることが出来る。この試みにより、実験結果を理論に基づき考察することを学ぶ。なお、試行計算では実測値と計算値のエネルギー値に違いがあり（表 1），計算結果の精度については今後、計算条件を含めて検討していく必要があった。まだ課題はあるが、3 年生を対象に行った試行実験では、理論計算結果と振動のアニメーション表示は、スペクトル解析と分子振動の理解に役立つものと考えられた。

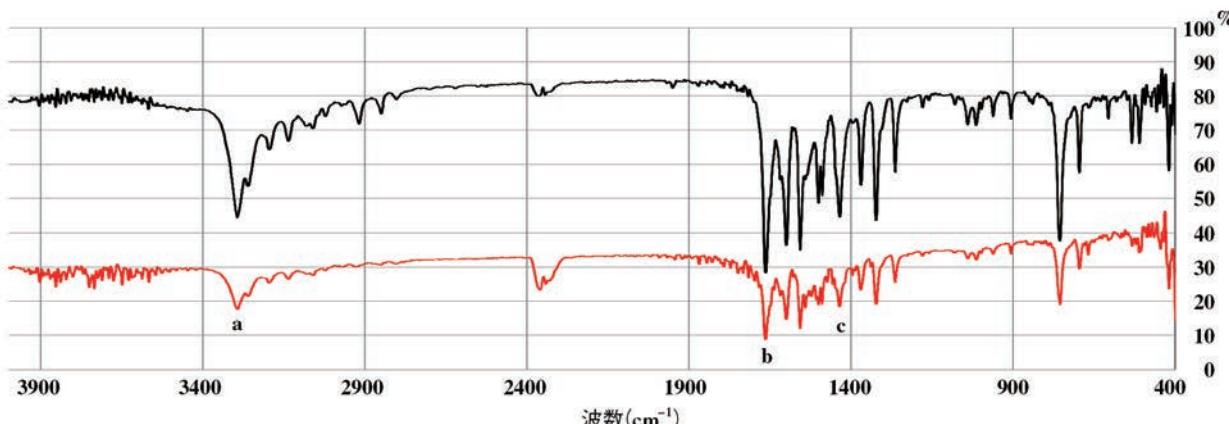


図 3 アセトアニリドの赤外吸収スペクトル（黒線：標品、赤線：合成で得られた物質の精製物）

ピークの記号	実測値 (cm ⁻¹)	計算値 (cm ⁻¹)	ピークの帰属
a	3297	3776	N-H 伸縮振動
b	1660	1915	C=O 伸縮振動
c	1434	1476	C-N 伸縮振動

表1 アセトアニリドの赤外吸収スペクトルの
ピークの帰属 (a,b,c は図3中の記号に対応)

またその他に、化学実験Ⅲ（化学実験B）で行う紫外可視吸収スペクトル法によるメチルオレンジの酸塩基平衡定数の決定の実験において、溶媒の極性の変化に伴い溶液内で分子がどのような安定構造をとるか考察する際に、理論計算から求めた分子のエネルギー値が参考になる。

5.まとめと今後の課題

専門科目の学習に充てる時間に制限のある教員養成課程の学生に対し、量子論に基づく原子・分子の概念の育成を目的に、化学の授業へ化学の基礎概念の可視化ツールとして量子化学計算ソフトウェアを導入した。大学1年次にて量子論の導入として量子化学計算ソフトウェアを用いて原子・分子の状態を可視化する試みは、量子論の理解を助け、理論への移行がスムーズになることが期待された。量子化学計算による原子・分子の電子状態の可視化は、これまで2次元空間に静止していた分子が、動きを伴い3次元表示され、また電子の広がりかたが立体的になることで、学生の原子・分子に対する興味・関心を喚起し、その理解に役立った。可視化モデルから得た原子・分子の情報をその後の量子論の学習、応用としてのスペクトル解析へと繋げていくことで、量子論に基づいた原子・分子の概念の理解が学生の中に育つと期待している。今後の課題として、実測値により良く対応する分子軌道計算の計算条件の検討、一連の過程を経た学生の量子論の理解の程度の評価に基づく授業内容の改訂が挙げられる。

謝辞

本テーマは、平成28年度文教大学学長調整金を得ることで計画・実施出来ました。これにより、多くの学生に量子論を学ぶ環境を提供することができる様になりました。申請を採択して下さった学長（現理事長）の野島正也先生に深謝申し上げます。

引用・参考文献

- 1) 船山智代. “科学的思考力の育成を目指した学生主体の化学実験プログラムの作成－ラジカル消去率の測定による物質の抗酸化能の評価－”. 文教大学教育学部紀要, 2015, 49, p.231-240.
- 2) 松下佳代編著. ディープ・アクティブラーニング：大学授業を深化させるために. 効果書房, 2015, 274p., ISBN978-4-326-25101-8.
- 3) 船山智代. “化学の基礎概念の理解と活用を繋ぐ因子の検討－化学の授業内容の振り返りとディープ・アクティブラーニングの観点から－”. 文教大学教育学部紀要, 2016, 50, p.263-270.
- 4) Gaussian® 09W, Revision E. 01 Version; 64-bit, M. J. Frisch et all., Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
- 5) GaussView®, Revision 5.0.9. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
- 6) 池上雄作, 岩泉正基, 手老省三共著. 化学教科書シリーズ第2版 “物理化学I 物質の構造”. 丸善, 2001, 178p., ISBN978-4-621-04756-9.
- 7) 佐藤明子・細谷治夫. “高校化学に量子論を”. 化学と教育, 2003, 51 (5), p. 316-319.
- 8) 齊藤幸一. “高校現場で分子の構造をどう教えるか－高校3年間の授業を通して－”. 化学と教育, 2017, 65(9), p.432-435.
- 9) 長倉三郎・竹内敬人ほか. 化学II. 東京書籍, 2005, 249p., ISBN4-487-15612-2.
- 10) 井口洋夫・木下 實ほか. 化学II新訂版. 実教出版, 2012, 21p., ISBN978-4-407-20150-5.
- 11) 斎藤烈・藤嶋昭・山本隆一ほか. 化学基礎. 新興出版社啓林館, 2011, 240p., ISBN978-4-402-05590-5.
- 12) 井口洋夫・木下 實ほか. 化学基礎. 実教出版, 2012, 288p., ISBN978-4-407-20190-1.
- 13) 辰巳 敬ほか. 化学基礎. 数研出版, 2012, 232p., ISBN978-4-410-81107-4.
- 14) 山内 薫ほか. 高等学校 化学基礎. 第一学習社, 2014, 304p., ISBN978-4-8040-0620-8.

- 15) 竹内敬人ほか. 化学基礎. 東京書籍, 2015, 240p., ISBN978-4-487-18741-6.
- 16) 斎藤烈・藤嶋昭ほか. 化学基礎 改訂版. 新興出版社啓林館, 2016, 256p., ISBN978-4-402-08575-9.
- 17) 木下 實・大野公一ほか. 化学基礎 新訂版. 実教出版, 2018, 280p., ISBN978-4-407-20373-8.
- 18) 辰巳 敬ほか. 化学基礎. 数研出版, 2018, 233p., ISBN978-4-410-81108-1.
- 19) 山内 薫ほか. 高等学校 改訂 化学基礎. 第一学習社, 2018, 249p., ISBN978-4-8040-0891-2.
- 20) 竹内敬人ほか. 改訂化学基礎. 東京書籍, 2018, 240p., ISBN978-4-487-16547-6.
- 21) 文部科学省. “高等学校学習指導要領解説 理科編 理数編”. 文部科学省. 2018, p.109. http://www.mext.go.jp/component/a_menu/education/micro_detail/_icsFiles/afieldfile/2018/07/13/1407073_06.pdf. (参照 2018-11-02).
- 22) 文部科学省. “高等学校学習指導要領解説 理科編 理数編”. 文部科学省. 2009, 54p., ISBN978-4-407-31926-2.
- 23) 文部科学省. “高等学校学習指導要領解説 理科編 理数編”. 文部科学省. 前掲21), p.88.
- 24) N. Tokita, S. Tokita and T. Nagao, “A Three-Dimensional Representation of Born's Probability Densities of Hydrogen Atomic Orbitals in Glass Blocks”. J. Comput. Chem. Jpn., 2006, 5(3), pp. 153-158.
- 25) 泉 美治ほか. 機器分析のてびき (1) (増補改訂版). 化学同人, 1989, 154p., ISBN4-7598-0144-8.
- 26) 泉 美治ほか. 第2版機器分析のてびき IR, NMR, MS,UV データ集. 化学同人, 1998, 126p., ISBN4-7598-0295-9.