

分子の対称性についての学習プログラム

榊原 正明・立花 良一・村畑 太郎
物質工学科

A Computer Software Program for Molecular Symmetry
Masaaki SAKAKIBARA, Ryoichi TACHIBANA, and Taro Murahata
Department of Materials Science, Faculty of Engineering
Tottori University, Tottori, 680-8552 Japan
E-mail: sakaki@lemon.bio.tottori-u.ac.jp

Abstract: This paper will describe a computer program for molecular symmetry which was converted from stand alone use by individual computers to a network of computers linked with LAN. The computer software program was coded with Visual Basic software. The main topic was changed from molecular symmetry elements to molecular symmetry operations. The results of a questionnaire carried out on users of the improved software learning program are explained.

Keywords: Educational computer program, Molecular symmetry, Molecular symmetry operations, Visual Basic, LAN

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には必須の概念である。対称性の入門である分子の対称性を学習するプログラムは大崎により N88BASIC 言語で作成された[1]。その内容は分子を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、対称性を答えるものである。

我々は大崎[1]のプログラムに改良と追加を行い、実施結果とあわせて報告した[2]。

主な改良点と追加点は以下のようである。

グラフィックを取り入れたり、また簡単な分子の例を取り入れるなどして、説明文をわかりやすくしたこと。

分子の形と対称性などから、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こと。

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すようにして、どの対称要素を間違えたかわかるようにしたこと。さらに回転軸と対称面についてはそれぞれ全部正解でなければ正解の表示は行わないようにした。

分子の数を14から39まで増やしてなるべく多くの対称性の学習ができるようにしたこと。

対称性の入力に対して、各対称要素が、あるか、ないか、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こと。

前報[2]のプログラムのプログラムは N88BASIC で作成されており、GUI をもったプログラムを作成することは難しく、またプログラムコードが複雑になるという欠点があった。また、1つのプロ

グラムファイルとして使用できるプログラムサイズが64KBまでしかなく、グラフィックの使用とデータ量の増大からプログラムのサイズは64KB以下に押さえるのは困難であり、このままN88BASICで作成を続行するのは困難であった。

そこで、これらの問題を改善するために今回のプログラム作成にあたり、プログラム言語としてVisual Basicを使用した。Visual Basicの[他のソフトで描画したグラフィックを取り込んで使用できること。WindowsのGUIを、比較的容易に開発できる。]という特徴を生かしてプログラムの大幅な書き直しを行った。これにより操作性の向上を図ることができた。さらに前報[2]までは対称要素を答えるようにしていたが、対称性(点群)を決めるのは対称操作であるので、対称操作を答えるように変更を行った。

前報[2]ではスタンドアロンでコンピュータを使用していたが、今回はLANを利用したシステムを利用した。

2. プログラムの改良点と追加点

プログラムの改良点及び追加点としては、次のようなことを行った。

1 対称操作の説明の追加

前報[2]のプログラムでは対称操作に関して、対称要素と対称操作の違いという点だけしか説明していなかったため、対称操作の個々の回転操作、反射操作、反転操作、回映操作の説明を追加した。

2 ステレオ投影の追加

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。これによって、プログラムを将来的に結晶構造や空間群などを学習できるように発展させた場合にも役立つことができる。

3 対称要素と対称操作の練習問題の追加

説明文を読んだ後に、内容について再確認でき、

より理解を深められるよう練習問題を追加した。

4 演習問題の変更

演習問題の設問を対称要素から対称操作に変更し、不正解時に表示される文章によるヒントを対称操作にあてはまるように書き直した。

5 対称性の説明の追加

前報[2]のプログラムでは、対称性がどのように定義されるのか説明がなかったため、理解を深める為に説明を追加した。

6 類についての説明の追加

キャラクター表は類に分類された対称操作に対応している。キャラクター表を参照するには類についての知識が必要であるため、説明を追加した。

7 Moldaの利用

分子を表示するのにMoldaが利用できるようにした。

3. プログラムの内容

3. 1 プログラムの流れ

上で述べた改良及び追加を行った結果、本プログラムの流れは図1のようになった。順を追ってプログラムの説明をする。まずプログラムを実行するとスタート画面が表示される。次に学籍番号を入力する。学籍番号を入力すると、確認のためにその学生の氏名が表示される。

次に説明の項目に行く。

3. 2 説明について

「説明の項目」は表1のように7つに分けられている。

「対称要素の説明」は表2のように5つに分けられており、「主軸と側軸についての説明」はさ

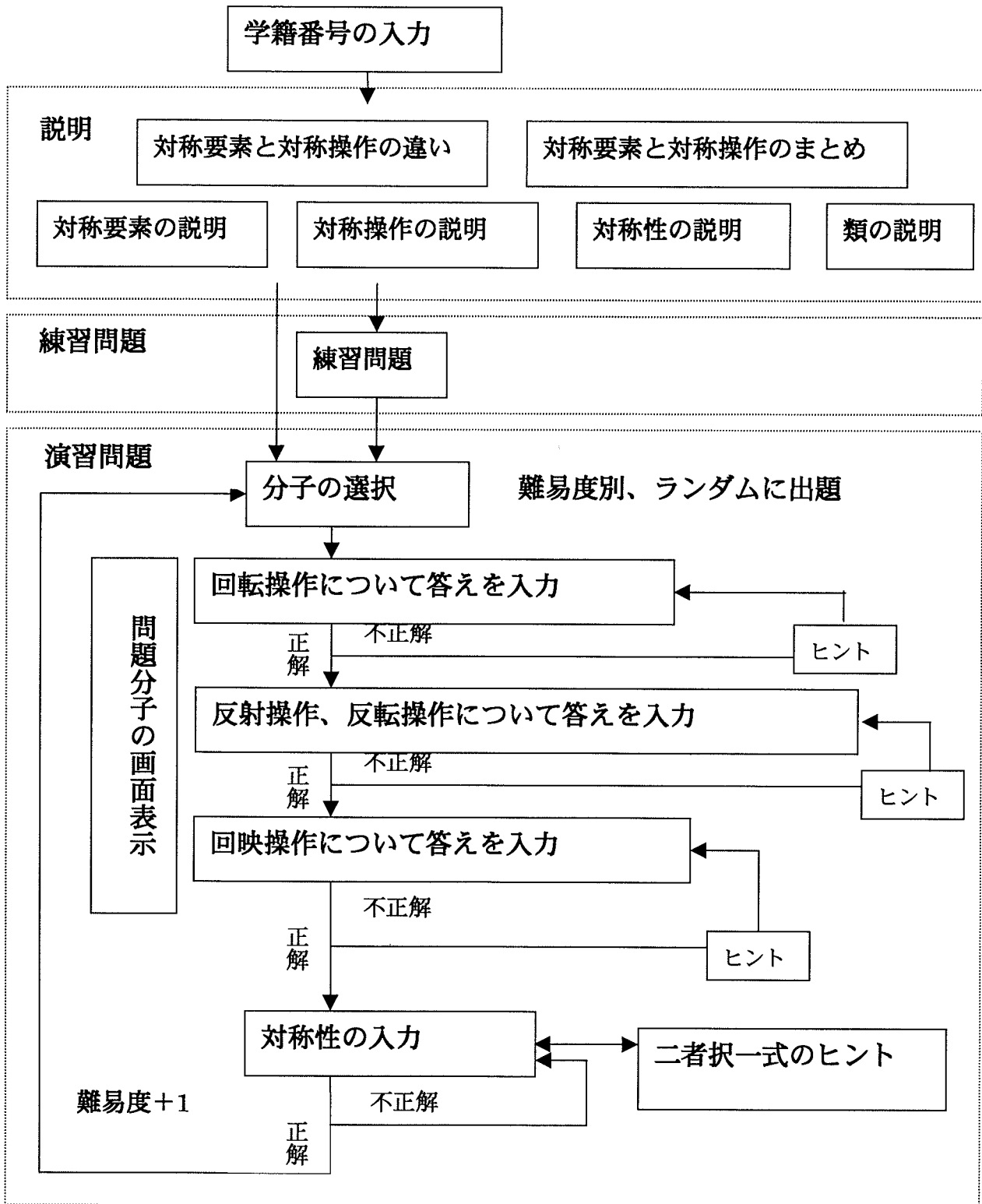


図 1 本プログラムの流れ

らに表3のように4つの項目に分れている。

「対称面の説明」は σ_h , σ_v , σ_d の3つに分れている。

「対称操作の説明」は回転操作, 反射操作, 反転操作, 回映操作の4つに分れている。

また, 「対称性の説明」は表4のように11の項目に分れている。「類の説明」は(類について)と(類の幾何学的意味)との2つに分れている。

「すべての説明をみる」を選択すると「対称要素と対称操作の違い」, 「対称要素の説明」, 「対称操作の説明」, 「対称要素と対称操作のまとめ」を続けてみることができる。また, 「対称要素の説明」や「対称操作の説明」にステレオ投影を用いている。用いたステレオ投影は C_3 , C_4 , σ_h , σ_v , σ_d , i , S_3 , S_4 の8種類である。

表1 説明の項目

対称要素と対称操作の違い
対称要素の説明
対称操作の説明
対称要素と対称操作のまとめ
対称性の説明
類の説明
演習問題

表2 対称要素の説明

回転軸について
主軸と側軸について
対称面について
対称心について
回映軸について

表3 主軸と側軸について

主軸と側軸について① (回転軸を一本だけ持つ場合)
主軸と側軸について② (C_2 回転軸とこれよりも次数の高い回転軸を同時に持つ場合)
主軸と側軸について③ (互いに垂直な3本の C_2 回転軸だけを持つ場合)
主軸と側軸について④ (最高次数が3以上の回転軸を複数持つ場合)

表4 対称性(点群)の説明

C_n 点群	D_n 点群
C_{nv} 点群	D_{nh} 点群
C_{nh} 点群	D_{nd} 点群
S_n 点群	
$D_{\infty h}$, $C_{\infty v}$ 点群 (線形分子)	
T , O , I 点群 (回転操作だけからなる等軸系の点群)	
T_d , T_h , O_h , I_h 点群 (回転操作だけからなる等軸系の点群)	
まとめ	

3.3 練習問題について

説明文中の内容を再確認するために練習問題が用意されている。練習問題は5題用意されており、回転軸及び回転操作(C_n)に関するものが1題、対称面に関するものが3題、回映操作(S_n)に関するものが1題用意されている。これらの問題は、図形のグラフィックを見て設問に答える形式をとっている。練習問題の実行画面を図2~5に示す。画面には経過時間と間違い数を表示している。

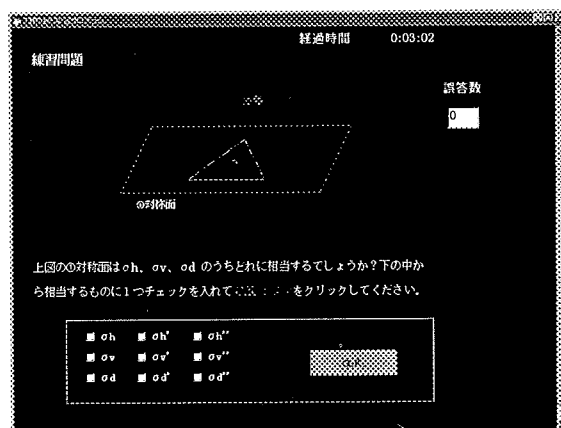


図4 対称面2 (練習問題)

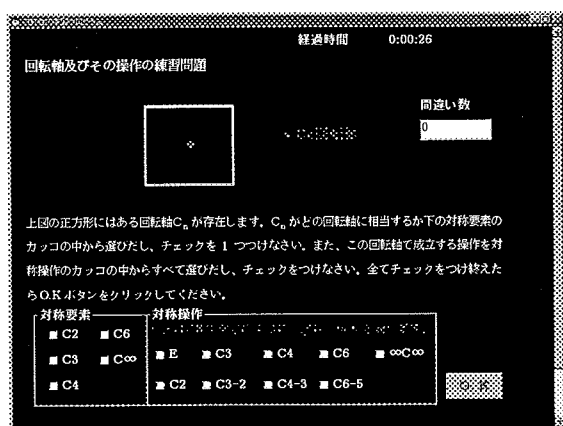


図2 回転軸と回転操作 (練習問題)

題分子の一覧を表5に示す。問題分子は、対称性に関する教科書によく例としてよく取り上げられている分子を使用することを基本方針とした。そこで、前報[2]のプログラムで使用した問題分子のリストに追加、削除を行った。前報[2]では教科書に例として出てくる分子を網羅しており、今回は2つの分子(シクロブタンと四塩化金酸(3)イオン)を削除し、3つの分子(ジクロロメタン、硝酸イオン、四塩化白金酸(2)イオン)を追加した。シク

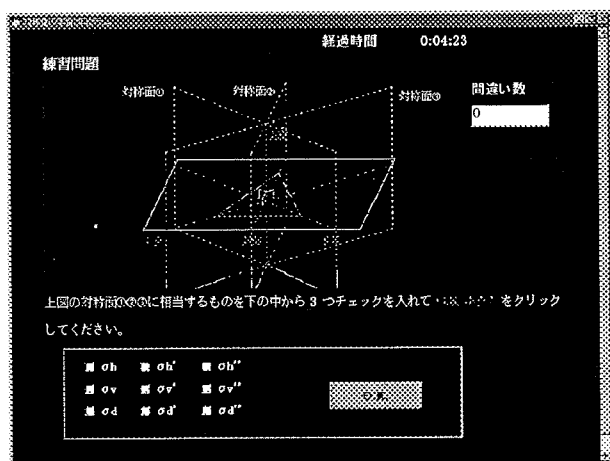


図3 対称面1 (練習問題)

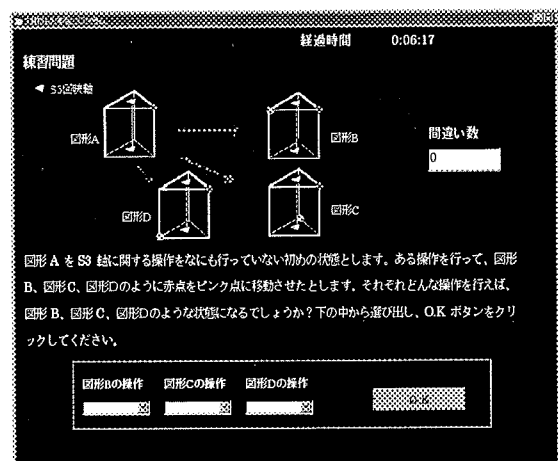


図5 回映軸 (練習問題)

3.4 演習問題 (対称操作の入力)

演習問題には、40題の分子が5段階の難易度別に用意されている。演習問題で用意されている問

シクロブタンは教科書に例としてよく取り上げられているが、実際の形は炭素の四員環が折れ線状になっており、主軸に直交する σ_h が存在せず、 D_{4h} 点

群に分類されない。そこで、学生が混同しないように削除した。四塩化金酸(3)イオンについては、四塩化白金酸(2)イオンの方がよく取り上げられているので削除した。

難易度別に表示された分子は、ランダムに選択される。図6に演習問題の実行画面を示す。演習問題では問題分子のグラフィックを見ながら、回転操作、反射操作及び反転操作、回映操作ごとにその分子中に成立する対称操作にチェックを入れて答えるようにしている。画面右下に対称操作の選択肢が用意されている。回転操作に関する選択肢(表6)は、59個用意されており、反射操作及び反転操作の選択肢(表7)は19個、回映操作は81個の選択肢(表8)が用意されている。

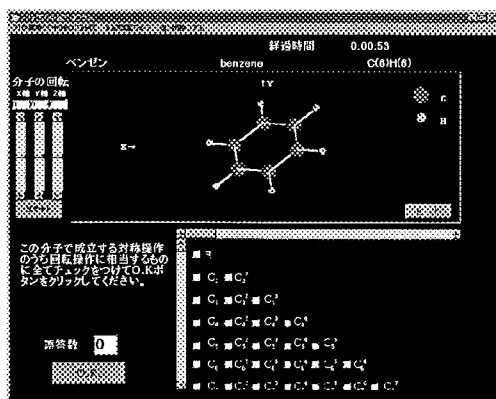


図6 演習問題の実行画面

不正解の場合には、文章によるヒントが用意されている。ヒントは、その分子が分類される対称

性ごとにヒントを用意しており、今回使用した問題分子は20種類の対称性に分類され、ヒントの出し方は20種類である。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_{6h} , T_d , O_h である。判定は回転操作、反射操作及び反転操作、回映操作ごとに行っている。

ヒントの出し方の基本方針を D_{6h} 対称性の例を用いて説明すると、チェックを入れるべき対称操作についてチェックが入っていないければ、“ C_6 回転軸はありませんか?”とヒントが出る。ダミーとして用意している対称操作にチェックを入れれば、“ C_6^2 操作は120度回転することであり、 C_3 操作として表せます。”とヒントが出る。また、対称操作の個数が足りないと“側軸(C_2)の操作はいくつありますか?”とヒントが出る。成立しない対称操作にチェックをいれれば、“ C_4 回転軸はありません。”とヒントが表示される。

また、画面上のヒントボタンをクリックすると回転操作が見つかりやすい角度へと分子を回転させる機能を付けている。

3.5 演習問題 (対称性の入力)

すべての対称操作を正解すると、次にその分子の対称性を用意された45種類の対称性の中から1つ選択する。図7に対称性の入力画面を示す。また、二者択一式のヒントが用意されており、“質問形式でヒントを出す”ボタンをクリックすると二者択一式のヒントを表示する画面にいくようになっている(図8)。

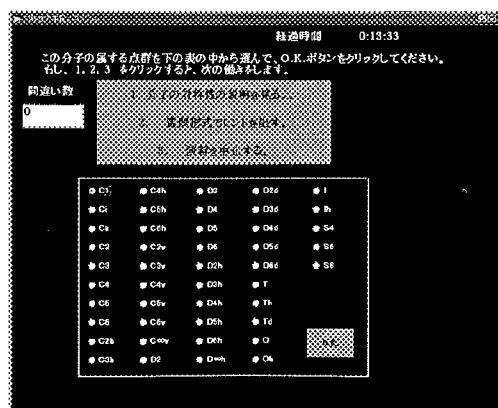


図7 対称性の入力画面

表5 問題分子の一覧

番号	難易度	分子名	番号	難易度	分子名
1	1	アンモニア	21	4	五塩化燐
2	1	二酸化硫黄	22	4	過酸化水素
3	1	水	23	4	ナフタレン
4	1	塩化ホスホリル	24	4	エタン(ねじれ形)
5	2	トランス-ジクロロエチレン	25	4	エタン(重なり形)
6	2	シス-ジクロロエチレン	26	4	ルテノセン
7	2	ホウ酸	27	4	フェロセン
8	3	三フッ化ホウ素	28	4	ジ(-ベンゼン)クロム
9	3	塩化スルフルル	29	4	ペンタボラン
10	3	塩化チオニル	30	4	一酸化炭素
11	3	エチレン	31	4	ジブロモテトラクロロ白金(2)酸イオン
12	3	四フッ化キセノン	32	5	シクロヘキサン
13	3	ジクロロメタン	33	5	四塩化炭素
14	3	ベンゼン	34	5	六フッ化硫黄
15	3	シクロプロパン	35	5	二酸化炭素
16	3	硝酸イオン	36	5	アセチレン
17	3	フッ化酸化キセノン	37	5	アレン
18	3	四酸化二窒素	38	5	メタン
19	3	四塩化白金酸(2)イオン	39	5	フェロシアンイオン
20	4	四フッ化硫黄	40	5	過塩素酸イオン

この画面では、質問形式でヒントが表示され、そのヒントに Yes, No を繰り返すにつれ、画面上部に表示される対称性が消えていく。最終的に残った1つがその問題分子の持つ対称性となる。このフローチャートの主な改良点は⑩⑪⑫の部分で、 S_{2n} 対称性を”対称要素が C_n , S_{2n} 以外にある”という質問で分けて、 C_n , C_{nh} , C_{nv} 対称性を分類するようにしていたが、学生に使用させた結果この部分で間違える学生が多く、図9のように C_{nh} , C_{nv} 対称性を分類してから C_n , S_{2n} 対称性を分類するようにした。

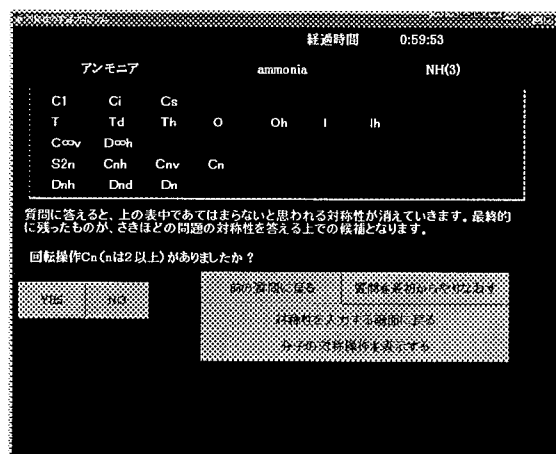


図8 二者択一式のヒント画面

表 6 回転操作の選択肢

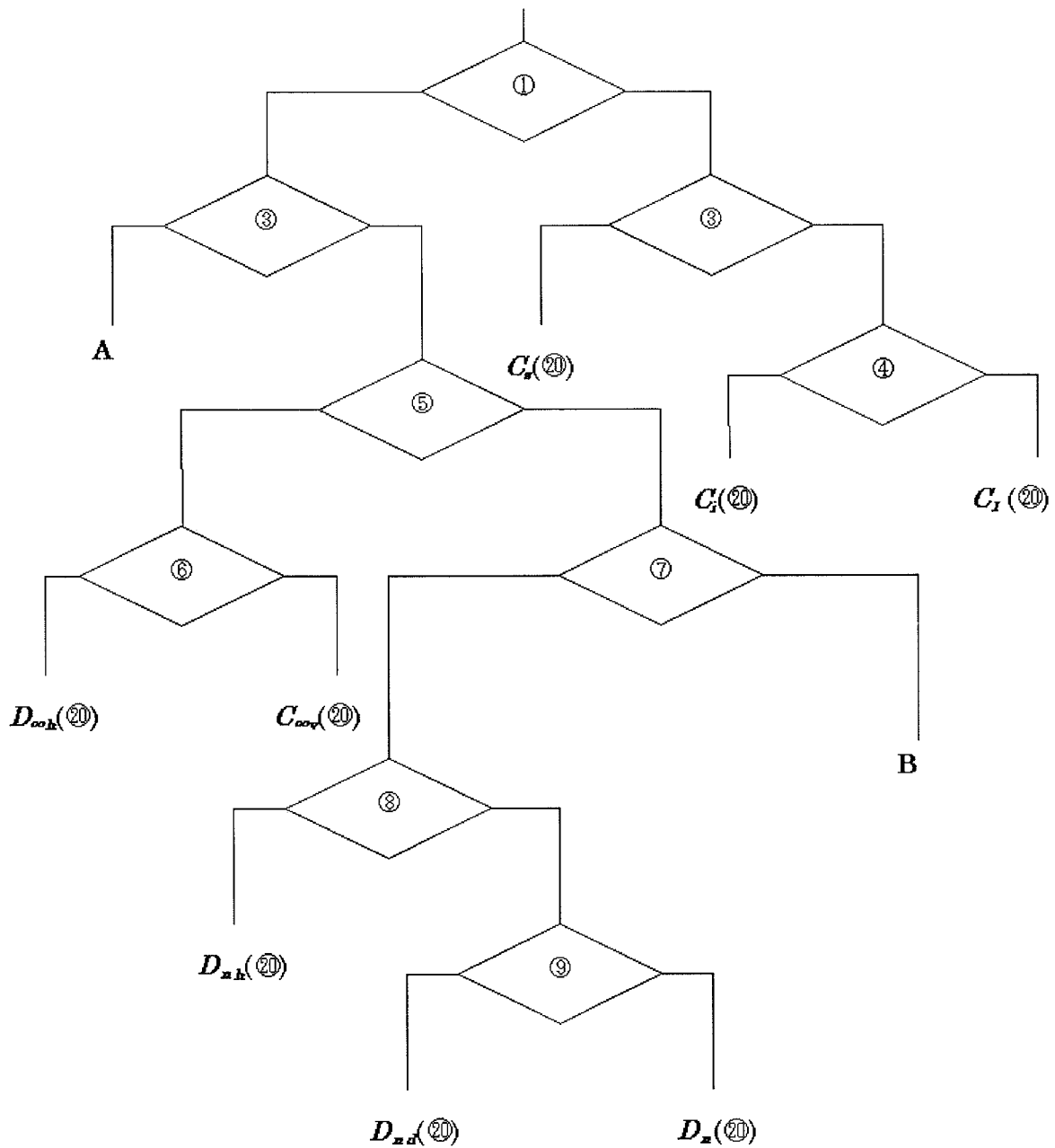
E
C_2 C_2^2
C_3 C_3^2 C_3^3
C_4 C_4^2 C_4^3 C_4^4
C_5 C_5^2 C_5^3 C_5^4 C_5^5
C_6 C_6^2 C_6^3 C_6^4 C_6^5 C_6^6
C_7 C_7^2 C_7^3 C_7^4 C_7^5 C_7^6 C_7^7
C_8 C_8^2 C_8^3 C_8^4 C_8^5 C_8^6 C_8^7 C_8^8
$\infty C_\infty^{(\phi)}$ ($\phi=1\sim\infty$)
C_2' C_2'' C_2''' $C_2'^{(4)}$ $C_2'^{(5)}$ $C_2'^{(6)}$ $C_2'^{(7)}$ $C_2'^{(8)}$ $\infty C_2'$
C_3' $C_3^{2'}$ C_3'' $C_3^{2''}$ C_3''' $C_3^{2'''}$ $C_3'^{(4)}$ $C_3^{2'(4)}$
C_4' $C_4^{2'}$ $C_4^{3'}$ C_4'' $C_4^{2''}$ $C_4^{3''}$

表 7 反射操作, 反転操作の選択肢

σ_h σ_h' σ_h''
σ_v σ_v' σ_v'' σ_v''' $\sigma_v'^{(4)}$ $\sigma_v'^{(5)}$ $\sigma_v'^{(6)}$ $\infty \sigma_v'$
σ_d σ_d' σ_d'' σ_d''' $\sigma_d'^{(4)}$ $\sigma_d'^{(5)}$ $\sigma_d'^{(6)}$
I

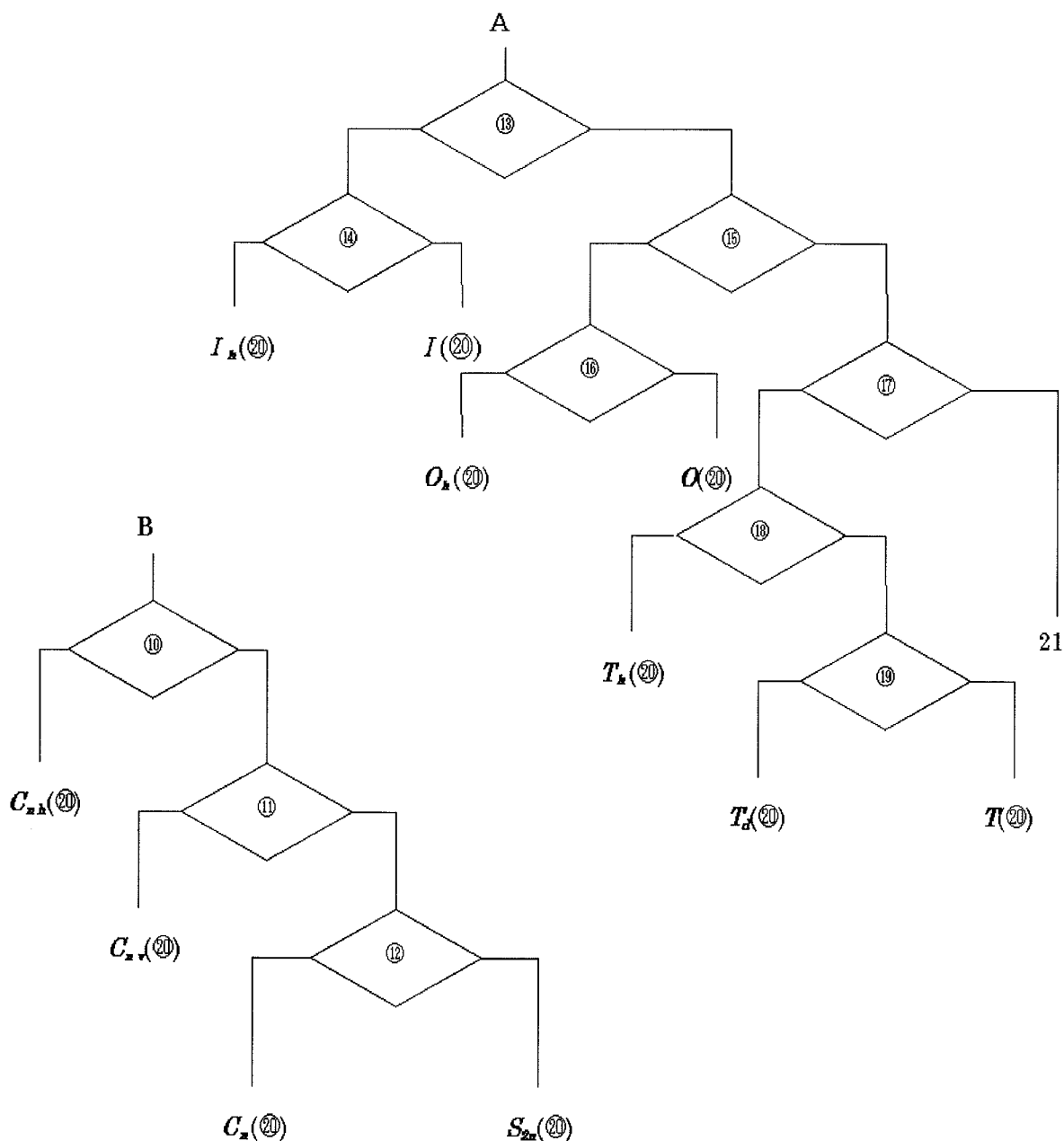
表 8 回映操作の選択肢

S_3 S_3^2 S_3^3 S_3^4 S_3^5 S_3^6
S_4 S_4^2 S_4^3 S_4^4
S_5 S_5^2 S_5^3 S_5^4 S_5^5 S_5^6 S_5^7 S_5^8 S_5^9 S_5^{10}
S_6 S_6^2 S_6^3 S_6^4 S_6^5 S_6^6
S_7 S_7^2 S_7^3 S_7^4 S_7^5 S_7^6 S_7^7 S_7^8 S_7^9 S_7^{10}
S_7^{11} S_7^{12} S_7^{13} S_7^{14}
S_8 S_8^2 S_8^3 S_8^4 S_8^5 S_8^6 S_8^7 S_8^8
S_{10} S_{10}^2 S_{10}^3 S_{10}^4 S_{10}^5 S_{10}^6 S_{10}^7 S_{10}^8 S_{10}^9 S_{10}^{10}
S_{12} S_{12}^2 S_{12}^3 S_{12}^4 S_{12}^5 S_{12}^6 S_{12}^7 S_{12}^8 S_{12}^9 S_{12}^{10}
S_{12}^{11} S_{12}^{12}
$\infty S_\infty^{(\phi)}$ ($\phi=1\sim\infty$)
S_4' $S_4^{3'}$ S_4'' $S_4^{3''}$
S_6' $S_6^{5'}$ S_6'' $S_6^{5''}$ S_6''' $S_6^{5'''}$



- | | |
|--|-------------------------------|
| 1. 回転操作(C_n (n は 2 以上))がありましたか? | 2. 回転操作(C_3')がありましたか? |
| 3. 反射操作(σ)がありますか? | 4. 反転操作(i)がありますか? |
| 5. 直線分子でしたか? | 6. 反射操作(σ_h)がありましたか? |
| 7. 主軸の操作(C_n)に直交する 2 回回転軸の操作(C_2')がありませんか? | 9. 反射操作(σ_d)がありましたか? |
| 8. 反射操作(σ_v)がありましたか? | |
| 20. わかりましたか? | |

図 9-1 二者択一式のヒントのフローチャート①



- | | |
|--------------------------------|----------------------------------|
| 10. 反射操作(σ_h)がありましたか? | 11. 反射操作(σ_d)がありましたか? |
| 12. 回映操作(S_{2n})がありましたか? | 13. 回転操作(C_5')がありましたか? |
| 14. 反射操作(σ_h)がありましたか? | 15. 回転操作(C_4')がありましたか? |
| 16. 反射操作(σ_h)がありましたか? | 17. 回転操作(C_3')がありましたか? |
| 18. 反転操作(i)がありますか? | 19. 反射操作(σ_d)がありましたか? |
| 20. わかりましたか? | 21. あてはまる点群がありません。もう一度よく考えてください。 |

図9-2 二者択一式のヒントのフローチャート②

正解すると難易度が 1 つ上がり分子の選択画面に戻る。また、難易度が 3 以上になると問題を 2 問解かないと次に進まないようになっている。

4. プログラムのファイル構成

本プログラムのファイル構成はプログラムを実行するプログラムファイルと実行時に必要なデータを供給するデータファイルに分かれる。

4. 1 プログラムファイルの構成

Visual Basic は各機能ごとにモジュールに分けてプログラミングする。モジュールファイルの集まりをプロジェクトファイルで管理して一つのアプリケーションとして実行できる。本プログラムは次のようなモジュールファイルから成っている。なお、Visual Basic は、文字を下付けにして表示する機能が無いため、説明に使用する文章は Word 97 で作成し、ActiveX オートメーション機能を使ってフォームモジュール内に取り込むようにしている。また、グラフィックは Super Kids, MS PAINT で作成した。プログラムファイル

フォームモジュールファイル
合計 76 個のファイル
標準モジュールファイル
合計 1 個のファイル

本プログラムは、各機能ごとに分れたフォームモジュールを MDI フォーム内に取り込み、複数のフォームを 1 つの画面に表示する方式を取っている。演習問題の実行画面では、経過時間を示す timerform と問題分子を表示する bunsihyoiform, 回転操作に関する選択肢、その正誤の判定をする taishosousa1form を同時に表示している図 6。回転操作に正解すると

taishosousa1form を反射操作、反転操作に関する選択肢とその正誤の判定をする taishosousa2form とに入れ替えて表示する。

4. 2 データファイルの構成

データファイルは次のような構成になっている。

member.txt ; 学生の学籍番号と氏名
daimoku2.txt ; 演習問題で使用される分子の一覧データ
sousaCn.txt , sousasigma.txt ,
sousasn.txt ; 演習問題の設問項目の文字列
shitsumon2.txt ; 二者択一式のヒントで使用される文字列
zal~40.txt ; 初期の分子の座標の値データファイル
zal~40.tmt ; ヒントボタンがクリックされたときの分子の座標の値データファイル
iro.txt ; 分子を画面表示するときの色の指定 (RGB 値)
hankei.txt ; 各原子の半径のデータ

zal~40.txt の分子座標の値は Molda を使用して値を設定しており、その値が使用できるようにプログラムを改良した。Molda を使用するとビジュアルな環境で分子のモデリングが容易にでき、画面で分子の表示を確認しながら、座標の値を簡単に設定できるようになった。また、Molda にはこれまでに作成された分子の豊富なテンプレートが用意されており、新しい分子を追加するときにはこのテンプレートを使用して分子のモデリングができ、座標の値を設定できる [5]。

以上が本プログラムの構成である。

5. プログラムの実施

本プログラムを用い、物質工学科 3 年次生に演習を 2 回行った。実施人数は、1 回目は 86 名、2 回目は 82 名であった。使用したパソコンは 4～6 台である。学生数とパソコンの台数の関係から、実施時間は 1 回目、2 回目とも 1 人につき 30 分に制限した。また、実施後にアンケートを行った。

1 回目の実施では、演習問題の設問を対称操作に変え、対称操作の説明を追加したプログラムで実施し、2 回目の実施では、説明文中に練習問題を取り入れ、対称要素及び対称操作の説明にステレオ投影を取り入れ、対称性および類について説明を追加したプログラムで実施した。1 回目、2 回目の実施とも「すべての説明を見る」を選択してから、演習問題をするように指導した。

本プログラムの実施は研究室の LAN システムを用いて行った[4][5]。そのシステムを説明すると、「中心となるパソコン」に実行ファイル形式にしたプログラムファイルとデータファイルをおいておく。

LAN を使って他の Windows パソコンからプログラムファイルを読み出し、実行する。このとき、Visual Basic の App オブジェクトの Path プロパティを用いるとプログラムが起動したフォルダ名の文字列を得ることができる。他のパソコンからこの「中心となるパソコン」のプログラムファイルを読み出すと、“ $\text{\%中心となるパソコン}\%$ 起動したフォルダ名 \% ”となる文字列が返ってくる。データファイルを起動したフォルダと同じところにおいておけば、この文字列をつかってデータファイルの読み出しができる。また、プログラムを実施したときの学生の成績を「中心となるパソコン」のファイルへ書き込

みことができる。Windows パソコンでかつ LAN につながっていれば、どのパソコンでも「中心となるパソコン」となりうる。

なお LAN を使用したシステムの利点として、次のようなことが考えられる。

1. プログラムを実施するときに複数のパソコンにプログラムをインストールする必要がなくなる。
2. プログラムにバグが出たときに「中心となるパソコン」のプログラムを修正するだけですむ。
3. プログラムの実施後に学生の成績ファイルを「中心となるパソコン」へ集められ、回収する必要が無い。

5. 1 アンケート結果について

1 回目のアンケート結果を表 9～12 に示した。対称操作の説明は 1 回目、2 回目の実施とも第 1 種回転操作、第 2 種回転操作の項目に分けたプログラムで実施しており、2 回目の実施後に学生の意見により、対称操作の項目を回転操作、反射操作、反転操作、回映操作の 4 つに分けた。

2 回目のアンケートの結果を表 13～14 に示す。対称性の説明のアンケートには 20 名しか回答していない。類についての説明を見た学生は 3 名だけであった。

また、この実施についての意見としての主なものは「面白かった、わかりやすかった。」「講義よりわかりやすい。」であった。さらに「実際の分子になると分かりづらい。」「時間が足りない。」「練習問題をもっと増やしてほしい。」のような問題点を示した意見もあった。

表 9 対称要素の説明について

項目 \ 質問	説明文がわかりやすい	グラフィックが役立つ
回転軸について	92 (73)	92 (70)
主軸と側軸について	90 (77)	92 (72)
対称心について	96 (65)	89 (58)
対称面について	93 (57)	92 (55)
回映軸について	87 (49)	91 (54)

表 10 対称操作の説明について

項目 \ 質問	説明文がわかりやすい	グラフィックが役立つ
第1種回転操作(回転操作)	94 (62)	91 (66)
第2種回転操作(反射操作, 反転操作, 回映操作)	87 (50)	83 (53)

表 11 対称要素と対称操作の違いについて

項目 \ 質問	説明文がわかりやすい	グラフィックが役立つ
対称要素と対称操作の違い	83 (43)	89 (49)

表 12 その他の項目について

分子の回転は対称操作の答えの入力に役立ちましたか?	86 (62)
対称操作を選ぶ際のプログラムの操作性はどうでしたか?	91 (60)
対称操作を選んだ際に出たヒントはわかりやすかったですか?	87 (64)
対称性を選ぶときに, 二者択一方式の導きかたは, わかりやすかったですか?	82 (59)

表 9 - 1 2 の数字は各項目の評価を 5 段階で答えさせたときに 3 以上の評価をした%, ()内の数字は 4 以上の評価をした%.

表 13 ステレオ投影について

項目 \ 質問	説明文がわかりやすい	グラフィックが役立つ
C_3 のステレオ投影	92 (62)	90 (60)
σ_h のステレオ投影	89 (53)	86 (51)
σ_v のステレオ投影	85 (53)	83 (50)
σ_d のステレオ投影	86 (52)	83 (47)
I のステレオ投影	93 (58)	89 (49)
S_3 のステレオ投影	94 (65)	92 (56)
S_4 のステレオ投影	93 (61)	92 (56)

表 14 対称性の説明について

項目 \ 質問	説明文がわかりやすい	グラフィックが役立つ
C_n	92 (70)	96 (59)
C_{nv}	89 (63)	95 (53)
C_{nh}	91 (64)	96 (44)
D_n	81 (53)	86 (32)
D_{nh}	80 (53)	83 (34)
D_{nd}	83 (55)	86 (47)
S_n	93 (64)	93 (51)
線形分子	76 (48)	
T, O, I 点群	74 (42)	71 (18)
T_d, T_h, O_h, I_h	72 (33)	75 (25)

表 1 3 - 1 4 の数字は各項目の評価を 5 段階で答えさせたときに 3 以上の評価をした%, ()内の数字は 4 以上の評価をした%.

5. 2 演習問題の回答数について

演習問題の回答数については 1 回目, 2 回目とも 1 問が最も多く, 2 回目では, 3 問, 4 問まで回答した学生が増えている. なお, 演習問題の平均回答数は 1.3 問 (1 回目), 1.9 問 (2 回目)であった. 最大回答数は 2 問 (1 回目), 6 問 (2

回目)であった。1回目の実施では、説明文を読むのに時間がかかったことに加え、コンピューターを初めて使う学生が多く、操作に不慣れで手間取ったため、問題を解く時間がなくなったことが考えられる。2回目の実施では、対称性についての理解が深まり、またコンピューターの操作にも慣れた結果、平均回答数が向上したと考えられる。しかし、練習問題等を取り入れた結果、説明文全体が長くなってしまい、演習問題を1問も解けない学生が4%から8%へ増加している。

5. 3 練習問題で見られた傾向について

図10は練習問題の誤答者の減少の推移を示したものである。ほとんどの練習問題で1回目の誤答者の割合は5%から15%とほとんどの学生が1回目で正解しており、よく理解ができていると考えられる。

しかし、対称面②(σ_d)の練習問題では1回目の誤答者の割合が42%と高い数字になっている。この問題は σ_d 、 σ_d' と2つ選択すると正解するのであるが、この時の誤答者の選択した誤答パターンは σ_d を選択した者が43%、 σ_v 、 σ_v' を選択した者が37%であった。 σ_d を選択した者は、 σ_d があることはわかっているのだが問題をよく読んでいなかったために誤答したと考えられる。また、 σ_v 、 σ_v' を選択した者は σ_v と σ_d の区別がまだついていなかったためについて誤答したと考えられる。しかし、2回目の誤答者は8%と激減している。このことから σ_v と σ_d を区別するときにはすこしとまどうと考えられるが他の対称要素、対称操作についてはよく理解できていると考えられる。

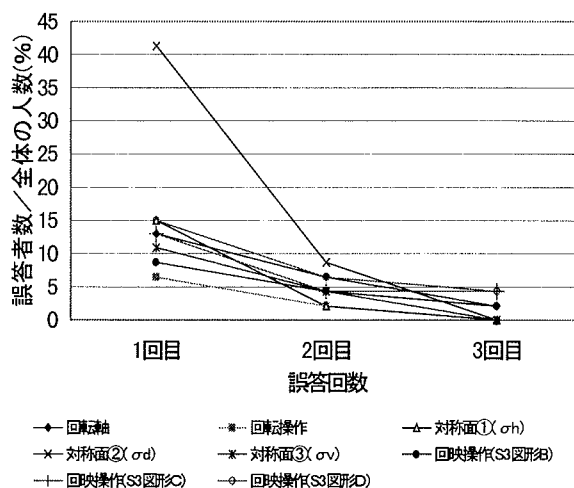


図10 練習問題の誤答者の現象の推移

5. 4 演習問題で見られた傾向について

1回目、2回目の実施で演習問題の各操作ごとの誤答者の減少の推移を図11図に示す。例としてアンモニア分子を示している。誤答回数を横軸にとり、誤答者の割合を縦軸にとっている。1回目と2回目とでは、回転操作に関する理解に向上が見られたが、反射操作及び反転操作、回映操作に関しては大きな変化はなかった。この傾向は、水や塩化ホスホニルなどの他の分子にも見られた。回映操作や対称面の練習問題の結果から、それぞれの操作については理解できていると考えられるが、分子の問題になるとそれを見つけられないという傾向があった。

6. おわりに

分子の対称性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。また、対称性に関して興味を持たせることができたと考えられる。

対称性の入門のポイントとしては以下のことが考えられる。

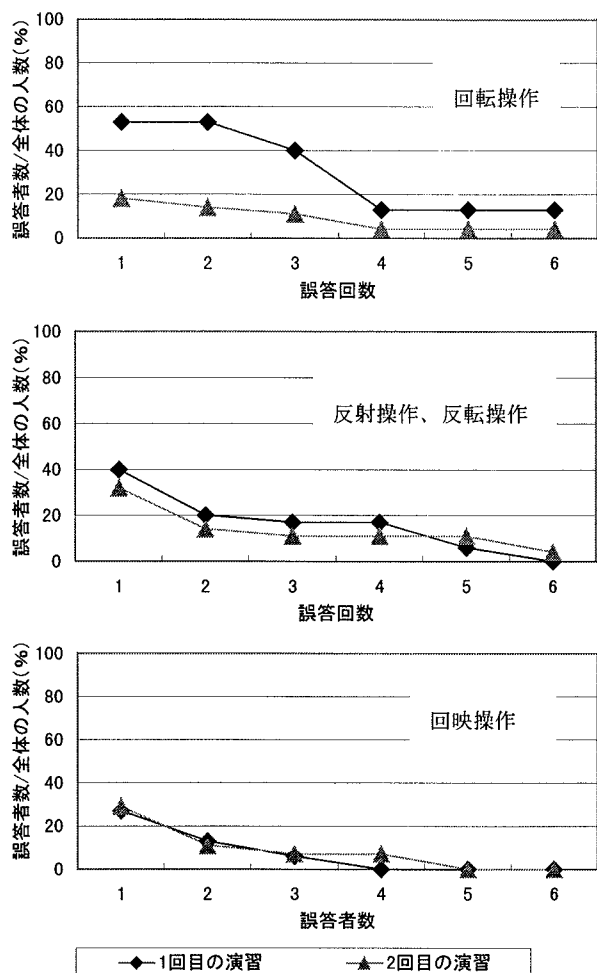


図11 演習問題の誤答者の割合の推移

対称要素と対称操作の違いを理解する。

対称要素について理解する。

対称操作について理解する。

これらの点はある程度達成されたと考えられる。しかし、対称性（点群）が対称操作（群の要素）でどのように定義されるか、また類に関する理解までには至っていないと考えられる。さらに分子中に存在する対称操作を見つけ出すのに非常に苦労していることから、文章だけのヒントではなく、表示されている分子を図形化して表示するようなヒントが必要であると考えられる。

本プログラムの改良点としては次のようなこ

とが考えられる。

1. 対称要素と対称操作の練習問題を増やして、対称要素と対称操作の基礎部分を固めること。例えば、今の段階では回映操作に関する練習問題は S_3 の回映操作だけであるが、これを S_4 , S_6 などに拡げて増やす。これは他の回転操作や対称面などについてもいえることである。また、主軸と側軸に関する練習問題を付け加えれば、対称要素、対称操作に対する理解も深くなると考えられる。
2. プログラムを、練習問題からなる対称要素、対称操作の基本的な部分を学習できるプログラムと、演習問題からなる分子中に存在する対称操作を見つけ出す練習ができる部分のプログラムの2つに分けること。そして、1回目には、練習問題中心のプログラムを、2回目には演習問題中心のプログラムを実施することが考えられる。
3. 対称性に関しては、説明だけでなく練習問題を設けることにより、点群がどのような対称操作によって定義されるかについて理解を深めること。類についても同様である。
4. 今回はステレオ投影は対称要素や対称操作を説明する補助的なものとして用いたが、これを別の項目に分けて、これに関する練習問題をつけること。
5. 演習問題が不正解の場合に表示するヒントを、文章だけでなく、表示している分子を図形化して見るができるような、視覚的に訴えかけるヒントをつけること。ただし、図形化されたヒントはある回数を間違えて初めて出るようにする。
6. 現在のプログラムでは、同じような状況なら、何度間違えても同じヒントしかでないの、間違える回数によってヒントを変え

ること [7].

7. 今の段階では分子の対称性を 45 種類の点群の中から選択して答えるだけだが、数種類のステレオ投影を示してその分子の対称性のステレオ投影を選択して答えるということ。

本プログラムは多くのグラフィックなどを取り入れた結果、約 15MB の大きさになっており、研究室内で使用するには LAN を使用すればよいが、LAN でつながっていない学外では使えない。そこで、クライアント-サーバーシステムを使いインターネットの Web 上にこのソフトをのせることが考えられる。これによって、インターネットにつながっていれば、このソフトを実行することができるようになり、自宅のくつろいだ状況の中で学習できる利点もある。また、機種に依存することなくブラウザがあれば、実行できる利点もある。これを実現するには、各モジュールごとにカプセル化されたコードを ActiveX コントロール化し、それに HTML と CGI を組み合わせることが考えられる。

参考文献

- [1] 大崎健次：化学 PC 用ソフトウェア集。'86, pp. 107-108, 吉村忠与志編, 化学 PC 研究会。
- [2] 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, 1998 年 11 月。
- [3] 榊原正明, 立花良一, 高見和邦, 松本法子, 堀内敏史：LAN を用いての採水場所予約プログラム, 鳥取大学工学部研究報告, 28 巻, 1 号, pp. 119-124, 1998 年 11 月。
- [4] 榊原正明, 立花良一, 松本法子：採水場所決定のためのプログラムの作成, コンピュータ & エデュケーション, 4 巻, pp. 75-81, 1998 年 5 月。
- [5] K. Ogawa, H. Yoshida, H. Suzuki, J. Mol. Graphics, 2(4), 113, (1984).
- [6] H. Yoshida and H. Matsuura, J. Chem. Software, 3(4), 147 (1997).
- [7] 榊原正明, 高見和邦, 立花良一：定性分析実験における学習プログラムの利用, コンピュータ & エデュケーション, 2 巻, pp. 85-89, 1997 年 6 月。

(受理 平成 10 年 8 月 25 日)