

モデルを利用した分子の対称性学習ソフト

榊原 正明・東山 匡史・平岡 敏雄・小野 幸雄・福井 裕暁
物質工学科

A Computer Software Program using Models for Molecular Symmetry

Masaaki SAKAKIBARA Masashi HIGASHIYAMA, Toshio HIRAOKA, Satio ONO and Hiroaki FUKUI
Department of Materials Science, Faculty of Engineering
Tottori University, Tottori, 680-8552 Japan
E-mail: sakaki@chem.tottori-u.ac.jp

Abstract: A number of symmetrical models were introduced and the correspondence of these models and molecules was considered. A software learning program was created using models with molecular symmetry and the results of their application was reported. A computer software program was created which asks for the representation matrix corresponding to the motion of points from the symmetry operations, its multiplication table, and its classes.

Keywords: Educational computer program, Models, Molecular symmetry, Molecular symmetry operations, Representation matrix

1. はじめに

化学において、対称性は分子構造や結晶構造を取り扱うのには必須の概念である。我々は分子の対称性を学習するプログラムを N88BASIC 言語で作成し、コンピュータをスタンドアロンで使用した実施結果とあわせて報告した[1]。その内容は 39 の分子について、分子の形と対称性から 5 段階のレベルにわけ、それぞれのレベルの中で乱数を使って、ランダムに出題し、それから分子を 3 次元に表示し、分子全体の回転を利用して対称要素を見つけて答えるものである。対称要素の判定については、回転軸、対称心、対称面、回映軸ごとに判定して正解と不正解の表示を出して、どの対称要素を間違えたかわかるようにした。最後に対称性を答えさせるが、対称性の入力に対して、各対称要素が、「ある」、「ない」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のヒントを導入した。

N88BASIC で作成されたプログラム[1]は、プログラムのサイズを 64KB 以下に押さえるのは困難であった。そこで、Visual Basic を使用して、GUI を生かしてプログラムの大幅な書き直しを行い、LAN を利用したシステムを利用しての実施結果を報告した[2]。この書き換えにより操作性の向上を図ることができた。さらに対称要素の代わりに対称操作を答えるように変更を行った。

文献[3]で示したように、Visual Basic で行ったこと[2]と同じことができるように、小野[4]は HTML, CGI を用いて Web 上へ移植し、さらには分子の代わりにモデルを用いた。

また平岡[5]は対称性の学習にモデルと共に表現行列を用い、表現行列を簡単に求めることができ、更に行列の積を利用し掛算表を求めることが出来るプログラムも作成した。表現行列により対称操作の理解を助けること、対称操作の間の関係、対称性の間の関係を示す事ができる。

今回、さらにモデルを展開し、対称操作と対称性の理解にふさわしいモデルについて、表現行列に関するプログラムについて報告する。

2. 対称性の学習のためのモデル

対称性の学習における初めの段階として、学習者は出題されたモデルから対称操作を見つけてその対称性を判断する。そのため出題者は対称性にふさわしいモデルを考える必要がある。

多くのモデルを考えることで様々な種類の対称性を取り上げた。その結果、同じ対称性に対していくつかの違ったモデルを取り上げることも出来た。

2. 1 モデルの利点

様々な種類の対称性を例に挙げる時や同じ対称性のもので異なるものを分子を探すのは大変で仮にみつかったとしても非常に複雑な構造をもっている事が多い。しかしモデルでは置換基や原子を○で表し、種類の違いを色の違いで表せるため非常にシンプルな構造で描くことができる。またモデルを使い対称操作の説明を行うことで対称操作、対称性と構造の関連性について理解を深めることができる。分子の代わりにモデルを用いる方式では、難易度を変えた問題が容易に作成できる。

2. 2 モデルの分類

基本モデルを定義して、その展開として基本モデル2、拡張モデル1、拡張モデル2、多面体モデルを導入する。

まず多角形（三角形、正方形、ひし形、平行四辺形、台形、等脚台形など）の頂点に点（○）が存在する平面モデルを基本モデルと定義した。

同じ図形でも線の種類が違くと対称性は変わる。つまり線の種類が違くと結合の種類が違うことを意味するようになる。「結合の種類」が違うということは「結合の長さ」が違うということと同じである。「結合が無い」ということも違う種類の結合であると考えることが出来る。

「点の色」が違ふまたは「結合の種類」が違ふ基本モデルを基本モデル2と定義する。

正三角形から二等辺三角形への展開（2種類の結合）を図1、2、3に示す。正方形から向かい合う辺が等しい長方形へ展開（2種類の結合）を図4に示す。

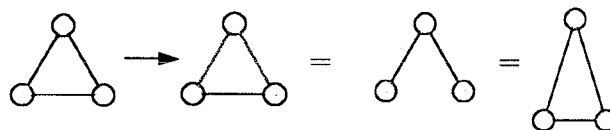


図1 正三角形(D3h)からの展開(C2v)

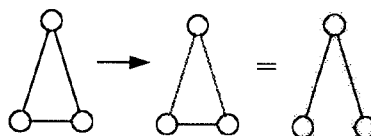


図2 2等辺3角形(C2v)

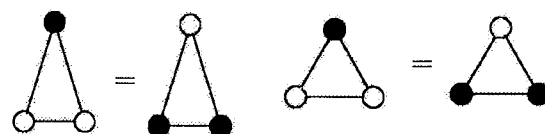


図3 点の色を変えたモデル(C2v)

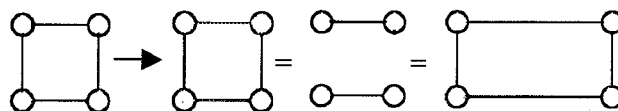


図4 正方形(D4h)からの展開1(D2h)

正方形から隣り合う辺が等しい四辺形への展開（2種類の結合）（二等辺三角形と同じ対称性）を図5に示す。正方形から等脚台形への展開（3種類の結合）を図6に、正方形からひし形への

展開（1種類の結合）を図7，長方形から等脚台形への展開（3種類の結合）を図8にそれぞれ示す。

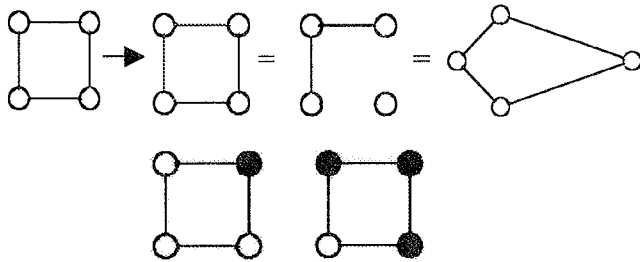


図5 正方形(D4h)からの展開2 (C2v)

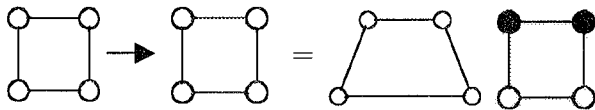


図6 正方形(D4h)からの展開3 (C2v)

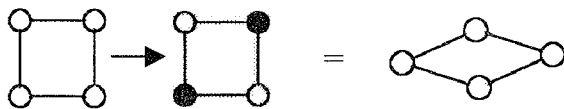


図7 正方形(D4h)からの展開4 (D2h)

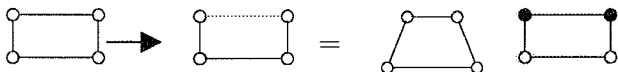


図8 長方形(D2h)からの展開5 (C2v)

基本モデルを展開すれば，別な基本モデルに移ることが出来る。正三角形から二等辺三角形に，正方形から長方形，ひし形，等脚台形，四角形になることが分かる。

基本モデルを立体化すると対称操作の数も変化するので様々な対称性を取り上げることが出来ると考えられる。

そこで基本モデルの頂点から垂直方向や水平方向，あるいは中心から垂直方向に点(O)を付けてできる図形を拡張モデルと定義した。拡張モデルを以下のように分類した。

拡張モデル1 多角形の頂点から垂直方向水平方向(辺の延長線)に点(O)が存在するモデル

拡張モデル2 点(O)の大きさを変更したり，色をつけたりして点(O)の種類を増やしたモデル
上下の長さが等しい場合と異なる場合で対称性に違いがあるので注意する必要がある。

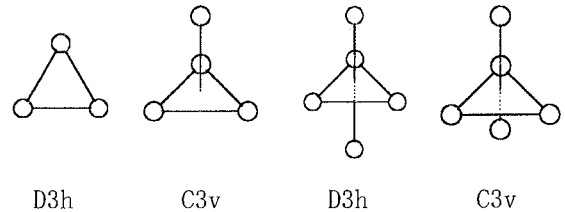


図9 正三角形からの拡張モデル

多面体モデルを拡張モデル1, 2の垂直方向のモデルでOとOを線で結んだモデルと定義した。

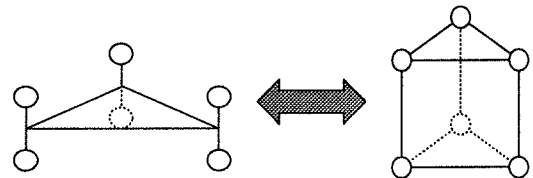


図10 拡張モデル(D3h)から多面体モデル

OとOとが線で結ばれるかどうかで対称性が異なる場合もある。以下に例を示す。

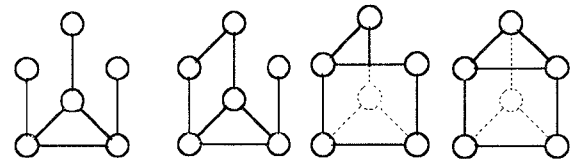


図11 正三角形の例 (C3v, Cs, Cs, D3h)

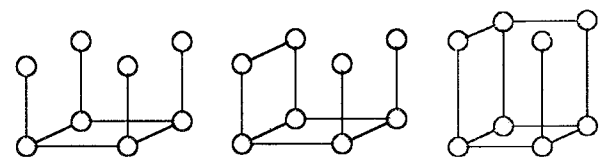


図12 正方形の例1 (C4v, Cs, Cs)

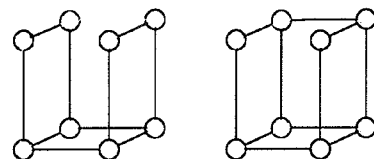


図13 正方形の例2 (C2v, Cs)

なお、モデルの作成には図形ランチ BOX3 とウルトラキッド ver. 2.0 を使用した。今回までに取り上げたモデルの対称性を表 1 にまとめた。

表 1 取り上げたモデルの対称性

n=2	C ₂	C _{2v}	C _{2h}	D ₂	D _{2h}	D _{2d}	+Ci, Td, Oh
n=3	C ₃	C _{3v}	C _{3h}	D ₃	D _{3h}	D _{3d}	
n=4	C ₄	C _{4v}	C _{4h}	D ₄	D _{4h}	D _{4d}	
n=5	C ₅	C _{5v}	C _{5h}	D ₅	D _{5h}	D _{5d}	
n=6	C ₆	C _{6v}	C _{6h}	D ₆	D _{6h}	D _{6d}	
n=7	C ₇	C _{7v}	C _{7h}	D ₇	D _{7h}	D _{7d}	

3. モデルと分子の対応

点(○)と原子と対応させて、モデルと分子と対応させる。メタン、アレン、エタンとその置換体、シクロヘキサンについてモデルとの対応を検討した。分子と対応するモデルを以下に示す。

● メタンとその置換体

メタンに対応するモデルは立方体である(図 1 4)。置換メタンも立方体で考えることができる。1 置換(C_{3v})は置換基が同じ 3 置換と同じ対称性になる。置換基が異なる 2 置換(C_s)は、2 つの置換基が同じ 3 置換と同じ対称性である(図 1 5)。

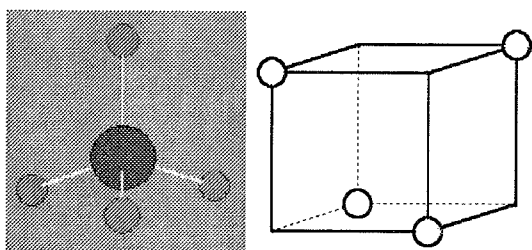


図 1 4 メタンと立方体モデル (Td)

1 置換メタン 2 置換メタン 3 置換メタン

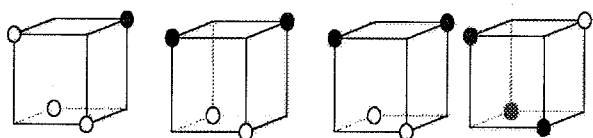


図 1 5 置換メタンのモデル (C_{3v}, C_{2v}, C_s, C₁)

● アレンとその置換体

アレン(D_{2d}) に対応するのは直方体モデルである。真ん中のモデルは一番左のモデルを横にしたモデルである。○の色を変えることでアレンの置換体を表すことができる。

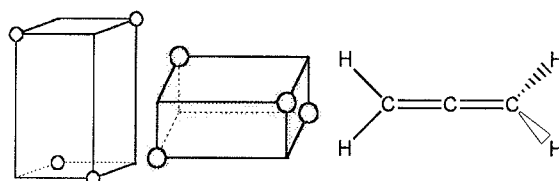


図 1 6 アレンと直方体モデル

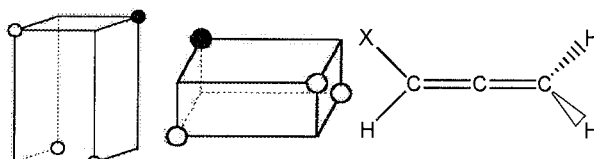


図 1 7 1 置換アレン (C_s) と直方体モデル

2 置換アレンで置換基 (X が 2 つ) が同じ炭素に結合を図 1 8 に、置換基 (X が 2 つ) が違う炭素に結合を図 1 9、置換基 (X, Y) が同じ炭素に結合を図 2 0、置換基 (X, Y) が違う炭素に結合を図 2 1 にそれぞれ示す。2 置換アレンの対称性を表 2 にまとめた。

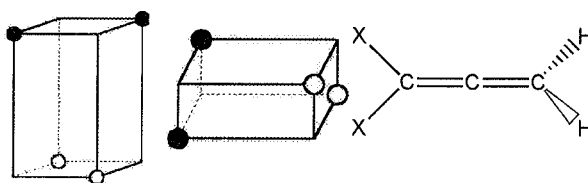


図 1 8 2 置換アレン (C_{2v}) と直方体モデル 2-1

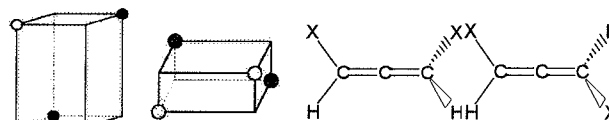


図 1 9 2 置換アレン (C₂) と直方体モデル 2-2

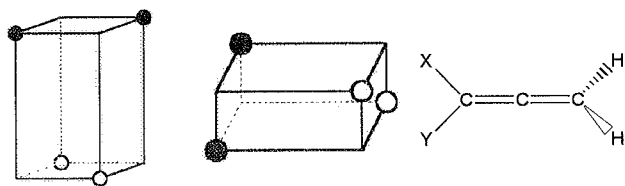


図20 2置換アレン(C2)と直方体モデル2-3

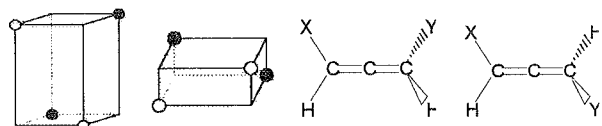


図21 2置換アレン(C1)と直方体モデル2-4

表2 2置換アレンの対称性

	XX	XY
2つの置換基が 同じ炭素に結合	C2v	Cs
2つの置換基が 違う炭素に結合	C2	C1

XX:2つの置換基が同じ場合
XY:2つの置換基が異なる場合

3置換アレンは4種類あり図22に示す.

置換基がすべて同じ

モデル3-1 (XXXH) (1置換と同じ) Cs

置換基がすべて異なる

モデル3-2 (XYZH) C1

2つの同じ置換基が同じ炭素に結合

モデル3-3 (XXYH) Cs

2つの同じ置換基が違う炭素に結合

モデル3-4 (XYXH) C1

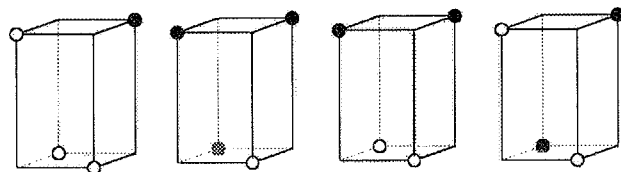


図22 モデル3-1 から モデル3-4

表3 3置換アレンの対称性

XXX	XYZ	XXY
Cs	C1	Cs (同じ置換基が 同じ炭素に結合) C1 (同じ置換基が 違う炭素に結合)

XXX:3つの置換基が同じ場合

XYZ:3つの置換基が異なる場合

XXY:3つの置換基のうち2つが同じ場合

● エタンのねじれ配座とその置換体

ねじれ型のエタンは正六角形の頂点から上下に交互に○が存在するモデルで表せる.つまり六角柱の頂点に交互に○が存在するモデルと同じになる.

2置換エタンの同じ置換基の場合を図24, 25, 26に,異なる置換基の場合を図27に示す. 2置換エタンの対称性を表4にまとめた. 3置換エタンを図28から32に示す.

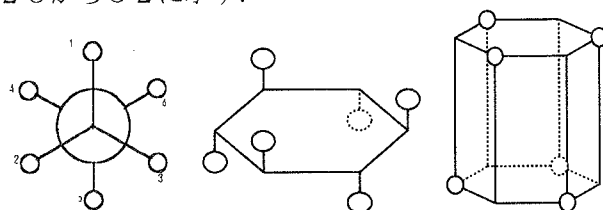


図23 エタンのねじれ配座とそのモデル

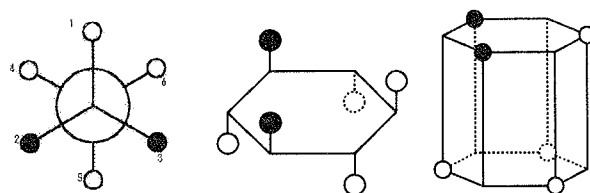


図24 2置換エタンとそのモデル2-1 (Cs)

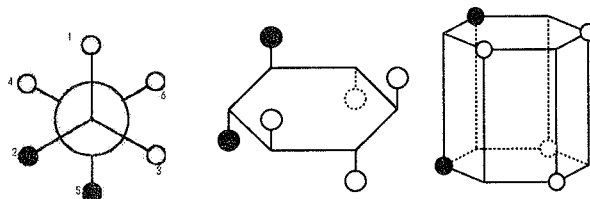


図25 2置換エタン(ゴーシュ型)のモデル2-2

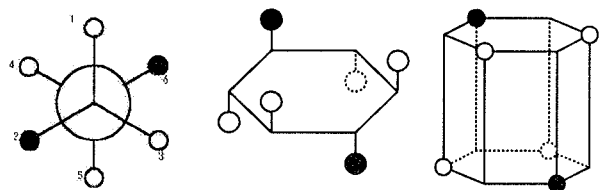


図 26 2 置換エタン(トランス型)のモデル 2-3

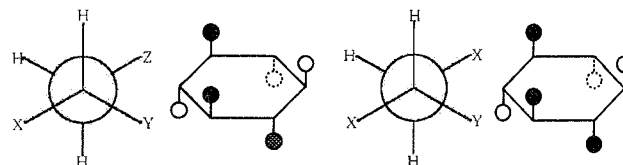


図 30 3 置換エタン(異なる置換基 XYZ) C1

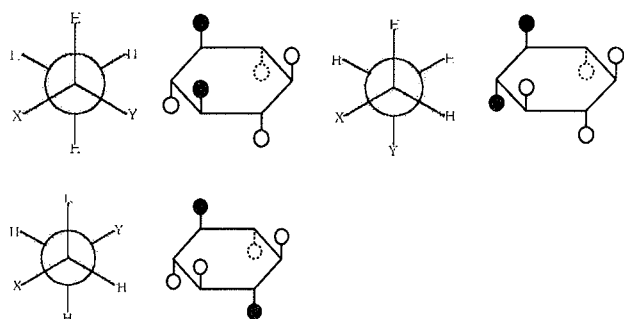


図 27 2 置換エタン(異なる置換基)

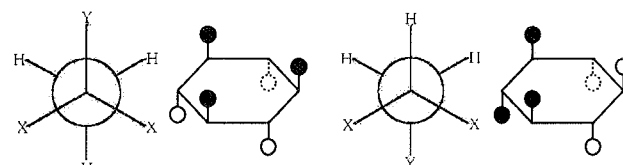


図 31 3 置換エタン(異なる置換基 XXY) Cs

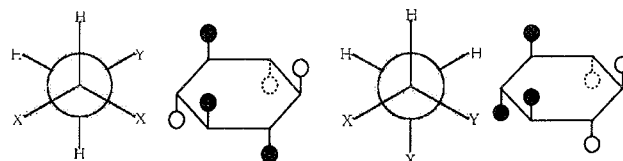


図 32 3 置換エタン(異なる置換基 XXZ) C1

表 4 2 置換エタンの対称性

	XX	XY
2つの置換基が 同じ炭素に結合	Cs	C1
2つの置換基が 異なる炭素に結合	C2 (ゴースユ型)	C1
	C2h (トランス型)	Cs

XX : 2つの置換基が同じ場合

XY : 2つの置換基が異なる場合

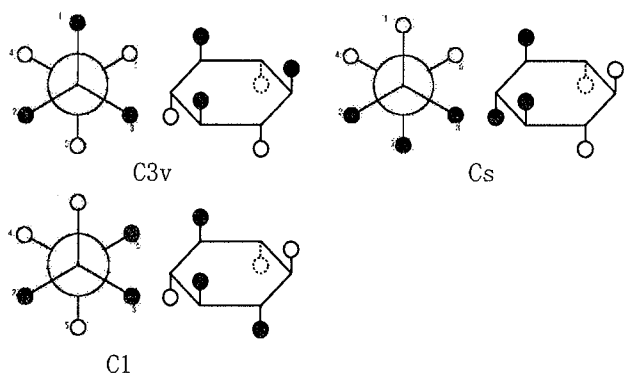


図 28 3 置換エタン(同じ置換基)

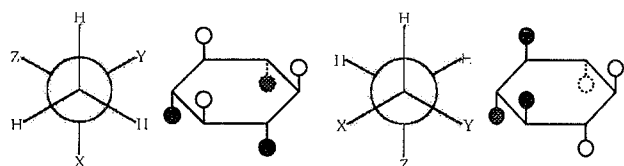


図 29 3 置換エタン(異なる置換基 XYZ) C1

エタンの重なり配座は正三角形の頂点から上下に○が存在するモデル,つまり三角柱モデルで表せる。

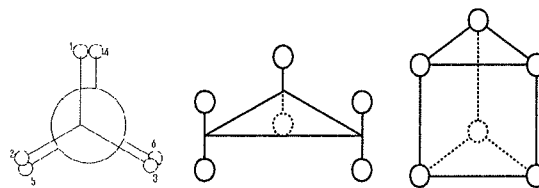


図 33 エタンの重なり配座のモデル(D3h)

● イス型と船型シクロヘキサン

イス型クロヘキサンは正六角形の頂点から上に交互に○が存在するモデルで表せ,図23よりイス型シクロヘキサンはエタンのねじれ配座と同じ対称性であることがわかる.船型シクロヘキサンとそのモデルを図35に示す。

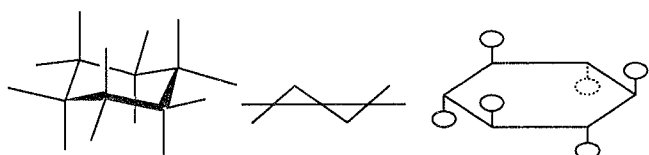


図34 イス型シクロヘキサンのモデル(D3d)

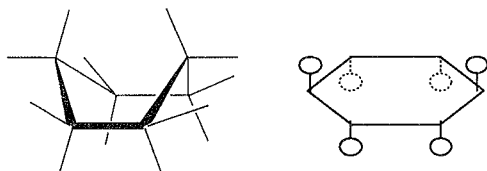


図35 船型シクロヘキサンのモデル(C2v)

4. 表現行列

表現行列とは対称操作を正方行列で表したものである。対称操作に対応した点の動きに対する表現行列は、行列の要素を0か1で表すことが出来、行列の大きさもモデルの点の数で決まるので作成しやすい。

表現行列を作成するには全ての点を考えなければならない。対称操作の点の動きを表現行列で確認しながら説明することで、理解を深めるのに役立つことが出来る。また、表現行列の利用として連続して行った対称操作を表現行列の積で求めることが出来る。(図36)

点の数が多いモデルや対称操作の種類と数が多い対称性では表現行列や掛算表を求めるのは大変であるので、表現行列と群の掛算表を簡単に求めることが出来るプログラムを作成した。(図37)

プログラムは、外部副プログラムで作成した。また、表現行列の作成では点の動きの入力方法が3種類[5]だったので1種類に変更し、更に類を求めるプログラムも作成した。基本モデル(平面モデル)は恒等操作と平面鏡映操作の表現行列が同じになるので講義には用いなかった。

プログラムは主に行列計算を行うので行列演算の命令が用意されている Ultra BASIC ver. 1.00

を使用した。

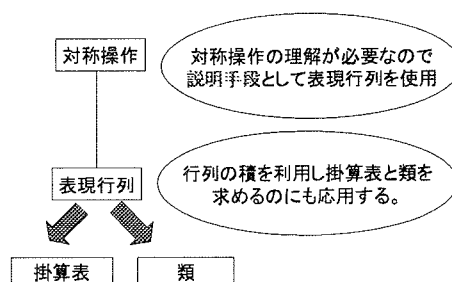


図36 対称操作と表現行列の関係

プログラムの内容

- ・ プログラムⅠ…表現行列を作成する
- ・ プログラムⅡ…群の掛算表を作成する
- ・ プログラムⅢ…群の類を求める

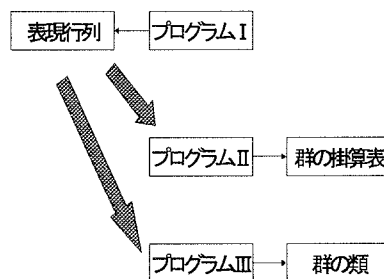


図37 プログラムの関係

4. 1 表現行列の試験実施

対称操作を理解しているかどうか調べる為に、対称性 T_d, O_h の対称操作の表現行列を求める問題を「構造化学」の受講生 66 名に対して出題した。

2001年11月20日に、対称性 O_h (立方体) の対称操作 $C_3(1), C_4(1), \sigma_h(1), S_6(1), \sigma_d(1), i$ について表現行列を求めるテストを行った。

2001年11月27日に、図14に示した立方体モデル(対称性 T_d) の対称操作 $C_3(1), C_3^2(1), C_2(1), S_4(1), S_4^3(1), \sigma_d$ について表現行列を求める問題を出題した。

立方体モデル（対称性 T_d ）の試験結果を表 5 に示した。

表 5 表現行列の試験結果

	正解人数(人)	正解率(%)
$D(C_3)$	44	67
$D(C_3^2)$	39	60
$D(C_2)$	60	91
$D(S_4^3)$	37	56
$D(S_4)$	40	61
$D(\sigma_d)$	57	86

対称性 T_d , O_h ともにほとんどの問題の正解率が 6 割以上だったので、対称操作についてはだいたい理解できていることが分かった。

5. 対称性の試験

有効なモデルの中から、モデルの対称性を解答させる試験をネット上で実施した。問題を出題し、研究室のサーバーのファイルに解答のデータを書き込み、採点するプログラムを Perl 言語で作成した。送られてきたデータが書き込まれているファイルを利用し、各問題の正解人数や誤答を分析し、理解しやすい対称性・理解しにくい対称性を検討した。

5. 1 プログラムの説明

まずプログラムに必要なファイルを作成し、作成したファイルを次のフォルダに保存した。

フォルダ構成

作成したプログラムは図 3 8 のような流れになる。その際必要なファイルを以下に示す。

問題フォルダ・・・有効なモデルの中から選択したモデルに番号をつけた 問題ファイル とその 正解ファイル を入れるフォルダ。

gif フォルダ・・・出題するモデルの gif 画像 を入れるフォルダ。

data フォルダ・・・学生番号を入力して作成される個々のファイルが入るフォルダ。

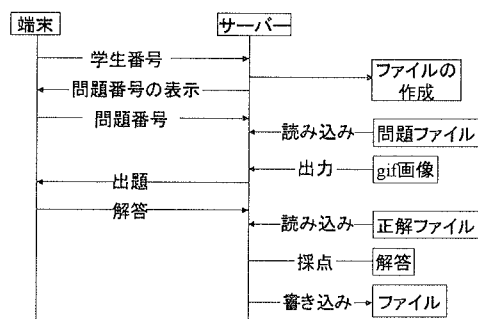


図 3 8 プログラムの流れ

プログラムの詳しい流れと説明は以下のようになる。

- ① 学習者が学生番号を入力すると、研究室のサーバーに学生番号を名前とするファイルが作成される。文献[6]と同じ方式である。
問題番号を表示し、学習者が問題番号を送信すると問題フォルダの中から送信された問題番号のファイルを読み込み、それに応じた画像を出力し出題する。一つ一つの対称操作を見つけるのが困難でより正確に「対称性」という抽象的なものを理解してもらうため、小野[3]により導入された「主軸の種類と有無」「側軸の数」「対称面の種類」「対称面の数」「対称性の種類」という質問形式を利用した。
- ② 学習者が解答を送信すると問題フォルダの中から正解ファイルを読み込み、送信された問題の解答と対応させ正解か不正解かを採点する。そして「問題番号」と「解答」と「○あるいは×」を①で作成されたファイルの中書きこむ。
- ③ 学習者が②～③を繰り返し、終了ボタンをクリ

ックすると、回答数と正解数を集計し合格か不合格を表示する。また正解数と所要時間を①で作成されたファイルの中に書きこむ。(時間は学生番号を送信してから終了ボタンをクリックした時まで)

5. 2 試験の実施

「構造化学」の受講生 68 名を対象に共通教育棟 307 室で試験を実施した。34 名ずつ 2 組に分けて実施した。前半と後半で 30 問ずつ出題し、前半と後半で問題が違うようにした。6 割未満だった学生に再試験を行い、更に違う問題を 35 問出題し、データの数を増やし統計処理を行った。試験実施日は 12 月 20 日で前半は 15:00~, 後半は 16:20~行った。また再試験の 1 回目, 2 回目はそれぞれ 2002 年 1 月 11 日, 1 月 22 日に実施した。

5. 3 試験結果の考察

- 正三角形のモデルは前, 後半共に 6 問出題したが問題 1 以外は 7 割以上の人正解していたので正三角形のモデルはよく理解している。
- 反転操作だけしか対称操作が存在しない図形は難しかったようで対称性を C1 あるいは C2 の間違いが多かった。
- 主軸の回転操作以外の対称操作を間違えている解答が多かった。どの問題も主軸の回転操作だけは正解している解答が多かった。
- 対称性が C2h の問題は正解数が少なかった。回転操作を見つけることは出来ているが回転軸と直交する鏡映面 σ_h を見つけることが出来ず, C2 の解答が多かった。 σ_h は見つけにくいようである。
- 平面図形で鏡映面が平面にしか存在しない図形では鏡映面を見つけることが出来ず, 正解数は少なかった。しかし平面図形であっても, 平面以外に鏡映面が存在する図形は正解数が多かった。よって平面図形が難しいわけではない。
- 対称性が C2v のモデルでも平面に対称面があるモデルは C2h の解答が多かった。対称操作
- σ_h は主軸の回転軸と直交する対称面であるが, それとは関係なく平面にある対称面を σ_h と勘違いしているのではないかと思われる。

6. おわりに

表現行列を用いることにより, 対称要素, 対称操作の説明はプログラムには含めなかったが, 今後の課題としては, 文献[2], [4]で行われていた項目(対称要素と対称操作の違いの説明, 対称操作の個々の回転操作, 反射操作, 反転操作, 回映操作の説明, 類についての説明)の導入である。間違えたら解説のページへのリンクを張る[4]必要もある。今後, 間違えたらヒントを出すなどの練習形式[2], [4], [6]もプログラムに取り入れる必要もあるだろう。

ステレオ投影は, 分子や結晶の対称性を表す時によく用いられる。ステレオ投影を用いての対称要素や対称操作の説明, これに関する練習問題をつけることも必要である。

また今回は考えたモデルの中から分子を対応させた。本来の目的は分子の対称性を学習することである。学習者が分子を見てモデルと対応できるかどうか, 分子を見て対称性を求めることが出来るかどうか検討が必要である。

更にモデルの表示について, 多角形の頂点に○をすべてつけているわけではなく対称性に影響がないときには○をつけていない。○と○との間には線(結合)を引きやすいが, 多面体モデルなどのとき○がないところの線を引くのは初心者には難しい。特に分子から対称性を考えるときにこの点がポイントになるのでよく考えなければならない。

ネットでの試験について、どこでもできるということは便利であるが、試験の公正さを維持するのが困難で、監督者のいるところで実施する必要がある。今回は場所、時間の制限を行い、また時間以外はプログラムの公開を停止した。このようにいくらかの使用の制限が必要である。

参考文献

- [1] 榊原正明, 市位直樹, 増原良子, 高見和邦, 立花良一: 分子の対称要素と対称性についての学習プログラム, 鳥取大学工学部研究報告, 28巻, 1号, pp. 125-132, 1997.
- [2] 榊原正明, 立花良一, 村畑太郎: 分子の対称性についての学習プログラム, 鳥取大学工学部研究報告, 29巻, 1号, pp. 99-114, 1998.
- [3] 榊原正明, 坂本光歩, 南利明, 熊倉純史, 福井裕暁: Web を利用した採水場所予約プログラム, 鳥取大学工学部研究報告, 31巻, pp. 29-36, 2000.
- [4] 小野幸雄: 卒業論文「インターネットを利用した対称性についての学習用プログラム」(2000)。
- [5] 平岡敏雄: 卒業論文「分子の対称性における基本モデルとその表現行列」(2001)。
- [6] 榊原正明, 高見和邦, 堀内敏史, 増原良子: ネットワークを利用したインタラクティブなソフトウェア, 鳥取大学工学部研究報告, 29巻, 1号, 1998, pp. 85-97.

(受理 平成 14 年 9 月 30 日)