

# 八面体分子構造の点群への帰属

(久留米高専 生物応用化学科<sup>1</sup>, 香川高専 情報工学科<sup>2</sup>,  
一関高専 電気電子系<sup>3</sup>, 久留米高専 一般科目(理科系)<sup>4</sup>)  
○樋口智也<sup>1</sup>・杉村晃紳<sup>2</sup>・多田拓樹<sup>3</sup>・酒井道宏<sup>4</sup>

キーワード：点群, 分子の対称性

## 1. 緒言

本稿では, ゼミ形式の 4 年次学科横断科目「リベラルアーツ特論」で実践している STEAM 教育における工学分野(E)と数学(M)の融合, 特に八面体分子構造と群の関連性に着目し, その調査結果を報告する. 今回の調査では, 配位子の種類が 1~3 種類までの単座配位子の八面体分子構造の点群への帰属を試みた. ただし, 八面体構造を正八面体として捉え, ひずみは生じないものとする.

## 2. 群の定義

集合  $G$  の元  $a, b$  に対し, ある演算  $a * b \in G$  があり, 次の (1) - (3) を満たすとき  $G$  を群という.

- (1) (結合法則)  $a, b, c \in G$  に対し,  $(a * b) * c = a * (b * c)$  が成り立つ.
- (2) (単位元の存在)  $e \in G$  があり, 全ての  $a \in G$  に対し  $a * e = e * a = a$  が成り立つ.
- (3) (逆元の存在) 各  $a \in G$  に対し,  $a^{-1} \in G$  があり,  $a^{-1} * a = a * a^{-1} = e$  が成り立つ.

## 3. 分子対称性の記述法

分子のある場所である操作を行うと元の分子の形と区別がつかなくなることがある. この時ある場所を「対称要素」といい, ある操作を「対称操作」という. 対称操作は表 1 の操作を元とし, 合成を演算として群を成す.

表 1 対称要素とそれに対応する対称操作

| 操作 | 要素  | 記号       | 概要               |
|----|-----|----------|------------------|
| 回転 | 回転軸 | C        | 軸に対する回転          |
| 鏡映 | 鏡面  | $\sigma$ | 面に対する反転          |
| 反転 | 対称心 | i        | 中心に対する反転         |
| 回映 | 回映軸 | S        | 回転に続き回転軸に垂直な面で反転 |

## 4. 八面体分子構造

八面体分子構造とは, 6 個の配位子が中心原子の周りに対称的に配置し, それが八面体の角頂点を形成する分子構造である.

$ML_4L_2^a$  と  $ML_2L_2^aL_2^c$  では cis 型と trans 型が存在し,  $ML_3L_3^b$  では fac 型と mer 型が存在することが知られている. 八面体構造の異性体の数を表 2 に示す.

表 2 八面体構造の異性体の数

| 化学式               | 異性体数 | 鏡像異性体の数 |
|-------------------|------|---------|
| $ML_6$            | 1    | 0       |
| $ML_5L^b$         | 1    | 0       |
| $ML_4L^bL_2$      | 2    | 0       |
| $ML_3L^bL_3$      | 2    | 0       |
| $ML_4L^bL^c$      | 2    | 0       |
| $ML_3L^bL_2L^c$   | 3    | 0       |
| $ML_2L^bL_2L_2^c$ | 6    | 1       |

## 5. $ML_3L_3^b$ の点群への帰属

$ML_3L_3^b$  の mer 型に対応する対称操作をまとめると  $(C_2, \sigma^* \sim \sigma^{**})$  である. 同様に, fac 型は  $(C_3, \sigma^* \sim \sigma^{***})$  である. (図 1)



図 1  $ML_3L_3^b$  の mer 型(左), fac 型(右)

## 6. 今後の展望

今後は, 八面体分子構造に二座配位子がついた場合や, 十二面体分子構造についても点群を帰属したい.

### <参考文献>

[1] Alan Vincent (著), 「演習で理解する分子の対称と群論入門」, 丸善出版, 2012 年

お問い合わせ先  
氏名：酒井道宏  
E-mail：sakai@kurume-nct.ac.jp