

「分子に触れて力を感じる」  
体験型化学教材  
『HaptiChem（ハプティケム）』の公開

平成19年3月15日

国立情報学研究所

佐藤 寛子



1. 「化学」は理科教育の重要な要素である
2. 化学教育の効果的な推進のための教材へのニーズ
3. これに応える体験型化学教材『HaptiChem』の開発
4. 化学や生命科学の基本要素である分子に着目
5. 「見て触って分子の力を感じる」ことができる新教材  
～各レベルに応じた効果を期待
6. 高校の化学教育に利用して効果を実証  
～化学好きの高レベルの生徒を対象とした実証例

## 分子間力を感じる体験型化学教材 『HaptiChem』

- ▶ 情報学と化学の融合（**化学情報学**：  
**ケモインフォマティクス**）による体験型化学教材
- ▶ 分子を **3次元空間**で操作して**分子間力**を感じる
- ▶ **純国産**のシステム
- ▶ **共同開発**：  
東京工業大学 精密工学研究所 佐藤 誠 研究室



化学 物理 生物 地学 数学

分子

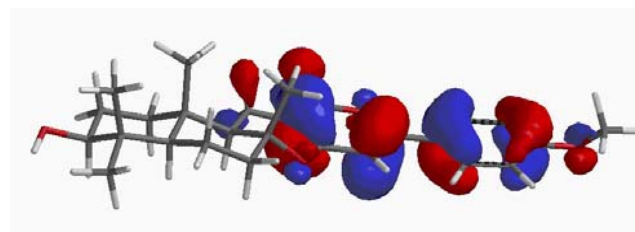
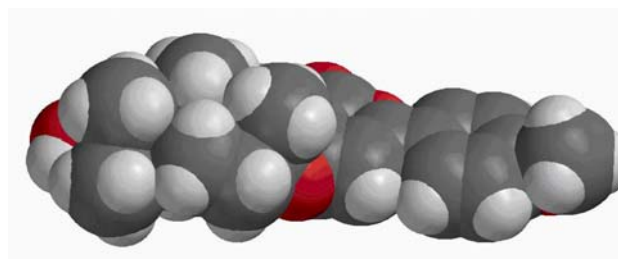
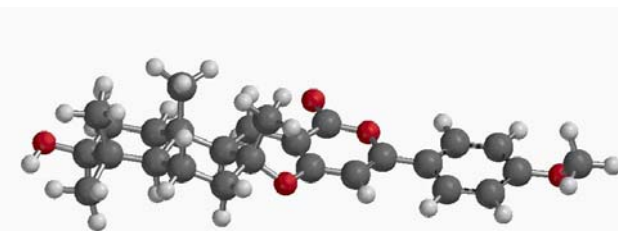
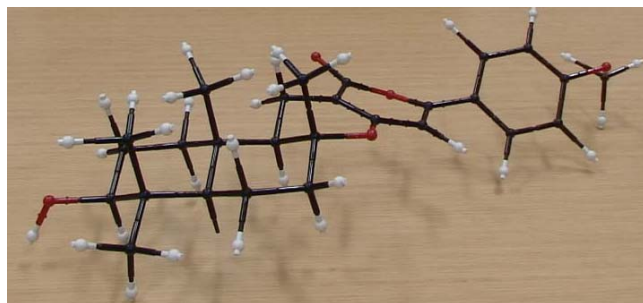
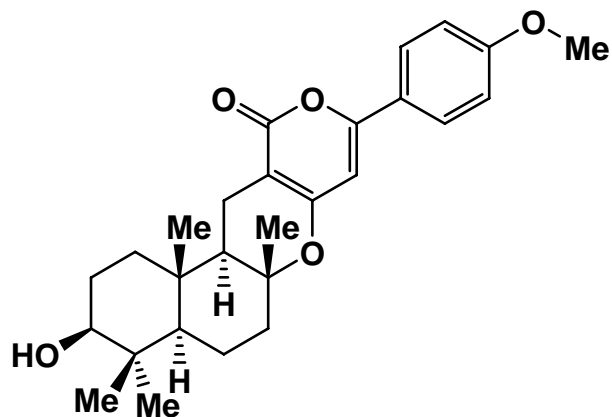
可視化 (=見る) + 可触化 (=触る) 感覚の  
融合効果を利用した化学教材

⇒ 居眠り防止

⇒ 興味をもつきっかけ

⇒ 理解の助け

⇒ 考える手がかりを与える  
(モデルを疑う視点も含む)



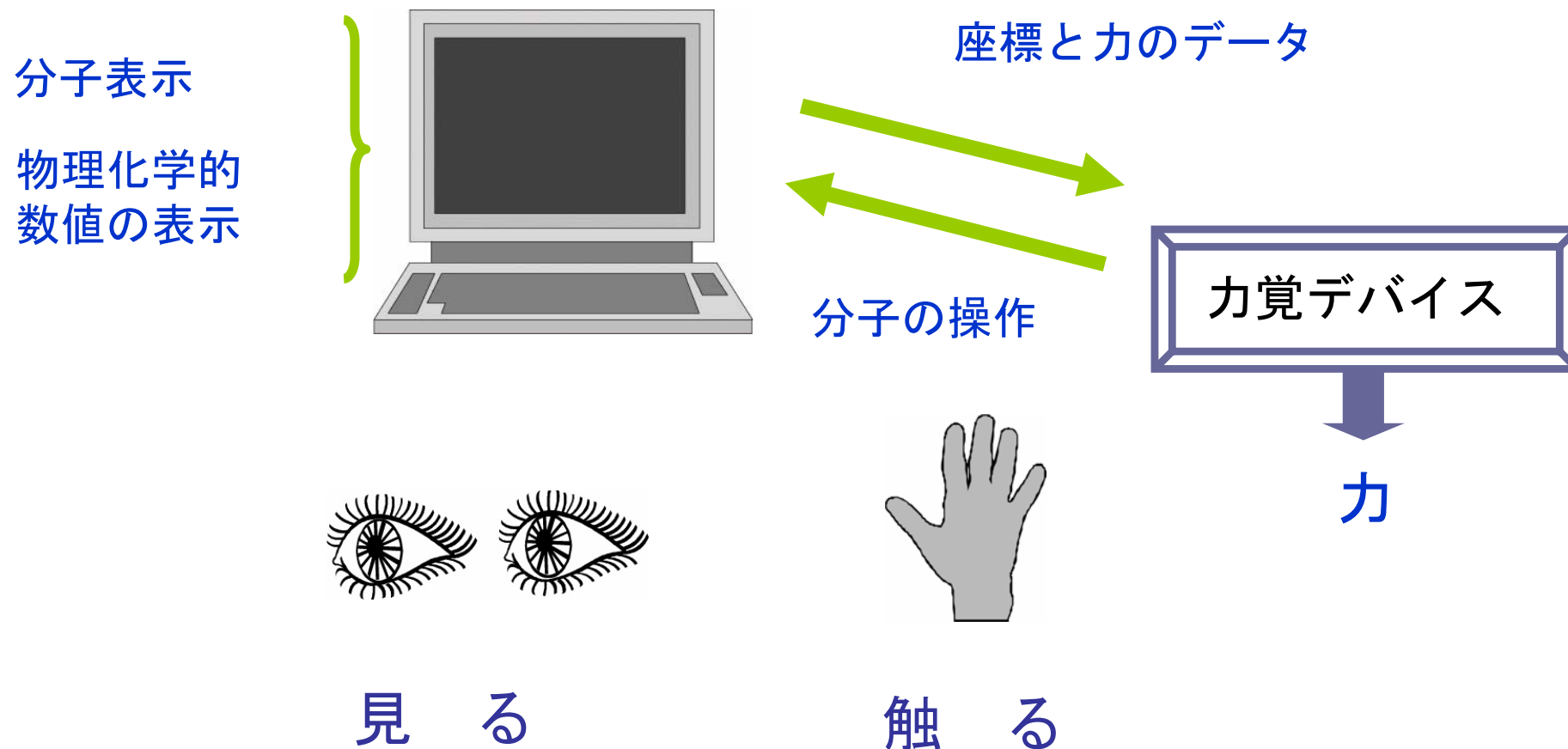
目に見えない対象や概念を理解し考察する化学分野では、  
視覚的な表現やモデルは極めて重要



**触覚**による人と化学情報のインタフェースの拡張

- ▶ 力覚デバイスを利用した分子模型システム
- ▶ 分子の3次元空間における移動や回転と、それに応じて変化する分子間に働く力の大きさと方向を視覚と力覚で感じることでできる操作系を提供

# HaptiChem の概念図



## HaptiChem 069

- ▶ 最も基本的な分子間力の学習教材
- ▶ 希ガス分子間のファンデルワールス相互作用
- ▶ Merck Force Fieldの非結合相互作用パラメータを利用
- ▶ 稼動環境: Windows XP



# 力覚デバイス：スパイダー

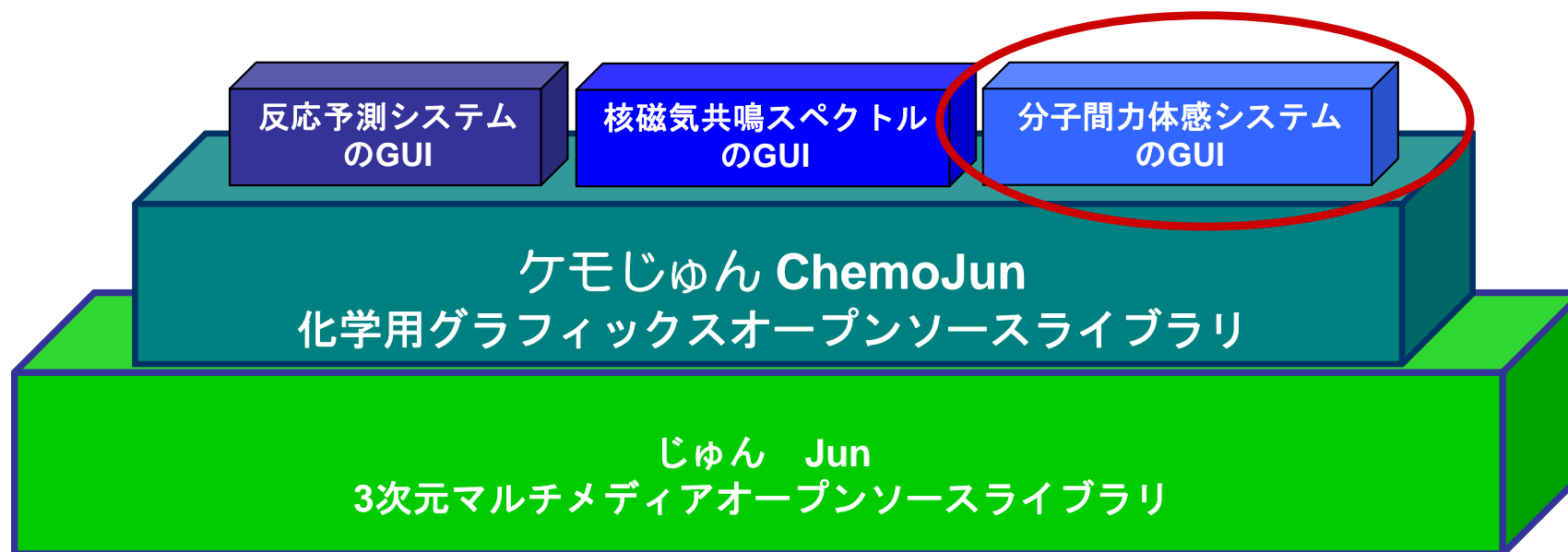


SPIDAR-G

東京工業大学 精密工学研究所 佐藤・小池 研究室



## 化学用オープンソースグラフィックスライブラリ





## 化学用オープンソースグラフィックスライブラリ

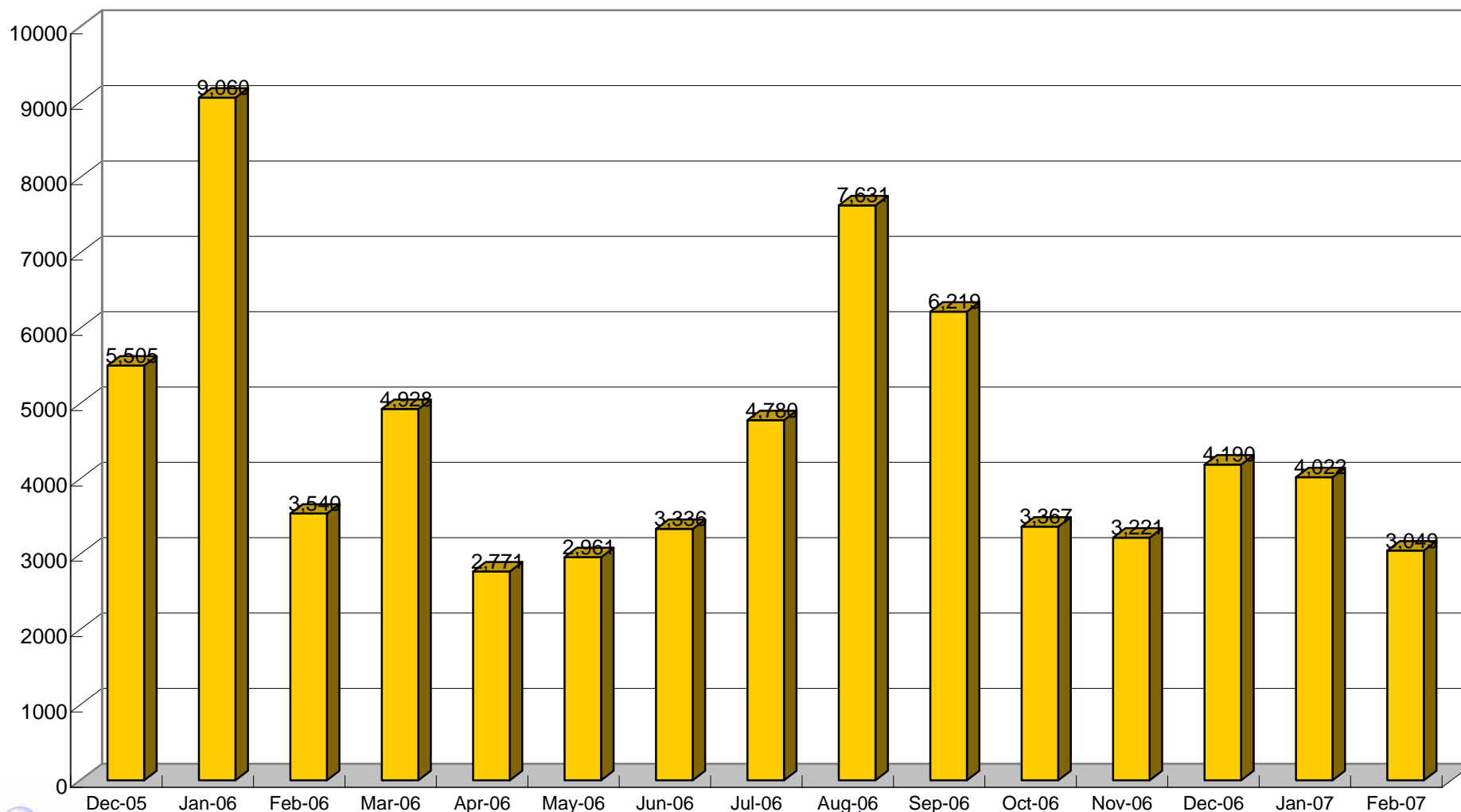
- ▶ 2005年12月26日 無償公開を開始（12/13プレスリリース）
- ▶ 公開時バージョン：030  
最新公開バージョン：053
- ▶ 総ダウンロードファイル数（～2007年2月28日）：68,580 件
- ▶ 文部科学省事業「タンパク質解析基盤技術開発」の化合物ライブラリの可視化などに利用

# グラフィックス：ケモじゅん



## 利用統計

ChemoJun - The number of downloaded files from <http://research.nii.ac.jp/~cheminfo/ChemoJun/>



12/26公開

新バージョン公開

# HaptiChem の表示イメージ

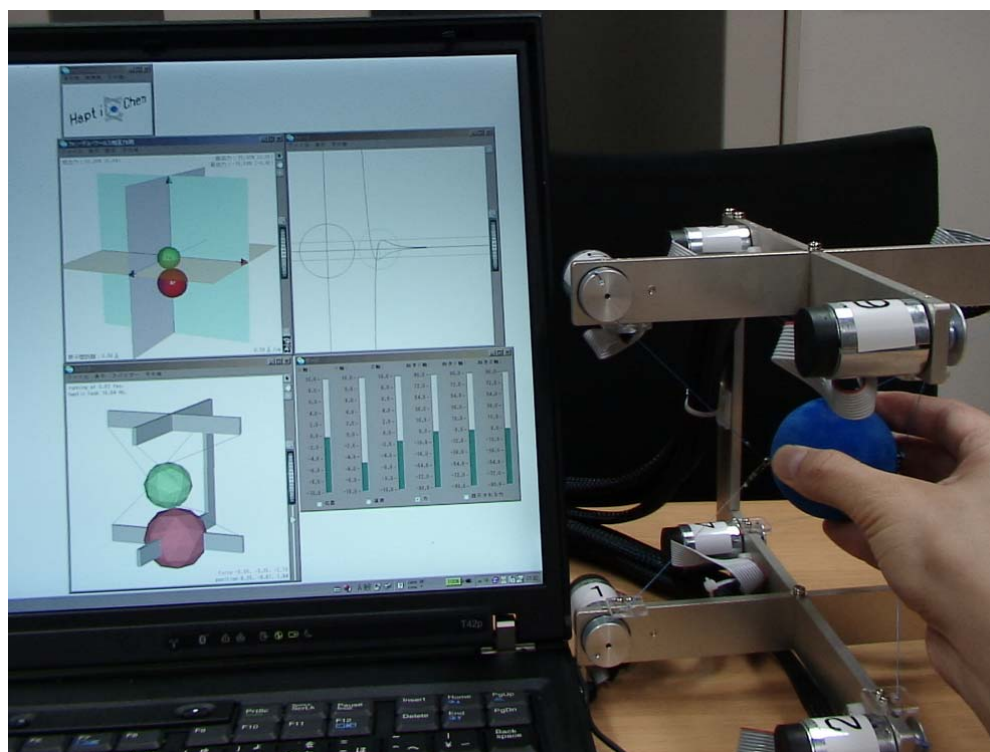
The screenshot displays the HaptiChem software interface with several windows:

- HaptiChem Launcher:** Shows the application logo.
- VDW: Two Rare Gas Atoms Chart [He He]:** A 2D plot showing the interaction between two Helium atoms. Two green circles represent the atoms, and a blue line indicates the interaction potential.
- Spidar Gauges:** A panel of 12 gauges showing position (Px, Py, Pz in mm) and rotation (Rx, Ry, Rz in degrees) for the left and right atoms. The top row (blue) shows position, and the bottom row (red) shows rotation.
- Viewfinder [He He]:** A 3D view of the two Helium atoms (green spheres) within a wireframe cube.
- Settings:** Controls for the simulation, including:
  - Grip: Helium
  - Target: Helium
  - Target position: Left
  - Force setting: Normalized with Xe
  - Scale:  $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m} = 1.0 \text{ cm}$
- Details:** Simulation parameters:
  - van der Waals interaction: He He
  - van der Waals radius (angstrom): He 1.40
  - Interatomic distance (angstrom): 2.349
  - Potential energy (kcal/mol): -0.022
  - Intermolecular force (kcal/mol/angstrom): 0.000



HaptiChem

# HaptiChem の操作イメージ



## 純国産のシステム

SPIDAR

ケモじゅん

じゅん



## 人の感覚と科学的な正確さの 接点を考慮したデザイン

化学分野に特化した体感システムの適用範囲と限界

何が「モデル化」されているか？

人の感覚に効果的に働く表示と力の表現

感じることのできる範囲と効果

基本的な操作実験により得られたデータから  
ソフトウェアとデバイスの要件を求めて再設計

実際の物理化学的数値と体感している数値を表示  
→ 実データを認識させ、仮想的であることを意識させる





- 授業タイトル : “分子間に働く力”
- 対象 : 高校2年生43名
- 場所 : 東京工業大附属科学技術高等学校 応用化学分野
- 実施日 : 2006年7月18日
- 実施時間 : 110 分
- 実施内容 : 講義:50分、HaptiChem体験: 60分  
簡単なアンケート

\* 講義では「ケモじゅん」も利用された

# 実施結果の概要

- 被験者のタイプ ▶ 化学好き、高いレベルの学力を有する高校2年生
- 体験の効果 ▶
  - ・力を提示した途端に嬉々とした表情
  - ・分子や反応に関する質問を誘起
- 生徒の感想 ▶ 「関数が実体験として理解できた」「実際に体験できると記憶に残る」「思ったより斥力が強かった」「スパイダーの仕組みが知りたい」「驚いた」等々
- 教師の感想 ▶ 「こうした体験を組み合わせることで、授業全体の記憶が色濃く残るのではないか」
- HaptiChem  
システムの操作性 ▶
  - ・画面表示はわかりやすい
  - ・操作は簡単
  - ・デバイスは精密な機械で壊れないか心配

## システムの効果を実証した一例

## 公開日

平成19年3月15日(木)

## 公開サイト

<http://research.nii.ac.jp/~cheminfo/HaptiChem/>

日本国内の高等学校での教育目的に限り  
期間限定でSPIDAR-Gの無償貸出しを実施