

対称操作による分子の点群自動決定プログラムの開発

○井上大輔、野口文雄、小林秀彦

埼玉大学工学部応用化学科(〒338-8570 さいたま市桜区下大久保 255)

【緒言】

ある分子が属する点群が判別できれば、その指標表を用いて可約キャラクターを直和分解することにより、混成軌道の組立に使われる原子軌道の種類や分子振動スペクトルが赤外活性なのかラマン活性化なのかが判別できる。点群を決定するフローチャートはいくつかあるがそのどれを使うにしても、分子構造が複雑になればなるほど人間の頭でそれを考えるのは困難になる。そこで今回、分子構造からその分子の属する点群を自動決定する Java プログラムを開発した。

【方法】

ユーザーは分子の構造データ(各構成原子の種類と空間座標)を指定する。各原子について、指定された対称操作行列を座標に乗算し、計算された座標と同じ位置に同種類の原子が存在するかを調べることにより、当該分子がこの対称操作に対して対称性を持つかどうかを判定できる。対称操作行列の指定は独自のフローチャートに沿って行われ、帰属する点群を決定できる。

帰属する点群を決定したら、その点群の保持するそれぞれの対称操作について動かない原子の数(N)をカウントし、対称操作の指標と N の組み合わせから分子の可約キャラクター(Γ)を得る。

【結果】

出力例として、表1に示すアンモニアの分子構造データを用いると、まず図1に示すようにメインウインドウ中央にアンモニア分子の3D画像が、右下に分子名と点群名(Schönfilesの記号)が表示される。分子の3D画像はキーボード操作によって回転する。また、メニューをクリックすることにより、図2に示すように別ウインドウでアンモニア分子の可約キャラクター表が表示される。

表1 アンモニアの分子構造データ

原子の種類	x座標(Å)	y座標(Å)	z座標(Å)
N	0	0	0.38
H	0.941	0	0
H	-0.4705	-0.8149	0
H	-0.4705	0.8149	0

【今後の課題】

混成軌道や分子振動スペクトルへ応用するために、既約表現行列の直交性から可約キャラクターの直和分解を行い、直和式を表示することを、今後の課題とする。

参考文献

- 佐藤純夫 化学群論序説 講談社(1975)
中崎昌雄 分子の対称と群論 東京化学同人(1973)

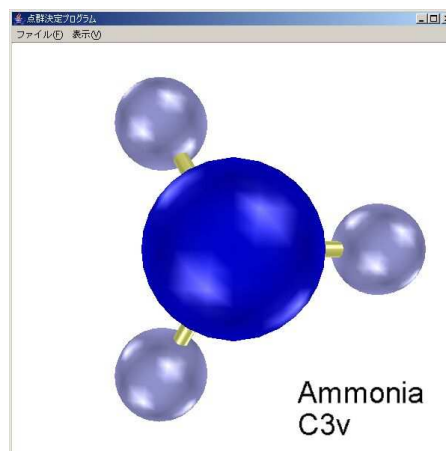


図1 メインウインドウ出力例



	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
N	4	1	2
Γ_{NH_3}	12	0	2

図2 分子の可約キャラクター表出力例