

分子の対称要素と対称性についての学習プログラム

榊原 正明・市位 直樹・増原 良子・高見 和邦・立花 良一
物質工学科

A Computer Software Program for Molecular Symmetry and Molecular Symmetry Elements

Masaaki SAKAKIBARA, Naoki ICHII, Ryoko MASUHARA, Kazukuni TAKAMI and Ryoichi TACHIBANA

Department of Materials Science, Faculty of Engineering
Tottori University, Tottori, 680 Japan
E-mail: sakaki@lemon.bio.tottori-u.ac.jp

Abstract: This paper describes an improvement made of the computer software learning program designed by Osaki for the topic of Molecular Symmetry and Molecular Symmetry Elements. The improvement consisted of (1) a set of graphics added to explain the Molecular Symmetry Elements and (2) a set of "hints" for the Molecular Symmetry section. The results of a questionnaire carried out on users of the improved software learning program are also explained.

Key words: Educational computer program, Molecular symmetry, Molecular symmetry elements, Hint, Questionnaire

1. はじめに

現代化学における理論的な基礎は量子化学、熱力学、対称群論であると考えられる。対称性は分子構造や結晶構造を取り扱うのに必須の概念である。また立体配座、化学結合の基礎であり、赤外・ラマンスペクトルやX線回折の解釈には不可欠の基礎知識になっている。したがって専門教育において対称性の学習は非常に重要である。

ところで分子の対称性(点群)を学習するプログラムは1986年に大崎[1]によりBASIC言語で作成されている。我々はこのコンピュータを用いた学習プログラムを対称性の学習に非常に有効であると考えた。今回大崎のプログラムを改良して、学生に使用させたので、改良プログラムとその実施結果の概要を報告する。

2. 大崎のプログラムの概要

このプログラムは、分子を3次元に表示し、学生に分子全体の回転を行こなわせ、対称要素を見つけさせ、対称性を答えさせる内容である。プログラムの流れを表1に示す。

このプログラムはすでに一応の学習をしてきた人のためなので、対称要素の説明は「確認」の意味を持つように文章のみで簡潔に表現されている。

表1 プログラムの流れ

対称要素の説明
分子の選択
メニューの選択
対称要素の入力
対称性の入力

分子の選択は分子の問題番号を入力する。問題数は14である。

メニューの選択は4つの選択肢(分子の回転、解答(対称要素)の入力、他の分子への変更、対称要素の説明に戻る)から選ぶものである。

対称要素の入力は画面に対称要素の記号が表示されるので、その下に要素数を入力する。ここで要素数の判定は、回転軸とか対称面ごとには行っていない。不正解の場合にメッセージが出たり、もう一度対称要素の説明を読ませるなどのヒントが用意されている。

対称性の入力は32個の対称性の内から選ばせるもので、これにはヒントは用意されていない。またここではもう一度メニューに戻り分子の形を見ることができるようになっている。

3 プログラムの改良点と追加点

大崎のプログラムは既にこの項目を学習してきた人を想定したものである。そこで、はじめてこの項目を学習する人のために、次のようなことが改良すべき点として考えられる。

- ① 対称要素の説明文の内容が難しく、さらに具体的な図形表示がないので分かりづらい点。
- ② 分子を選ぶ時に、どれが基本的なものか、難しいものかが分からず、段階的な学習が行えない点。
- ③ 対称要素の正解、不正解の判定が要素別になっていないので、どこが間違っていたのかがわかりにくい点。
- ④ 各対称性の区別の仕方などについてのヒントがないので、対称性の決定ができにくい点。

以上のような点を考慮して、プログラムの変更(改良, 追加)を行った。

3. 1 改良点

対称要素の説明については、対称要素と対称操作の違いの説明、主軸と側軸、 n 回回転軸、対称心、対称面、 n 回反映軸という項目に分け、各項目の説明には図形と要素の位置関係を示したグラフィックを全てに取り入れた。また、説明文の方も、具体的な分子の例をいれるなどして分かりやすくした。

出題形式については、分子の形、対称性などから、問題のレベルを5段階にわけ、それぞれのレベルの中で乱数を使い、ランダムに出題させるようにした。

対称要素の判定の方法については、どの要素を間違えたかわかるように、回転軸、対称心、対称面、反映軸ごとに判定して正解と不正解の表示を出すようにした。回転軸と対称面についてはそれぞれ全部正解でないと正解の表示はされない。正解した場合の対称要素の数を表示するようにした。

3. 2 追加点

問題数については、なるべく多くの対称性の学習ができるように分子を選び、問題数を39まで増やした。その結果として取り扱う対称性の種類は、 C_s , C_2 , C_{2v} , C_{3v} , C_{4v} , $C_{\infty v}$, C_{2h} , C_{3h} , D_{2h} , D_{3h} , D_{4h} , D_{5h} , D_{6h} , $D_{\infty h}$, D_{2d} , D_{3d} , D_{5d} , D_{6d} , T_d , O_h となった。

二者択一形式のヒントは、対称性の決定の仕方がわからない人のために、各対称要素などの有無

の二者択一形式で選択肢を絞り込んで、対称性を導き出すという形式にした。

3. 3 分子の対称性における難易度

ここで分子の難易度をどのような理由から分けただかについて説明する。

学生にプログラムを使用させた結果から、分子が平面から立体になると解答にかかる時間が増え、不正解の回数も多くなることがわかった。

これは例えば塩化チオニルや過酸化水素などのように立体的に形が判断しづらい場合や、分子に回転軸などの対称要素を当てはめていくという考えが難しいということなどが原因として考えられた。そこでアンモニア型分子などの比較的形の分かりやすい分子を除いて、ほとんどの3次元分子を高いレベルに分類した。特に対称要素の数が多く、正四面体、正八面体などの分子は、全て最高レベルの分類とした。平面分子においても、対称要素の多いものはなるべく高いレベルに分類した。以上のことから、分子の分類を表2のように行った。

表2 分子の対称性の難易度

レベル1	(1) NH_3 (2) SO_2 (3) H_2O (4) POCl_3
レベル2	(5) $\text{trans-C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$ (6) $\text{cis-C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$ (7) B(OH)_3 (8) BF_3
レベル3	(9) SO_2Cl_2 (10) SOCl_2 (11) C_2H_2 (12) XeF_4 (13) CO (14) C_6H_6 (15) C_3H_6 (16) C_4H_8 (17) XeOF_4 (18) N_2O_4 (19) $[\text{AuCl}_4]^-$
レベル4	(20) SF_4 (21) PCl_5 (22) H_2O_2 (23) C_{10}H_8 (24) $\text{cis-C}_2\text{H}_6$ (25) $\text{trans-C}_2\text{H}_6$ (26) $\text{Ru(C}_5\text{H}_5)_2$ (27) $\text{Fe(C}_5\text{H}_5)_2$ (28) $\text{Cr(C}_6\text{H}_6)_2$ (29) B_5H_9 (30) $[\text{PtBr}_2\text{Cl}_4]^{2-}$
レベル5	(31) C_6H_{12} (32) CCl_4 (33) SF_6 (34) CO_2 (35) C_2H_2 (36) H_2CCCH_2 (37) CH_4 (38) $[\text{Fe(CN)}_6]^{4-}$ (39) $[\text{ClO}_4]^-$

4. 本プログラム構成

今回変更したプログラムの構成は以下のようになっている。

メインプログラム

データファイル(画面表示用)

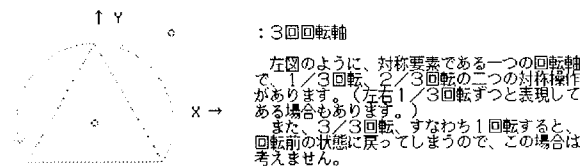
名簿読み込みファイル (94物質.txt)

出題分子の名前読み込みファイル

(Daimoku.txt)

分子の座標ファイル 1~39
(ZA1.txt~ZA139.txt)

プログラムのサイズが 64Kバイトを越えるため、1つのプログラムとして実行できないので、表示文字データの可能なものを全てをファイルにして、ファイルから読み出して文字を表示するようにした。その結果としてプログラムサイズを大幅に小さくすることができ、1つのプログラムとすることができた。しかし、実行速度の面からハードディスクを用いないとほとんど実用にならなくなった。



以下に、対称要素とそれに対応する対称操作の例をいくつか出しておきます。

対称要素	対称操作
C3	2C3
C4	2C4, C2
C6	2C6, 2C4, C2
Sn (nは2以上)....	Cn, σh

リターン・キーを押して下さい。

5. 対称要素の説明画面

対象要素の説明の画面を、図1から図14に示す。これらの図は実行画面（フルスクリーンは不可）をAltキー+Print Screenキーを押すことにより、クリップボードにコピーして得たものである。図1は最初の画面である。この画面で説明が必要であるとすれば、図2からの画面となる。図4の画面で説明が必要であるとすれば、図5から図8の画面となる。図11から図13は対称面の説明画面である。

図3 対称要素と対称操作の違いの説明（3回回転軸の例）画面2

これは分子構造にみられる対称性について、自分で学習するためのプログラムです。まずはこの学習に必要な言葉を以下に示してあります。

文字	名称
A:	対称要素 (element of symmetry) と対称操作 (symmetry operation)
B:	主軸 (principal axis) と側軸 (lateral axis)
C:	n回回転軸 (n-fold axis of symmetry)
D:	対称心 (center of symmetry)
E:	対称面 (symmetry plane)
F:	n回回映軸 (n-fold axis of rotatory-reflection)

これらの語句についての説明が必要ならAからFの文字を入れてからリターン・キーを押して下さい。不要ならNを入れてリターン・キーを、全部の説明が必要ならリターン・キーを押しして下さい。

説明が必要な語句の文字？

図1 対称要素の説明画面

対称要素と対称操作の説明
分子の対称は、“軸”、“点”、“面”などの対称要素と、それに対応する、“回転する”、“反転する”、“反射する”などの対称操作によって記述することができます。
“ある軸を中心として分子を回転させたときもとの分子と一致する”と言う場合、この“軸”が対称要素であり、“回転する”が対称操作となります。同様のことが、“ある点について反転する”や、“ある面について反射する”などの場合にも考えることができます。

また、一つの対称要素に一つの対称操作だけが対応するとは限りません。Cn (nは2以上)などの回転軸やSnなどの回映軸には、軸一本につき複数の対称操作が対応しています。

次にそれらの例を示しておきます。

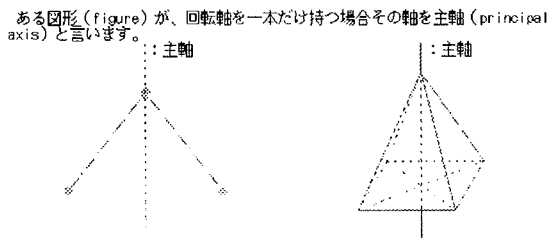
リターン・キーを押して下さい。

図2 対称要素と対称操作の違いの説明画面1

主軸と側軸の説明
1・・・ある図形 (figure) が、回転軸を一本だけ持つ場合その軸を主軸 (principal axis) と言います。
2・・・ある図形が、回転軸 C2 とこれよりも次数 (order) の高いC3、C4などの回転軸を同時に持つ場合、その中で次数の最も高いものを主軸と考えます。
3・・・ある図形が、互いに垂直な3本のC2回転軸だけを持ち、他に回転軸を持たない場合、これらの軸の任意の一本を主軸と考えます。
4・・・ある図形が、C3軸以上の高い次数の回転軸のうち、最高次数のものを複数持つ場合、そのすべてを主軸と考えます。
また、これらの主軸に垂直に交わるC2回転軸のことを側軸 (lateral axis) と呼びます。側軸があればその図形の対称性はD群に、なければC群に分類されます。
1から4の詳細い説明が必要な人は、その番号を入れて、リターン・キーを押して下さい。説明が不要な人はNを入れて、リターン・キーを押して下さい。説明の必要な番号

リターン・キーを押して下さい。

図4 主軸、側軸の説明画面

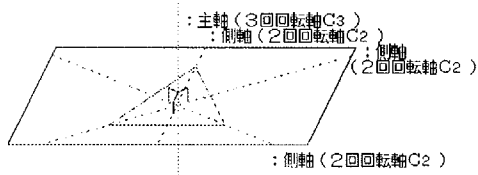


上図のように両端の原子が同じである3原子の折れ線分子や正n角錐形分子 (nは3以上) の場合、主軸が1本だけ存在し、側軸はありません。(ただし、正四面体の場合は正三角錐ではありますが、4本の主軸が存在します。)
上図のような場合、対称性は必ずCとなりません。

リターン・キーを押して下さい。

図5 主軸、側軸の説明画面 (項目①)

ある図形が、回転軸 C_2 とこれよりも次数 (order) の高い C_3 、 C_4 などの回転軸を同時に持つ場合、その中で次数の最も高いものを主軸と考えます。

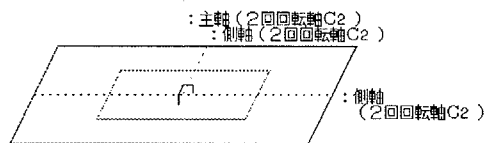


例えば、上図のように平面上の正 n 角形型の分子では必ず 1 本の主軸 C_n と n 本の側軸 C_2 があります。

リターン・キーを押して下さい。

図 6 主軸、側軸の説明画面 (項目②)

ある図形が、互いに垂直な 3 本の C_2 回転軸だけを持ち、他に回転軸を持たない場合、これらの軸の任意の一本を主軸と考えます。

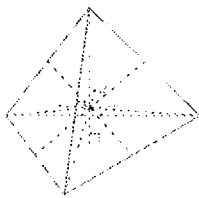


例えば、上図のように平面上の長方形型の分子では、3 本の C_2 軸のみが存在するので、このうち任意の 1 本を主軸と考えます。このような場合はどの軸を主軸としても、結果は同じとなります。エチレンなどの型の分子は、これに含まれます。

リターン・キーを押して下さい。

図 7 主軸、側軸の説明画面 (項目③)

ある図形が、 C_3 軸以上の高い次数の回転軸のうち、最高次数のものを複数持つ場合、そのすべてを主軸と考えます。

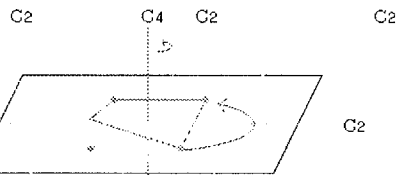


例えば上図のように正四面体型分子 T_d の場合 C_2 、 C_3 軸がそれぞれ 3 本、4 本とありますが、ここでは C_3 軸 4 本をすべて主軸と考えます。同様に、正八面体型分子 O_h では C_4 軸 3 本を、正二十面体型分子 I_h では 6 本の C_5 軸をそれぞれすべて主軸と考えます。

リターン・キーを押して下さい。

図 8 主軸、側軸の説明画面 (項目④)

ある図形を、一つの軸を中心として回転させたときもとの図形と一致するならばその図形は、回転軸を持つと言われ、 $360/n$ (n は 2 以上) 度、すなわち $1/n$ 回転したときにもとの図形と一致するならば、その軸を n 回回転軸といえます。これを C_n (n は 2 以上) と表します。



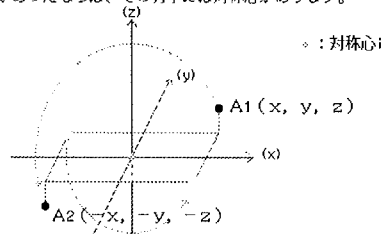
上図の例は 4 回回転軸 C_4 と 2 回回転軸 C_2 のものです。 C_4 は、この軸を中心として $1/4$ 回転、すなわち 90 度回転したときに、もとの図形と一致することを意味しています。同様に C_2 は 180 度回転したときに、もとの図形と一致することを意味しています。

リターン・キーを押して下さい。

図 9 n 回回転軸の説明画面

対称心の説明

ある図形の中心に関して反転操作を行うとき、もとの図形と一致するならば、その図形は、対称心 (center of symmetry) を持つと言います。これを i と表します。このような図形では、図形中の任意の点 (x, y, z) に対して、点 $(-x, -y, -z)$ が常に等価な点として存在します。分子中で、ある原子の座標の符号をすべて入れ替えた位置に必ず同種があったならば、その分子には対称心があります。

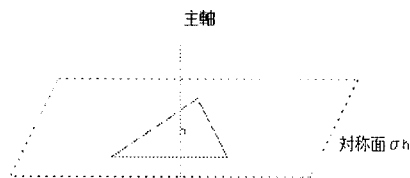


リターン・キーを押して下さい。

図 10 対称心の説明画面

対称面 σ_h の説明

ある図形中で、主軸となる回転軸がある場合、その軸に対して垂直に交わる対称面を σ_h と言います。(下図参照) 平面分子の場合、主軸が分子面に対して垂直に交わっていれば、必ず σ_h が存在します。また、図形中に一つ対称面以外の対称要素が存在しない場合、その対称面は σ_h のどちらかの区別は必要ありません。



リターン・キーを押して下さい。

図 11 対称面 σ_h の説明画面

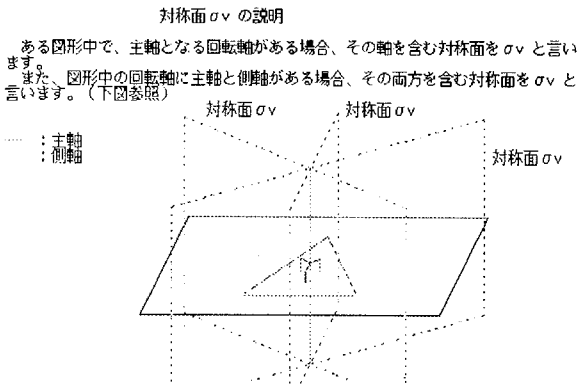


図 1 2 対称面 σ_v の説明画面

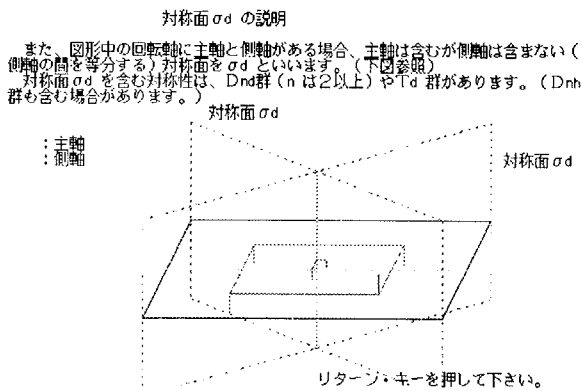


図 1 3 対称面 σ_d の説明画面

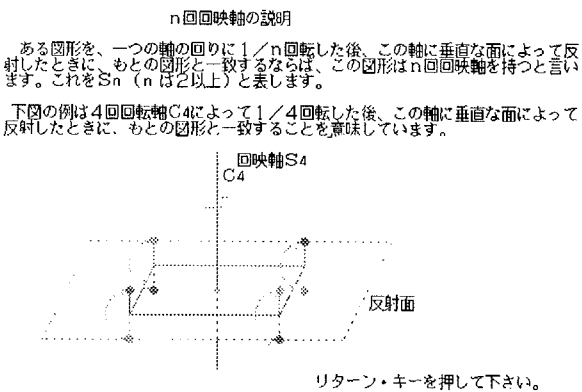


図 1 4 n 回回映軸の説明画面

6. 本プログラムの使用法について

最初に学生番号を入力する。(学生名が表示される。)

対称要素についての説明画面になる(図 1)。"N"を入力すれば、説明は表示しない。

"A", "B", "C", "D", "E"を入力すればそれぞれ、対称要素と対称操作の違い、回転軸、対称心、対称面、回映軸の説明を表示する。リターンキーだけを入力すれば全ての説明を表示する。

対称要素と対称操作の違いの説明では、更に項目①②③④の説明をするかどうかの選択がある。対称面の説明では、更に σ_h , σ_v , σ_d の説明をするかどうかの選択がある。

最初はレベル 1 の問題が出題され、分子が表示される。"答えを入力する", "分子を回転させる", "別な問題に移る", "もう一度対称要素の説明にもどる"のどれかを選択する。

"答えを入力する"を選べば、対称要素の入力画面になる。回転軸について C_2 , C_3 , C_4 , (C_6 は対称性により C_5 , C_∞ が代わりに表示される) 対称心、対称面、回映軸 (S_4 は対称性により S_3 , S_5 , S_6 , S_{10} , S_{12} , S_∞ が代わりに表示される) について、その個数を入力する。

図 15 のように対称要素の数を入力する。

14. ベンゼン benzene $C(6)H(6)$

↑ Y

→ X

C

H

この分子は次の対称要素をそれぞれ幾つずつ持っていますか? それぞれの記号の下にその数を入れて下さい。数が無限大のときは、99を入れて下さい。

	C_2	C_3	C_4	C_6	C_i	σ_h	σ_v	σ_d	S_6
(数値)	6								

[M: MENU]

図 1 5 対称要素の入力画面

14. ベンゼン benzene $C(6)H(6)$

C_n D_{nh} D_{nd} D_n C_{nh} C_{nv}

主軸 C_n に直交する回転軸 C_2 がありましたか。
[Y/N]?

質問に答えると、上の表中であてはまらないと思われる対称性が消えていきます。

図 1 6 対称性のヒントの画面

対称要素を正解すると、対称性の入力画面となる。
 “H”を入力すると、二者択一形式のヒントが表示される。各設問に対して“Y”、“N”を入力すれば、あてはまらない対称性の記号が消えて、あてはまるものだけが画面に残るようになる。“M”を入力すれば、対称要素の数を再度表示するようにした。
 ヒントを使用した場合の画面を図16に示す。

対称性で正解して次の問題にいけば、レベルが1つあがる問題が出題される。レベル5の問題を正解すればプログラムは終了する。

実施した内容は、学生名をファイル名としてファイルに書き込まれる。この内容を検討すれば、学生の間違えやすいところなどがわかり指導する場合の参考とすることができる。なお書き込まれる内容を表3に示す。

表3 ファイルに書き込むデータ

生徒の番号
生徒の氏名
使用した説明の番号
分子の番号
メニュー選択の入力文字
回転させた時の軸と角度
対称要素の数
対称性の答の番号

7. 対称性の決定について

対称性を決定するには、対称要素を全部数えあげる必要はない。主軸を決めた上で対称面とか直交2回転軸の存在の有無などを確かめれば対称性は決定できる。今回は、図17のフローチャートに示したやりかたで対称性の決定を行った。

線形分子の場合は対称面σ_hの有無で更に分類するが、中原[4]は対称心の有無で分類している。今回は、中崎[2]と同じく2回回転軸の有無で分類した。

回転軸の有無について、今回はC_n(n>1)の有無として判定している。佐藤[3]は主軸の有無で判定している。また中崎[2]、Hall[5]はC₁は回転軸とみなさないで回転軸の有無としているがこちらの方が分かりやすい。これは、中原[4]のC₁以外の回転軸の有無にもとずいている。

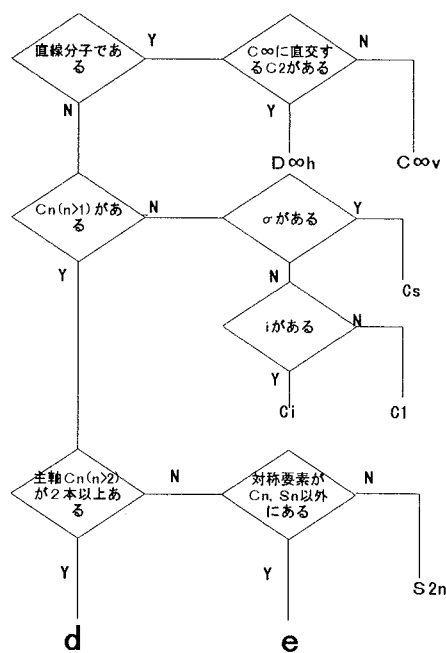


図17-1 対称性の決定

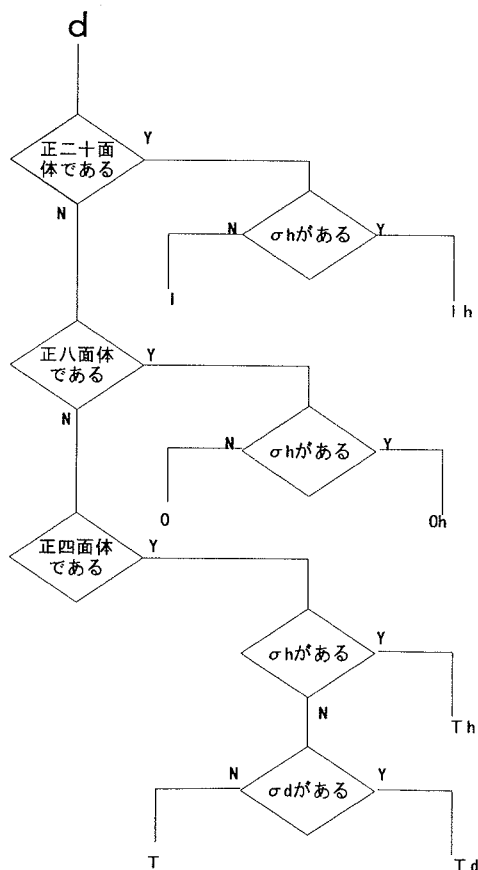


図17-2 対称性の決定

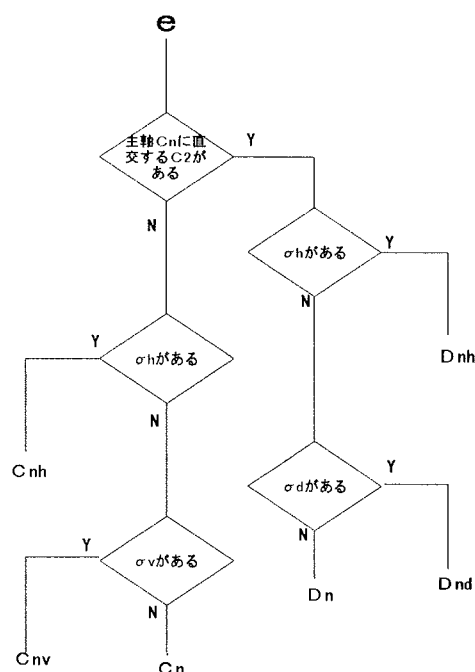


図17-3 対称性の決定

多面体の対称性について、中崎[2], Hall[5]は、最初から高い対称性として分類している。中原[4]と佐藤[3]は主軸が2本以上について分類している。今回はこの分類に近いものである。

対称性 S_{2n} については、非線形分子で主軸を持ち、主軸と直交する2回回転軸がなく、主軸と共軸の回映軸 S_{2n} の有無で分類するやりかたもあるが(佐藤[3])、今回は非線形分子で主軸を持ち、主軸 C_n と S_{2n} しかない場合としている。(これは、中原[4], Hall[5], 中崎[2]と同じである。)

8. アンケート結果について

今回の改良プログラムを使って実際に二度の演習を物質工学科3年次の学生に行わせた。人数は1回目76人、2回目は32人であった。ここで、1回目の演習ではオリジナルプログラムから対称要素のヒントの出し方を変えたプログラムを使用して、指定した問題を行わせた。2回目では、対称要素の説明、レベルを分け、乱数による出題、出題形式、対称要素のヒントの出し方、対称性の入力で二者択一形式のヒントなどの改良、追加を行ったプログラムを使用した。

1回目、2回目ともに1人あたりの実施時間は30分間とした。

演習後に行ったアンケートの主な結果は以下のようになった。ただし、ここで示した数字と()内の数字はそれぞれ各項目の評価を5段階で答えさせた時に3以上の評価をした%, 4以上の評価をした%である。

8.1 1回目のアンケート結果

結果を表4に示す。実施した時間について短いと思う学生が多いのは、画面の文字を読むのと分子を回転させる操作に慣れるのに時間がかかるためであろう。

表4 1回目のアンケート結果

1人あたり30分の時間の長さについて	
短い	95% (47%)
対称要素の説明について	
分かりやすい	64% (29%)
問題分子の図形表示について	
分かりやすい	88% (50%)
図形の回転を利用したかについて	
利用した	66%
図形の回転を利用した人の中で、対称要素の答えの入力に役立ったかについて	
役立った	94% (86%)
問題レベルについて	
難しかった	99% (62%)
対称要素のヒントが答えを選ぶのに参考になったかについて	
参考になった	86%
対称性の学習について興味があったかについて	
興味があった	95%
コンピュータを使った学習について	
良いと思う	100%

また1回目の演習における、30分間で解けた問題数は表5のようになった。

表5 30分間で解けた問題数

問題数(問)	1	2	3	4	5
割合(%)	14	30	37	12	7

平均 2.6 問

8.2 2回目のアンケート結果

対称要素の説明についてのアンケート結果、および30分間で解けた問題数は、それぞれ表6, 7,

表8のようになった。表6からわかるように、追加したいずれの事項についても学生は好意的であった。2回目が1回目より解けた問題数が多いことは、2回目が問題に慣れてしかも対称性について興味を持ってきた結果だと考えられる。

表6 2回目のアンケート結果

出題をレベル別にしたことについて 良かった	100% (81%)
二者択一形式のヒントについて 分かりやすかった	84% (53%)
このプログラムを使って1人で演習ができるかどうかについて できる	94% (66%)

表7 対称要素の説明について

質問	説明文が分かりやすい	グラフィックが役立つ
対称要素と対照操作の違い	97% (66%)	100% (75%)
主軸, 側軸	98% (53%)	95% (69%)
n回回転軸	94% (63%)	91% (81%)
対称心	91% (44%)	97% (69%)
対称面	94% (47%)	94% (81%)
n回反映軸	69% (31%)	

表8 30分で解けた問題数

問題数(問)	2	3	4	5	9
割合(%)	6	47	36	6	3

平均3.6問

また、この演習についての意見としては主なものは表9のようであった。さらに表10のような問題点を示した意見もあった。

表9 主な学生の意見

コンピュータに興味があった。
コンピュータに慣れるいい機会となった。
教科書を使った学習と違い、新鮮で楽しく勉強できた。
講義よりとっつきやすい。
個別に自分のペースで学習ができる。
図形のグラフィックがたくさんあって分かりやすかった。

表10 学生が示した問題点

ロード時間が長い。
分子ごとに形などのヒントがほしい。
分子の回転をゆっくりにしてほしい。

9. おわりに

分子の対称の学習を、コンピュータを用いて行うことに学生の反応は非常に好意的であった。しかし、分子を回転させるという操作に手間どり、更に回転させることにより対称要素を見出すということに気がつく学生が少なかった。分子の対称要素が分かるように、回転角度を示すヒントも考える必要があると思う。

対称性の入門のポイントは以下のことが考えられる。

対称要素を理解する。

対称操作との違いを理解する。

この点はある程度達成されたと考えられる。

しかし対称要素を数え上げることにはしているが実際には、対称要素により対称性は規定されている。さらに対称操作をすべて数え上げなくても、対称性を決定することができる。このことを考えると今後の問題として対称要素の個数だけでなく、対称操作の個数も答えさせるようにする。そして対称要素あるいは対称操作の正解をしなくても対称性を答えるようにすることが考えられる。

今後も、プログラムを実施して、対称性から見た分子の難易度の検討、対称性のヒントの検討をそれぞれ行いたいと思う。

参考文献

- [1] 大崎健次:1986年化学PC用ソフトウェア集, pp. 107-108, 吉村忠与志編, 化学PC研究会.
- [2] 中崎昌雄:分子の対称と群論, 東京化学同人, 1973.
- [3] 佐藤純夫:化学群論序説, 講談社, 1975.
- [4] 中原勝儼:無機化学演習, pp. 75, 東京化学同人, 1985.
- [5] L. H. Hall:化学者のための群論, 渡辺啓, 民永巖訳, 廣川書店, 1973.

(受理 平成9年8月25日)