

# 高校生の化学の理解における立体模型とコンピュータの役割—夏休み研究実習から—

渡部真央<sup>1</sup>、野口瑤<sup>1</sup>、山田寛尚<sup>1,2</sup>、宮川毅<sup>1</sup>、森河良太<sup>1</sup>、高須昌子<sup>1</sup>

## 1. はじめに

高校の化学の教科書<sup>1)</sup>には、原子や原子同士の結合について、またタンパク質のような複雑な分子まで多くの記述がある。高校生はこのように充実した内容の教科書を勉強しているのだが、実際の理解度はどのくらいだろうか。また、理解を深めるにはどのような工夫ができるだろうか。

2016年に行われた高校生を対象にした夏休み研究実習において、生命物理科学研究室では、化学に関するテーマで実習を行った。実習の内容、高校生の理解度、考察について本稿で述べる。

## 2. 高校生を対象とした夏休み研究実習の概要

東京薬科大学生命科学部では、毎年夏に、高校生対象の夏休み研究実習を開催している。2016年には、8月3日と4日の2日間の日程で行われた。あらかじめ、細胞、動物、植物、化学の4分野、6テーマがホームページに掲載され、高校生が希望するテーマを申し込んだ。生命物理科学研究室では、化学分野における1つのテーマ「毒にも薬にもなる物質」で募集したところ、2名の高校生が希望して実習を行った(図1)。



図1 生命物理科学研究室における夏休み研究実習の様子

### 2.1 テーマ概要

募集時の内容説明は次のようなものであった。

「毒にも薬にもなる物質： 私たちの身体に不可欠なアミノ酸は、数百個から数万個結合するとタンパク質、数十個までならペプチドを作ります。まずアミノ酸を全種類、模型を使って形を見ます。次に、植物から見つかった、薬効や毒性を持つペプチドの模型を組み立て、コンピュータで動かしてみます。」

実習で対象とした分子は、RA-VII と呼ばれるアカネ科植物の根から単離された二環性ペプチドである<sup>2)</sup>。これに関して、当時博士課程の大学院生であった野口氏らがシミュレーションによる研究を進めていた<sup>3)</sup>。この分子を材

<sup>1</sup> 東京薬科大学生命科学部 生命物理科学研究室

<sup>2</sup> 統計数理研究所

料に研究実習の内容を決めた。

## 2.2 実習の内容

本節では、実習の具体的な内容と高校生の理解度について述べる。

### 2.2.1 基礎知識の学習

事前に生命物理科学研究室の4年生と大学院生が、タンパク質に関する資料を用意した。資料作成に当たっては、「細胞の分子生物学」<sup>4)</sup>が役立った。この本は、多くの大学の生命科学部で教科書や参考書として使われている。作成した資料を用いて、担当TA（ティーチングアシスタント）である当時学部4年であった渡部氏が、高校生にタンパク質の構造や機能を説明した（図1）。2人の高校生は、高校3年生と2年生であるため、高校で勉強している内容に差があった。タンパク質を構成するアミノ酸や、タンパク質の立体構造の形成など、初めて触れる知識も多かったようで、熱心に耳を傾けていた。

### 2.2.2 立体模型の作成

次に、学習した知識をもとに、20種類のアミノ酸の分子模型を作成した。分子模型はモル・タロウ<sup>5)</sup>を利用した。モル・タロウを選んだ理由は、色がきれいなこと、価格が手頃なことである。作成した模型の例は図2にある。

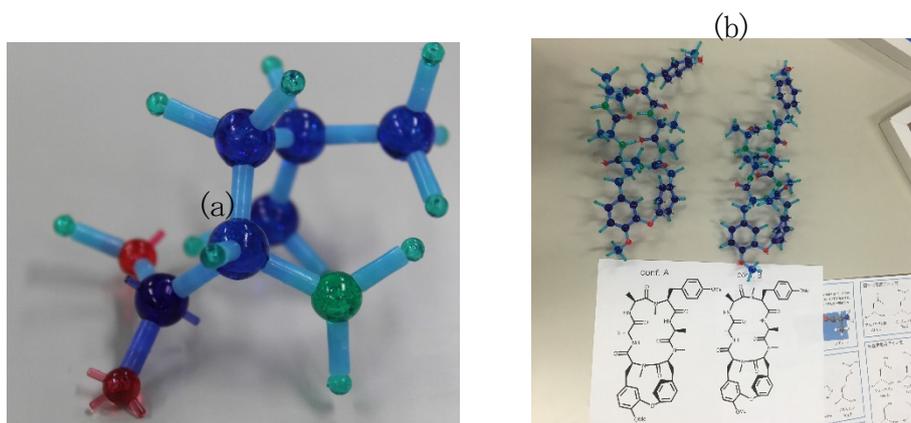


図2 夏休み研究実習で組み立てた立体模型（モル・タロウを利用）

高校生たちは、立体的なタンパク質の構造に初めは戸惑っていたようだが、実際に手を動かし、組み立てることで、だんだん理解したようだった。化学構造式についての知識は、大学受験にも役立つことから、学習に関する意欲が高まったようだった。アミノ酸をずらっと並べるときれいであるため、達成感もあるようだった。高校生はスマートフォンで写真を撮っていた。アミノ酸の模型を作成して理解が深まった後で、シミュレーションの対象としたRA-VIIの2つのコンフォメーションの模型も作成した（図2(b)）。

### 2.2.3 コンピュータ・シミュレーション

化学に関する基礎知識を学んだ後に、コンピュータ・シミュレーション<sup>6)</sup>による構造解析に取り組んだ。構造解析には、分子動力学シミュレーションのソフトウェアであるGROMACS<sup>7)</sup>を用いた。分子動力学は、運動方程式を数値積分することにより、分子を解析する手法である。物理学についての知識は、高校生により異なっていたため、ニ

ニュートンの運動方程式<sup>9)</sup>について渡部氏が簡単に説明をした。ホワイトボードを用いて、式を書きながら解説した。

コンピュータは、研究室のノートパソコン Macbook Air を使った。分子動力学シミュレーションについては、研究室の計算サーバーである Mac Pro に接続して計算した。高校生はコンピュータにあまり触れる機会がないらしく、操作方法がわからずに手が止まってしまうことが多かった。ターミナルによるコマンド操作に慣れるのに時間がかかった。また、エラーメッセージが英語で表示されるため、最初はとまどっていたが、TA のわかりやすい解説によって、少しずつ操作に慣れていった。また、シミュレーションは RA-VII 分子の 2 つのコンフォメーション (A, B) それぞれについて、高校生 2 人が分担して行った。渡部氏らが作成したマニュアルを参考にしながら、根気強く操作を行って、シミュレーションを進めることができた。シミュレーションの待ち時間を使って、コマンド操作について、簡単に説明を行った。

シミュレーション結果の解析では、分子が時間経過により構造変化を起こしていく様子を観察した。PyMol<sup>9)</sup> や gnuplot<sup>10)</sup> などのソフトウェアを利用して、シミュレーション結果の解析を行った。タンパク質の立体構造が画面に映し出されたときには、達成感を感じたようだった。画面に映し出された構造を鮮やかに色分けして解析を行うことで、視覚的に捉えられるようにしたことがよかったようである。ソフトウェアを操作する段階で、シミュレーションの流れを詳細に図で示した方が、高校生の理解度が上がったかもしれない。

#### 2.2.4 パワーポイント作成と発表

2 日目には、高校生が解析結果を研究室内で発表するため、パワーポイントを用いて資料を作成した。高校の授業では、自分たちの成果を発表する機会はないそうで、緊張した様子だった。小学校以来、久しぶりにパワーポイントに触れた高校生もいた。シミュレーション結果を整理しながら、パワーポイントを作成した。発表では緊張しながらも、無事にやり遂げることができた。

#### 2.3 実習を振り返って

参加した 2 名は学年が違うこともあり、化学に対する理解度はかなり違った。高校生にはやや難しい内容も含まれていたが、手を動かして模型を組み立てて、画面で動きを見ることによって、化学への理解が進んだようであった。

なお 2 名の高校生のうち、当時高校 3 年だった人は、翌年に東京薬科大学生命科学部に入学して、現在は著者の 1 人 (高須) のゼミ生である。夏休み研究実習で教えてもらった大学院生と再会することができ喜んでいて、現在も元気に大学生活を送っている。

### 3. まとめ

「立体模型」および「コンピュータ・シミュレーション」の 2 つの方法を用いて、高校生の分子に関する理解を深めることができる。この 2 つの方法を高校の化学の授業に導入する場合、それぞれの特徴により難しさが異なる。

立体模型は、紙の上では理解しにくい 3 次元構造の理解に役立つ。また、高校の化学の授業において、教員 1 名に対して、30-40 人の生徒がいたとしても、授業が成立すると考えられる。大体の指針を示せば、楽しく作ることができるだろう。

一方、コンピュータ・シミュレーションに関しては、今回は生徒 2 人に TA が 1 名だったので、問題なかったが、教員に対して生徒数が多い状況では、難しいかもしれない。また、コンピュータをある程度の台数用意することも

必要となる。

シミュレーションを実際に生徒にやってもらうのではなく、シミュレーションの結果の動画を教員が授業で見せる、という方法もあるだろう。立体模型だけでは、「原子の位置はずっと動かないで固定されている」と思い込んでしまう生徒もいるかもしれない。タンパク質の分子が溶媒や他の分子の影響を受けて動く様子を動画で見て、興味を持つ生徒もいるだろう。

様々な課題はあるが、今後、立体模型だけでなく、コンピュータ・シミュレーションも高校の授業に普及することが期待される。

## 謝辞

夏休み研究実習の実施にあたり、当時の広報委員長の多賀谷光男先生および生命科学事務課の皆様大変お世話になりました。この場を借りてお礼申し上げます。

## 参考文献

- 1) 高等学校理科用教科書「化学」数研出版
- 2) Itokawa H, Takeya K, Mihara K, et al. Chem. Pharm. Bull. 31 (1983):1424-1427
- 3) Noguchi Y, Yamada H, Mori S, Miyakawa T, Morikawa R, Yokojima S, Hitotsuyanagi Y, Takeya, K, Takasu M, Mol. Sim. 44 (2017) 73-84
- 4) アルバーツ他、細胞の分子生物学 第5版、2011年、ニュートンプレス
- 5) モル・タロウ <http://www.talous-world.com/index.html>
- 6) 上田顕、コンピュータシミュレーション—マクロな系の中の原子運動、1990年、朝倉書店
- 7) GROMACS <http://www.gromacs.org/>
- 8) 小出昭一郎、物理学、1997年、裳華房
- 9) PyMOL <http://pymol.org/>
- 10) gnuplot <http://www.gnuplot.info/>