

化学平衡シミュレーションソフトウェアの高専化学教育への 導入検討

綱島克彦,^{1*} 山崎康夫,² Hamp Turner,³ Andrzej Anderko⁴

¹ 和歌山工業高等専門学校物質工学科 (〒644-0023 和歌山県御坊市名田町野島 77)

² 日本化学工業株式会社 (〒136-8515 東京都江東区亀戸 9-11-1)

³ Turner Technology, LLC (102 Woodmont Blvd., Suite 200, Nashville, TN 37205, USA)

⁴ OLI Systems, Inc (108 American Road, Morris Plains NJ 07950, USA)

Introduction of Chemical Equilibrium Simulation Software to Chemical Education in National College of Technology

Katsuhiko Tsunashima,^{1*} Yasuo Yamazaki,² Hamp Turner,³ and Andrzej Anderko⁴

¹ Department of Materials Science, Wakayama National College of Technology
(77 Noshima, Nada-cho, Gobo, Wakayama 644-0023, Japan)

² Nippon Chemical Industrial Co., Ltd. (9-11-1 Kameido, Koto-ku, Tokyo 136-8515, Japan)

³ Turner Technology, LLC (102 Woodmont Blvd., Suite 200, Nashville, TN 37205, USA)

⁴ OLI Systems, Inc. (108 American Road, Morris Plains, NJ 07950, USA)

*E-mail: tsunashima@wakayama-nct.ac.jp (K. Tsunashima)

(Received November 24, 2011; Accepted December 15, 2011)

An attempt to introduce chemical equilibrium simulation software to chemical education in Wakayama National College of Technology is presented in this report. Compared to molecular modeling software, software simulating inorganic chemical systems has been rarely used in chemical education. The OLI Analyzer is well known to be useful simulation software to estimate inorganic chemical equilibrium reactions and physicochemical properties of aqueous chemical systems; therefore, we employed the OLI Analyzer as an auxiliary educational tool for lectures related to inorganic chemistry. In order to support the lectures of inorganic material chemistry, a computer simulation of the selectivity of the precipitation reaction of hydroxyapatite was demonstrated using the OLI Analyzer as an appropriate example. In a practical material science experiment, the boiling points of sodium chloride aqueous solution under several pressure conditions were also calculated to estimate the corresponding temperature elevations. The participating students were relatively interested in the practical use of the chemical equilibrium simulation, which suggests that the introduction of the OLI Analyzer might be educationally effective for lectures related to inorganic chemistry.

Key Words : Chemical equilibrium, Computer simulation, OLI software, Inorganic chemistry

1 緒言

化学教育へコンピュータ計算を取り入れて活用する取り組みはしばしば行われている。よく知られているのは有機化学の授業における分子モデリング(分子軌道計算ソフトウェア)の活用であり、コンピュータによる高速な計算と電子構造の視覚化によって難解な量子化学的考察を助ける効果がある。一方、無機化学系の計算をカバーするソフトウェアは有機化学計算のそれに比べると著しく少なく、そのため無機化学の授業においてコンピュータを活用する機会も少ないように思われる。このような状況では、無機化学は有機化学に比べて地味であるという印象を学生に与え

てしまうことも否定できない。

無機化学系を対象にする代表的なソフトウェアとしては、「OLI Analyzer」(OLI Systems Inc, USA)が知られている(Fig. 1) [1]。これは、Gibbs 自由エネルギー計算を基礎とする熱力学平衡計算エンジンと、1000 種類を超える豊富な化学種データベースを搭載している化学平衡系のシミュレーションソフトウェアである。気-液、液-液、固-液のように液相が関わる化学平衡系における化学種の展開(反応式の推定)、および物理化学特性データ(化学種の物質量や分圧、液相の沸点、凝固点、密度、粘度、電気伝導率、イオン強度等)を自在にシミュレートすることが可能である[2-8]。このソフ

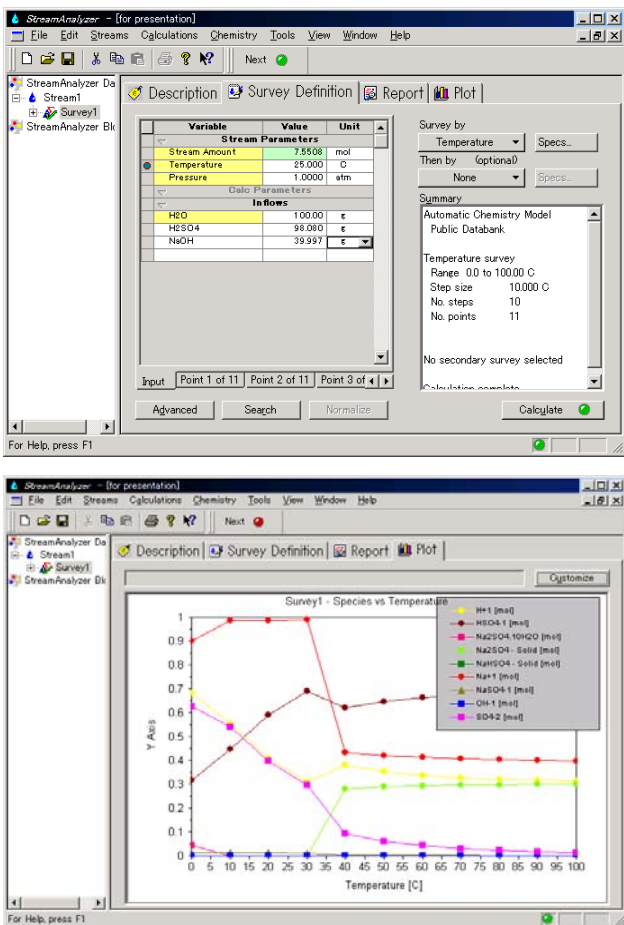


Fig. 1 User interface of OLI Analyzer.

ソフトウェアは無機化学の授業で学習する殆どの物性系や反応系をシミュレートすることができ、無機化学教育の支援ツールとして興味深い。また、実際に国内外の多くの企業の研究開発や製造工程管理等に導入されている実績もことから、OLI Analyzer の教育現場への導入は実践的技術者教育の一環と位置付けられるとも言える。それにもかかわらず、OLI Analyzer のような化学平衡計算ソフトウェアの教育機関における教育的活用事例は少ないのが現状である。

そこで我々は、エンジニア育成のための基礎教育と実践教育を主眼とする工業高等専門学校（高専）での授業や実験実習を対象とし、当該化学平衡計算ソフトウェアを教育支援ツールとして導入することを考案した。本論文では、和歌山高専物質工学科の無機化学に関連する授業や実験実習に OLI Analyzer を試験的に導入し、コンピュータシミュレーションの併用による教育支援的効果を検証した結果を報告する。

2 方法

OLI Analyzer については、ver. 3.1 を 1 ライセンス使用した。これをノートパソコン 1 台にインストールし、授業においては、ソフトウェア画面をプロジェクトで投影して計算のデモンストレーションを行い、支援的に用いた。およ

び実験実習において投影して説明に用いた。実験実習では、必要に応じてソフトウェアを学生に操作させた。

無機化学関連授業および実験実習として、和歌山高専物質工学科の「無機材料化学」（4 年次）および「物質基礎実験Ⅱ」（3 年次）をそれぞれ検討対象とした。教育的効果を検証するために、適宜アンケートを実施した。

3 結果と考察

まず「無機材料化学」の授業において OLI Analyzer を試験的に用いた。「無機材料化学」では種々のセラミックス材料の合成反応について事例を挙げて解説しており、一例として、水酸化カルシウムとオルトリン酸からヒドロキシアパタイト ($\text{Ca}_5(\text{OH})(\text{PO}_4)_3$) の沈殿を生成する水系の反応をシミュレーションの対象とした。Fig. 2 に、OLI Analyzer による計算結果の表示画面を示す。この計算結果を授業で示し、pH 範囲によってヒドロキシアパタイトやその他のリン酸塩との沈殿生成の選択性が変わること解説した。これに加えて、温度条件の変化や、他の化学種との混合系も自在にシミュレートできることを示したところ、学生の工学的な興味を多少なりとも惹き起こすことができた。ただし、OLI Analyzer による計算は飽くまでも化学平衡計算をベースにしており、平衡状態に到達するまでの過渡の状態を表すものではなく、速度論的情報は得られないことに注意すべきである。この点は授業で十分に補足する必要があるが、平衡論と速度論との相違を説明する好機であるとも言える。

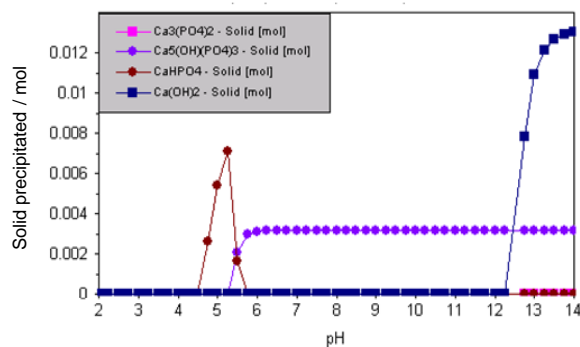


Fig. 2 Calculation output of the precipitation of hydroxylapatite by OLI Analyzer.

「物質基礎実験Ⅱ」では、食塩水の沸点上昇の実験において OLI Analyzer を利用した。この実験では、実測値を食塩水濃度とモル沸点上昇から予測できる沸点上昇値と比較検討することを一つの目的としている。実測値と予測値との差異を生ずる一つの要因として、実験当日の大気圧の関連性が考えられる。そこで、気象条件として高気圧下および低気圧下での気圧を考慮し、OLI Analyzer の沸点計算モード (Bubble point calculation) を用いて検証したところ (Fig. 3)、沸点上昇値に $\pm 1^\circ\text{C}$ の変動が有り得ることが分かった。このように、通常の実験では再現が難しい微小な物理化学的条

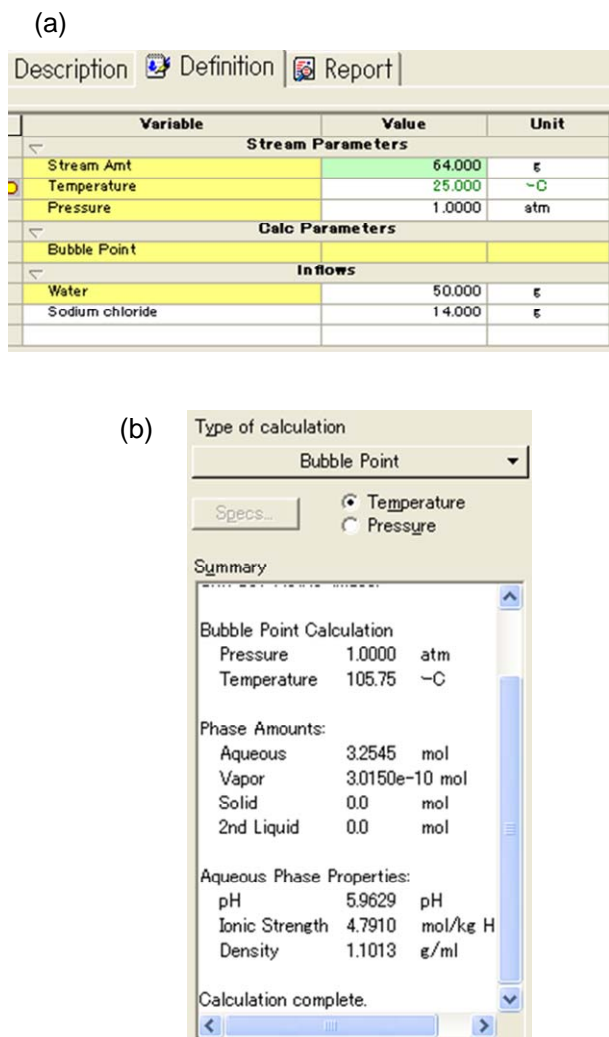


Fig. 3 User interface of OLI Analyzer at the bubble point calculation of sodium chloride aqueous solution: (a) definition of calculation input. (b) a result of bubble point calculation including the other aqueous phase properties such as pH, ionic strength and density.

件の変化を入力して推算できることは、コンピュータシミュレーションの大きなメリットであることを実験実習と併用することによって示すことができた。また、OLI Analyzer は沸点以外の溶液特性として pH、イオン強度および密度の計算結果も表示でき、このような付加的情報も学生の興味を惹く題材になるものと考えられる。

以上の試験的導入検討に関してアンケート等により学生の意見を集約したところ、「板書では説明しにくい内容を理解するときに助けになるかもしれない」「物理化学など、難しい内容を勉強する時に、併用して使用してみることに意味があると思う」「未知の反応を行うときの事前のチェックに使えるのではないか」「卒業研究で有用ではないか」という積極的な指摘があったことから、多少の教育的あるいは啓蒙的効果は見られたと考えられる。一方、「理論が難しい」「慣れれば使えるとは思いますが必要に迫られなければ使わない」という意見も少なからず見られ、学生の

理解を促すには更なる工夫が必要であることも分かった。

また OLI Analyzer は操作性の高いソフトウェアであり便利ではあるが、計算エンジンがブラックボックス化されているため、計算原理（熱力学、化学平衡論、活量係数モデル等）については授業で補足説明する必要がある。加えて、ユーザーインターフェースは英語であることから工学英語教育という点では有利であるが、学生にとっては少なからず障壁になるようであった。このような点から考えると、OLI Analyzer は低学年の授業に用いるよりも、どちらかといえばより高学年の授業に適するソフトウェアであるかもしれない。

さらに、OLI Analyzer は反応熱量計算や金属腐食計算等の機能も充実している[9]。したがって、高専本科での無機化学の授業のみならず、高専専攻科や大学学部での初等教育課程のように、より高い教育課程での無機化学、物理化学、電気化学、化学工学、分析化学などの授業への応用展開も可能であると考えられる。また、OLI Analyzer には Excel インターフェース「calcAQ」[10]も用意されていることから、計算結果の統計的処理やフローシートシミュレーションとの組み合わせも可能であり、より多彩な授業支援システムの構築が可能である点も興味深い。

4 結論

化学平衡シミュレーションソフトウェア「OLI Analyzer」を和歌山高専物質工学科の無機化学系の授業や実験実習に試験的に導入し、その教育支援的効果を検証した。化学反応や物理化学現象の解析や推算に用いるメリットについては学生のポジティブな反応と理解を確認したが、ブラックボックス化されている計算エンジンに関する理論的内容の解説については更なる工夫を要することも分かった。

謝辞

本研究は、平成21年度和歌山高専教育奨励費の助成を受けて実施された。

文献

- [1] <http://www.olisystems.com/>
- [2] P. Wang, A. Anderko, and R. D. Young, A speciation-based model for mixed-solvent electrolyte systems, *Fluid Phase Equilibria*, vol. 203, No. 1-2, pp. 141-176 (2002).
- [3] P. Wang and A. Anderko, Modeling Self-Diffusion in Mixed-Solvent Electrolyte Solutions, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 42, No. 14, pp. 3495-3504 (2003).
- [4] P. Wang, A. Anderko, and R. D. Young, Modeling viscosity of concentrated and mixed-solvent electrolyte systems, *Fluid Phase Equilibria*, vol. 226, pp. 71-82 (2004).
- [5] P. Wang, A. Anderko, and R. D. Young, Modeling Electrical Conductivity in Concentrated and Mixed-Solvent Electrolyte Solutions, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 43, No. 25, pp. 8083-8092 (2004).
- [6] J. J. Kosinski, P. Wang, R. D. Springer, and A. Anderko, Modeling acid-base equilibria and phase behavior in mixed-solvent electrolyte systems, *Fluid Phase Equilibria*,

- vol. 256, No. 1-2, pp. 34-41 (2007).
- [7] P. Wang and A. Anderko, Modeling Thermal Conductivity of Concentrated and Mixed-Solvent Electrolyte Systems, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 47, No. 15, pp. 5698-5709 (2008).
- [8] P. Wang and A. Anderko, Modeling chemical equilibria, phase behavior, and transport properties in ionic liquid systems, *Fluid Phase Equilibria*, vol. 302, No. 1-2, pp. 74-82 (2011).
- [9] P. Wang, L. L. Wilson, D. J. Wesolowsky, J. Rosenqvist, and A. Anderko, Solution chemistry of Mo(III) and Mo(IV): Thermodynamic foundation for modeling localized corrosion, *Corrosion Science*, vol. 52, No. 5, pp. 1625-1634 (2010).
- [10] <http://calcaq.com/>