情報処理センター 研究報告

The Bulletin of the Information Processing Center

第 33 号

(2012.3)

岡山理科大学

Okayama University of Science

岡山市北区理大町1-1 Tel(086)256-8485(直)

1.	教育用分子軌道計算システム eduDV の開発(3)	• • • • • • • • • • • • •	• • • • • • • • • • • • • • • • • • •		• • • • • •	•••••1
	理学部(七学科				坂根	弦太
2.	英語の読みにおける脳波[α波+θ波]積分値	の変化・	• • • • • • • • • • • • •	• • • • • • • • • • • • • • • • • • •			•••••33
	情報処理1	マンタ-	_		:	岩崎	彰典
	秋田県立大	大学総合	合科学教育研	开究センター		岡崎	弘信
	環太平洋ス	大学次†	世代教育学普	FIS .		木戸	和彦
	創価大学」	フール	ドランゲージ	ジセンター	;	福田	衣里
	環太平洋ス	大学教职	識センター			江原	智子
	倉敷市立料	青思高等	等学校			水野	純次
3.	考古地磁気学データベースとWebサービスの認)計••••	•••••			• • • • • •	•••••37
	情報処理も	こンター	_			畠山	唯達
4.	岡山オルガノンにおける大学連携による教育	の共有化	Ŀ– II ·····				•••••45
	情報処理も	こンター	-			竹内	渉
	岡山オルオ	<i>i</i> ノンナ	、学教育連携	隽センター		木村	宏
	岡山オルオ	<i>i</i> ノンナ	、学教育連携	隽センター		北村	光一
	岡山オルオ	<i>i</i> ノンナ	、学教育連携	隽センター		岡戸真	〔理子
	岡山オルス	<i>i</i> ノンナ	、学教育連携	隽センター		本田	絢也
5.	LMS「MOMOTARO」におけるeポート	、フォリ	才•••••	•••••			·····55
	総合情報研	F究科	修士課程	情報科学専攻		時岡	貴幸
	総合情報研	F究科	修士課程	情報科学専攻		大西	荘一
	総合情報研	F究科	修士課程	情報科学専攻		大倉	将人
	総合情報研	F究科	修士課程	情報科学専攻		久山	真宏
	総合情報研	F究科	修士課程	情報科学専攻		鈴木	陵平
	総合情報研	F究科	修士課程	情報科学専攻		高杉	祐太

目 次

教育用分子軌道計算システム eduDV の開発(3)

岡山理科大学 理学部 化学科 坂根弦太

gsakane@chem.ous.ac.jp

1. はじめに

日常生活の中で自動車を運転するのに,エンジンの部品の削り出し方法から組み立て方まで学んでか ら運転する人はほとんどいないであろう.大学の初年度で化学を学ぶのに,シュレディンガー方程式お よびその解法を学ぶことは意義のあることである.しかし,これまでに見たことのない記号や式を,数 学を使って解いていく方法を学んだとして,化学の本質であるさまざまな物質の電子状態の理解にまで, はたして学習はたどり着くであろうか.たいていは水素原子,H₂+,H₂分子の電子状態を学ぶところま でで,時間も気力も力尽きることが多い.習うことも慣れることも共に大事で,身近な分子の分子軌道 を自ら手を動かしてどんどん計算していく学習方法も,物質の電子状態の理解には必要であると考える.

そこで、限られた講義時間内で学生が、何の予備知識もなしに、いきなり周期表元素の原子軌道や、 教科書に掲載されている様々な分子の分子軌道を自ら計算して、原子・分子軌道のエネルギー準位を知 り、原子・分子軌道の三次元的な分布状況を確認することができる"教育用分子軌道計算システム eduDV" を開発[1],整備し[2],GUI での動作を実現[3·4],さらに開発を続け[5],最新版のプログラムー式[6]と マニュアル[7],および論文[8]を一般公開した.eduDV,および結晶構造,電子・核密度等の三次元デー タ可視化プログラム VESTA を含んだ "DV-Xa法のための統合支援環境" [4]は、eduDV[1·8],DV-Xa 法[9·11],秀丸エディタ[12],DV-Xa法計算支援環境[13],VESTA[14·15]から構成されており、教育・ 研究目的ではほぼ無償で(秀丸エディタのみシェアウェア,ただし金銭的に難儀している学生の方(学 校内設置のパソコンで学生の方が使用する場合もOK)には秀丸エディタフリー制度(アカデミックフ リー個人・アカデミックフリー団体)がある)全ての環境を構築することができる。岡山理科大学情報 処理センターの学生実習用パソコンの全てに eduDV,DV-Xa法,秀丸エディタ,DV-Xa法計算支援環 境,VESTA がインストールされており、基礎化学・無機・量子化学系の講義・実習で活用できる.

現在のところ,理学部化学科の1年次前期必修科目"コンピュータ入門 I"(担当:坂根,畠山),大学 院理学研究科化学専攻科目"錯体化学 II"(担当:坂根)でこの eduDV, VESTA を含んだ GUI ベースの "DV-Xα法のための統合支援環境"を利用している.

教育用分子軌道計算システム eduDV は、分子の形(点群)を選び、必要最低限の情報(分子を構成す る原子の原子番号、原子間距離、原子間角度)を会話形式で入力するのみで、DV-Xα分子軌道法プログ ラムを実行するのに必要な入力ファイル(F01, F25, F05)が準備され、マリケン・ポピュレーション・ アナリシスを使ったセルフ・コンシステントな方法(セルフ・コンシステント・チャージ法)で各原子 軌道の電子数がセルフ・コンシステントになるまで繰り返し計算が行われ、計算が収束したのち、各分 子軌道のエネルギー固有値の表(F08E)を出力し、引き続いてそれぞれの分子軌道が、どのような原子 軌道から構成されているかを調べるポピュレーション解析プログラム(POPANL)、各原子の有効電荷 (Net Charge)を求めるプログラム(NETC)、原子間の共有結合性の強さの目安となる有効共有結合電荷 (Bond Overlap Population)を計算するプログラム (BNDODR), F08E のそれぞれの分子軌道の成分を 図示するプログラム (LVLSHM), HOMO-LUMO 近傍の分子軌道間のエネルギー差 (単位:eV)を計 算して波数 (単位:cm⁻¹) および波長 (単位:nm) に変換するプログラム (HLGAPS), 全分子軌道お よび電子密度,静電ポテンシャルについて, VESTA で読めるデータファイルを作成するプログラム

(CONTRDALL) などの周辺プログラムが全自動で実行される.ユーザ(学生)は、あとは VESTA で 任意の分子軌道の波動関数等値曲面図、分子の中での電子の僅かな偏りが俯瞰できる静電ポテンシャル マップなどを三次元可視化して、自由に拡大・縮小、回転させながら手に取るように眺める事ができる.

化学の講義・実習に eduDV を用いる場合,まずは単原子(原子軌道)を取り扱い,量子数(主量子数, 方位量子数,磁気量子数)と軌道の三次元的形状を理解・記憶するところから始まり,二番目に水素分 子(H₂),窒素分子(N₂),酸素分子(O₂)などの等核二原子分子の分子軌道(D_{∞h}対称)を取り上げ,結合性 分子軌道と反結合性分子軌道の形状(位相)の違い,常磁性分子と反磁性分子の違い(スピン量子数) などを学習する.三番目に一酸化炭素分子(CO)などの異核二原子分子(C_{∞v}対称)を計算し,異なる原 子軌道(基底関数)の線形結合で形成される分子軌道の本質を学生は実感する.そのあとは身近な小分 子,例えばアセチレン分子(C₂H₂, D_{∞h}対称),水分子(H₂O, C_{2v}対称),アンモニア分子(NH₃, C_{3v}対 称),ベンゼン分子(C₆H₆, D_{6h}対称),メタン分子(CH₄, T_d対称),六フッ化ウラン分子(UF₆, O_h対称) などを次々と計算し,分子の形状,点群,分子軌道の多様性を知ることになる.

様々な分子の分子軌道を計算した際,多種多様な結合の比較が興味深い.水分子のO-H 結合,アンモ ニア分子のN-H 結合,メタン分子のC-H 結合などはいわゆる単結合,ベンゼン分子のC-C 結合は共役 系 1.5 重結合,アセチレン分子のC=C 結合は3 重結合などと呼ばれているが,それらは原子間の共有結 合性の強さの目安となる有効共有結合電荷(Bond Overlap Population)を計算するプログラム(BNDODR) の出力(BN8)を読みとることで結合の強さを比較検討できるし,さらに HOMO 近傍の電子占有分子軌道 の三次元的形状を VESTA で読みとることにより,より具体的に結合の正体を突き止める事ができる.限 られた講義・実習時間内で,身近な分子の電子状態を eduDV + DV-Xα法計算支援環境を GUI として DV-Xα法で計算し,計算結果(数値,三次元的な画像)を出力できることは教育的価値(効果)が高い.

化学の教科書で言われている単結合,共役系 1.5 重結合,二重結合,三重結合などは,通常,教科書で は定性的な図(結合性分子軌道の数と形状)で説明されているが,実際には例えば同じ単結合といえど も結合の強さは同一ではない.単結合を有する異なる分子をそれぞれ電子状態計算すれば,すべての有 効共有結合電荷が1.0となるわけではなく,例えば 0.65 であったり,0.72 であったりと,様々な程度の 有効共有結合電荷が算出され,結合の強さは具体的に比較検討できる.VESTA で結合性分子軌道を三次 元可視化し,その分子軌道が,どのような原子軌道から構成されているかを調べるポピュレーション解 析プログラム(POPANL)の出力(F08P)を読みとれば,結合の定量的な本質を見極める事ができる.

そうは言っても、単結合、共役系 1.5 重結合、二重結合、三重結合という定性的な分類は、化学結合の 分類としては有意である.それぞれの結合を有する身近で代表的な分子の電子状態を計算、その結合を 深く理解する事は教育的価値が高い.化学でこれらの結合の分類がもっとも多く出現するのは、有機化 学の炭素-炭素間結合であろう.炭素-炭素結合における単結合、共役系 1.5 重結合、二重結合、三重結 合を有する代表的な分子としては、単結合はエタン(C₂H₆, D_{3d} 対称)、共役系 1.5 重結合はベンゼン(C₆H₆, D_{6h} 対称)、二重結合はエチレン(C₂H₄, D_{2h} 対称)、三重結合はアセチレン(C₂H₂, D_{∞h} 対称)であり、これら が最も単純なものであろう.多くの有機化学・量子化学の教科書でもこれらの分子が取り扱われている. これまでの eduDV では、ベンゼン(C_6H_6 , D_{6h} 対称)、エチレン(C_2H_4 , D_{2h} 対称)、アセチレン(C_2H_2 , $D_{\infty h}$ 対称)は計算できていたものの、エタン(C_2H_6 , D_{3d} 対称)は計算できなかった.

そこで今年度は, eduDV で計算可能な分子形状の項目を一つ増やし(現在 21 種類であったものを 22 種類に拡張し), エタン (ねじれ型) に代表される A₂B₆ 型 (D_{3d} 対称)分子の計算を可能とするべく, Fortran 77 言語を用いてコーディングし,新たなソースコードを完成させた.その結果,炭素-炭素間 が単結合(エタン,ねじれ型), 1.5 重結合(ベンゼン),二重結合(エチレン),三重結合(アセチレン)の各分 子を講義で取り扱えるようになった.

2. 開発環境

情報処理センターより貸与されたノートパソコン(東芝 Dynabook SS 2010 DS86P/2, CPU: Mobile Intel Pentium III 866 MHz, RAM: 256 MB, OS: Windows 2000 Service Pack 4) に Open Watcom Fortran77 compiler (Version 1.9)[16]をインストールした環境を用いた.

3. ソースコード

エタンに代表される A₂B₆型 (D_{3d}対称)分子に関するソースコードとして、マニュアル(ステップバイ ステップ)実行版プログラム d3d26, ノンスピン全自動実行版プログラム d3d26n, スピン版全自動実行版 プログラム d3d26s の 3 本を作成したが,紙面の都合上,ここではノンスピン全自動実行版 d3d26n のみ 掲載する.

3-1. 【c:¥dvxa¥scat¥d3d26n.f】Fortran 77 ソースコード -+----1-----5------6------_____ c d3d26 (D3d symmetry, A2B6 type Molecule (e. g. C2H6), symOrb NON-SPIN version) С 2012.02.16 Version 1.0 Sakane, Genta С (Department of Chemistry, Okayama University of Science, Japan) С program d3d26 real*8 a (8, 3), b (8, 3), bohr, adis1, adis2, adis3, adis4, bdis1, bdis2, &bdis3, bdis4, pi, rad, dang1, dang2, rang1, rang2, two, thr, hf, sqt, hfsqt integer z(8), n(8)open (unit=07, form='formatted', status='unknown', access='sequential', file='d3d26n.out') & open (unit=08, form='formatted', status='unknown', access='sequential', file='f01') & bohr=0.5291772108 pi=3.1415926535 rad=180/pi write(*,1010) 10 write(*, 1020) read(*, *) z(1) if(z(1), le, 0) then write(*.1510) ---+----1----+----2----+----3-----+----4----+----5----+----6----+----7-write(*,1520) write(*,1530) go to 10 else go to 20 end if 20 if(z(1).gt.94) then write(*, 1510) write(*, 1520) write(*, 1530) go to 10 else go to 30 end if 30 write(*,1030) read (*, *) z (3) if(z(3). le. 0) then write(*,1510) write(*, 1520) write(*,1530) go to 30 else go to 40 end if 40 if(z(3).gt.94) then write(*, 1510) write(*,1520) write(*, 1530) go to 30 else go to 50 end if 50 write(*, 1040) read(*.*) adis1 write(*, 1050) read(*,*) adis2 60 write(*, 1060) read(*, *) dang1 if (dang1. le. 90) then write(*,1610) write(*, 1620) write(*, 1630) go to 60 else go to 70 end if 70 if (dang1.ge. 180) then -+----1----+----2----+----3----+----4----+----5----+----6----+----7--

-1----+-----2----+-----3-----+-----4-----+ -5------6----+-----7--write(*, 1610) write(*,1620) write(*, 1630) go to 60 else go to 80 end if 80 bdis1=adis1/bohr bdis2=adis2/bohr dang2=dang1-90 rang1=dang1/rad rang2=dang2/rad thr=3.0 two=2.0 hf=0.5 sat=sart(thr) hfsqt=hf*sqt adis3=adis2*sin(rang2) adis4=adis2*cos(rang2) bdis3=adis3/bohr bdis4=adis4/bohr z(2) = z(1)z(4) = z(3)z(5) = z(3)z(6) = z(3)z(7) = z(3)z(8) = z(3)n(1)=1n(2)=1n(3)=2n(4)=2n(5)=2n(6)=2n(7)=2n(8) = 2a(1, 1)=0.0 a (1, 2) = 0, 0 a(1,3)=adis1*hf a (2, 1) = 0.0 a (2, 2) = 0.0 a(2, 3) = -adis1*hfa (3, 1) = adis4 a (3, 2) = 0.0 a(3, 3) = (adis1*hf) + adis3a(4, 1) = -adis4*hfa(4, 2) = adis4 * hfsqta (4, 3) = (adis1*hf) + adis3 ---1-----5-----6----+ --7--

5

a(5,1)=-adis4*hf a (5, 2) =-adis4*hfsqt a(5, 3) = (adis1*hf) + adis3a(6, 1) = -adis4a(6, 2)=0, 0a(6,3) =- (adis1*hf) -adis3 a(7,1)=adis4*hf a(7,2)=adis4*hfsqt a(7, 3) = -(adis1*hf) - adis3a(8,1)=adis4*hf a(8, 2) = -adis4 + hfsqta (8, 3) =- (adis1*hf) -adis3 b(1, 1)=0.0b(1, 2)=0.0 b(1,3)=bdis1*hf b(2, 1)=0.0 b (2, 2) = 0.0 b(2, 3) = -bdis1*hfb(3, 1) = bdis4b (3, 2) = 0. 0 b(3, 3) = (bdis1*hf) + bdis3b(4.1)=-bdis4*hf b(4, 2) = bdis4 + hfsatb(4, 3) = (bdis1*hf) + bdis3b(5, 1) = -bdis4*hfb(5, 2) = -bdis4 + hfsqtb(5,3) = (bdis1*hf) + bdis3b(6, 1) = -bdis4b(6, 2) = 0.0b(6, 3) = -(bdis1*hf) - bdis3b(7.1)=bdis4*hf b(7, 2)=bdis4*hfsqt b(7, 3) = -(bdis1*hf) - bdis3b(8,1)=bdis4*hf b(8,2)=-bdis4*hfsqt b(8, 3) = -(bdis1*hf) - bdis3write(7.3010) write(7,3020) write(7,3030) do 101 i=1,8 write(7,1000) b(i,1), b(i,2), b(i,3), n(i) 101 continue write(8,2010) do 201 i=1,8 write(8,2020) z(i), n(i), a(i, 1), a(i, 2), a(i, 3) 201 continue write(8,2030) ----1-----5------6------7--

--5-----6----+----7--write(8,2040) write(8,2030) write(8,2050) write(8,2060) write(8.2070) write(8,2080) go to 204 202 write(*,1001) 203 write(*.1002) 204 stop 1000 format (3d20. 10, i5) 1001 format('*** Read Error ***') 1002 format('*** Data Not Found ***') 1010 format(/, '*** Program D3d26 (symOrb NON-SPIN version)', /, '*** for &A2B6 type molecule (e. g. C2H6)') 1020 format(/, 3x, Input Atomic Number(Z) (1 < Z < 94) of Central Atom A &, Z = ? ', \$) 1030 format(/, 3x, 'Input Atomic Number(Z) (1 < Z < 94) of Terminal Atom &B, Z = ? ', \$) 1040 format(/, 3x, 'Input Distance(angstrom), A - A = ? ', \$) 1050 format(/, 3x, 'Input Distance(angstrom), A - B = ? '.\$) 1060 format(/,3x,'Input Angle(degree)(90 deg. < Angle < 180 deg.), A-A-B = ?', \$)1510 format(//,' *** Error *** Atomic Number(Z) (1 < Z < 94) ***') 1520 format(' 1530 format(' 1610 format(//,' 1620 format(' *** Error *** A-A-B (90 deg. < Angle < 180 deg.)') 1630 format(' 2010 format(' | Z ||NEQ|| X || Y Ζ |') 2020 format(2x, i3, 1x, i4, 3(f10.5)) ___') 2030 format('--2040 format('|NEQ|| CHG ||U/D||RD VD 1') 2050 format(Unit (0:angstrom 1:atomic)') 0 2060 format(' (0:non-spin 1:spin)') 0 Spin 1∶Yes 2070 format(' M. P. (0:No)') 0 2080 format('20000 Sample Point (<100000, =0 autoset)') 8') 3010 format(' 3020 format(' 1') 1 1 1 1 1 1 1 2 0') 3030 format(' 1 1 1 1 0 2 end --+----1----+----2----+----3----+----4----+----5----+----6----+----7--3-2.【c:\#dvxa\#lscat\#d3d26n.bat】Open Watcom コンパイル実行ファイル(makefile) ----+-----1-----+-----2----+------3-----+

wfl386 /quiet /nowarnings d3d26n.f

3-3.	[c	¥dvx	ka¥data	¥d3d26】	対称軌道フ	アイル	(j	ミ 数型球面	調和関調	数の線形結合)
+- 15	a1g	z^{2}/z^{2}	2_D3d		-34-		-9-	+0-		/+0+
0		<u>6</u> .	000000	0	2 6.000000					
0		<u> </u>	000000	0	2 -6.000000					
202		<u>2</u> 1 6.	000000	0	2 6.000000					
3		2 6.	000000	3	2 -6.000000					
3 0		2 1 6.	000000	0	2 -6.000000					
0 0 0		2 2 2 2 2 2	I 000000 000000	0 0	4 2.000000 8 2.000000	0	5	2. 000000	0	6 2.000000
1 -1 1		3 2. 5 -1. 3 1.	000000 732051 000000	1 1 -1	4 -1.000000 6 -2.000000 8 -1.732051	-1 1	4 7	1.732051 1.000000	1 -1	5 -1.000000 7 1.732051
002	10	5 3 2. 7 -2.	I 000000 000000	0 0	4 2.000000 8 -2.000000	0	5	2. 000000	0	6 -2.000000
2 -2 2		3 2. 5 1. 3 -1.	000000 732051 000000	2 2 -2	4 -1.000000 6 2.000000 8 -1.732051	-2 2	4 7	-1. 732051 -1. 000000	2 -2	5 -1.000000 7 1.732051
2 1 -1 1		3 2. 5 -1. 3 -1.	000000 732051 000000	1 1 -1	4 -1.000000 6 2.000000 8 1.732051	-1 1	4 7	1.732051 -1.000000	1 -1	5 -1.000000 7 -1.732051
2 0 0		2. 2. 2. 2.	1 000000 000000	0 0	4 2.000000 8 2.000000	0	5	2. 000000	0	6 2.000000
3 3 3 2	10	2. 3 2. 7 -2.	1 000000 000000	3 3	4 2.000000 8 -2.000000	3	5	2. 000000	3	6 -2.000000
2 -2 2		3 2. 5 1. 3 1.	000000 732051 000000	2 2 -2	4 -1.000000 6 -2.000000 8 1.732051	-2 2	4 7	-1.732051 1.000000	2 -2	5 -1.000000 7 -1.732051
3 1 -1 1		3 2. 5 -1. 3 1.	000000 732051 000000	1 1 -1	4 -1.000000 6 -2.000000 8 -1.732051	-1 1	4 7	1. 732051 1. 000000	1 -1	5 -1.000000 7 1.732051
3 0 0 7	a20	5 3 2. 7 -2.	000000 000000	0 0	4 2.000000 8 -2.000000	0	5	2. 000000	0	6 -2.000000
, -3 1	1	2 1 6.	1 000000 1	-3	2 -6.000000					
-1 -1 1		3 2. 5 -1. 3 1.	000000 000000 732051	1 -1 -1	4 -1.732051 6 -2.00000 8 1.000000	-1 1	4 7	-1. 000000 -1. 732051	1 -1	5 1.732051 7 1.000000
∠ ++-	1	, 1	-+2-	+	-34	+	-5-	6-	+	7+8+

+	12	+_	3+4	+	56-	+	7+8+
-1 -1 1 2 1	3 2.000000 5 -1.000000 8 -1.732051	1 -1 -1	4 -1.732051 6 2.000000 8 -1.000000	-1 1	4 -1.000000 7 1.732051	1 -1	5 1.732051 7 -1.000000
-2 -2 2	3 2.000000 5 -1.000000 8 1.732051	2 -2 -2	4 1.732051 6 2.000000 8 -1.000000	-2 2	4 -1.000000 7 -1.732051	2 -2	5 -1.732051 7 -1.000000
-1 -1 1	3 2.000000 5 -1.000000 8 1.732051	1 -1 -1	4 -1.732051 6 -2.000000 8 1.000000	-1 1	4 -1.000000 7 -1.732051	1 -1	5 1.732051 7 1.000000
-2 -2 2	3 2.000000 5 -1.000000 8 -1.732051	2 -2 -2	4 1.732051 6 -2.000000 8 1.000000	-2 2	4 -1.000000 7 1.732051	2 -2	5 -1.732051 7 1.000000
-3 -3 7 a1u	6 3 2.000000 7 -2.000000	-3 -3	4 2.000000 8 -2.000000	-3	5 2.000000	-3	6 -2.000000
3 -3	2 1 1 6.000000	-3	2 6.000000				
-1 -1 1	0 1 3 2.000000 5 -1.000000 8 -1.732051	1 -1 -1	4 -1.732051 6 2.000000 8 -1.000000	-1 1	4 -1.000000 7 1.732051	1 -1	5 1.732051 7 -1.000000
2 I -1 -1 1	3 2.000000 5 -1.000000 8 1.732051	1 -1 -1	4 -1.732051 6 -2.000000 8 1.000000	-1 1	4 -1.000000 7 -1.732051	1 -1	5 1.732051 7 1.000000
-2 -2 -2 2	0 1 3 2.000000 5 -1.000000 8 -1.732051	2 -2 -2	4 1.732051 6 -2.000000 8 1.000000	-2 2	4 -1.000000 7 1.732051	2 -2	5 -1.732051 7 1.000000
3 -1 -1 1	0 1 3 2.000000 5 -1.000000 8 -1.732051	1 -1 -1	4 -1.732051 6 2.000000 8 -1.000000	-1 1	4 -1.000000 7 1.732051	1 -1	5 1.732051 7 -1.000000
-2 -2 2	0 1 3 2.000000 5 -1.000000 8 1.732051	2 -2 -2	4 1.732051 6 2.000000 8 -1.000000	-2 2	4 -1.000000 7 -1.732051	2 -2	5 -1.732051 7 -1.000000
-3 -3 15 a2u	6 3 2.000000 7 2.000000 /z	-3 -3	4 2.000000 8 2.000000	-3	5 2.000000	-3	6 2.000000
0 0	2 1 1 6.000000	0	2 -6.000000				
0	2 I 1 6.000000	0	2 6.000000				
0	1 6.000000 2 1	0	2 -6.000000				
3 3	1 6. 000000 2 1	3	2 6.000000				
0 0	1 6.000000 6 1	0	2 6.000000				
+	12	+-		+	6-	+	7+8+

+-	12-	+		+	6	+_	7+8+
0 0 1	$\begin{array}{c} 3 & 2.000000 \\ 7 & -2.000000 \\ 10 & 1 \end{array}$	0 0	4 2.000000 8 -2.000000	0	5 2.000000	0	6 -2.000000
1 -1 1	3 2.000000 5 -1.732051 8 -1.000000	1 1 -1	4 -1.000000 6 2.000000 8 1.732051	-1 1	4 1.732051 7 -1.000000	1 -1	5 -1.000000 7 -1.732051
0	3 2.000000 7 2.000000	0 0	4 2.000000 8 2.000000	0	5 2.000000	0	6 2.000000
2 -2 2	3 2.000000 5 1.732051 8 1.000000	2 2 -2	4 -1.000000 6 -2.000000 8 1.732051	-2 2	4 -1.732051 7 1.000000	2 -2	5 -1.000000 7 -1.732051
2 1 -1 1	3 2.000000 5 -1.732051 8 1.000000	1 1 -1	4 -1.000000 6 -2.000000 8 -1.732051	-1 1	4 1.732051 7 1.000000	1 -1	5 -1.000000 7 1.732051
2 0 0 2	6 1 3 2.000000 7 -2.000000	0 0	4 2.000000 8 -2.000000	0	5 2.000000	0	6 -2.000000
333	3 2.000000 7 2.000000	3 3	4 2.000000 8 2.000000	3	5 2.000000	3	6 2.000000
2 -2 2 3	3 2.000000 5 1.732051 8 -1.000000	2 2 -2	4 -1.000000 6 2.000000 8 -1.732051	-2 2	4 -1.732051 7 -1.000000	2 -2	5 -1.000000 7 1.732051
1 -1 1	3 2.000000 5 -1.732051 8 -1.000000	1 1 -1	4 -1.000000 6 2.000000 8 1.732051	-1 1	4 1.732051 7 -1.000000	1 -1	5 -1.000000 7 -1.732051
0 0 21	3 2.000000 7 2.000000 eg /xz	0 0	4 2.000000 8 2.000000	0	5 2.000000	0	6 2.000000
1	2 I 1 6.000000	1	2 -6.000000				
2	2 I 1 6.000000	2	2 6.000000				
1	1 6.000000 2 1	1	2 6.000000				
2	1 6.000000 2 1	2	2 -6.000000				
1	1 6. 000000 6 1	1	2 -6.000000				
0 0 1	3 4.000000 7 -2.000000	0 0	4 -2.000000 8 -2.000000	0	5 -2.000000	0	6 4.000000
1 -1 1	3 4.000000 5 1.732051 8 -1.000000	1 1 -1	4 1.000000 6 -4.000000 8 1.732051	-1 1	4 -1.732051 7 -1.000000	1 -1	5 1.000000 7 -1.732051
0 0 1	3 4.000000 7 2.000000 8 1	0 0	4 -2.000000 8 2.000000	0	5 -2.000000	0	6 -4.000000
+-	12-	+		+	6	+	7+8+

+ 1 1		+ -1 -1	34 4 1. 732051 7 1. 732051	+ 1 1	56 5 3.000000 8 -3.000000	+ -1 -1	7+8+ 5 -1.732051 8 -1.732051
2 -2 2	10 1 3 4.000000 5 -1.732051 8 1.000000	2 2 -2	4 1.000000 6 4.000000 8 1.732051	-2 2	4 1.732051 7 1.000000	2 -2	5 1.000000 7 -1.732051
2 1 -1 1	10 1 3 4.000000 5 1.732051 8 1.000000	1 1 -1	4 1.000000 6 4.000000 8 -1.732051	-1 1	4 -1.732051 7 1.000000	1 -1	5 1.000000 7 1.732051
2 0 0	6 1 3 4.000000 7 -2.000000	0 0	4 -2.000000 8 -2.000000	0	5 -2.000000	0	6 4.000000
2 1 1	8 1 4 3.000000 7 3.000000	-1 -1	4 1. 732051 7 -1. 732051	1 1	5 3.000000 8 3.000000	-1 -1	5 -1.732051 8 1.732051
2 2 2	8 4 -3.000000 7 -3.000000	-2 -2	4 1. 732051 7 -1. 732051	2 2	5 -3.000000 8 -3.000000	-2 -2	5 -1.732051 8 1.732051
3 3 3	6 1 3 4.000000 7 2.000000	3 3	4 -2.000000 8 2.000000	3	5 -2.000000	3	6 -4.000000
3 2 -2 2	$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	2 2 -2	4 1.000000 6 -4.000000 8 -1.732051	-2 2	4 1.732051 7 -1.000000	2 -2	5 1.000000 7 1.732051
3 1 -1 1	3 4.000000 5 1.732051 8 -1.000000	1 1 -1	4 1.000000 6 -4.000000 8 1.732051	-1 1	4 -1.732051 7 -1.000000	1 -1	5 1.000000 7 -1.732051
3 0 0	6 1 3 4.000000 7 2.000000	0 0	4 -2.000000 8 2.000000	0	5 -2.000000	0	6 -4.000000
3 1 1 2	4 3.000000 7 -3.000000	-1 -1	4 1. 732051 7 1. 732051	1 1	5 3.000000 8 -3.000000	-1 -1	5 -1.732051 8 -1.732051
3 2 2 2	4 -3.000000 7 3.000000	-2 -2	4 1. 732051 7 1. 732051	2 2	5 -3.000000 8 3.000000	-2 -2	5 -1.732051 8 -1.732051
-3 21	4 -3.464102 eg /yz	-3	5 3.464102	-3	7 -3. 464102	-3	8 3.464102
 -1 2	2 I 1 6.000000 2 1	-1	2 -6.000000				
-2	$\begin{array}{c} 2 \\ 1 \\ 2 \end{array} - 6. \begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array}$	-2	2 -6.000000				
-1	1 6. 000000 2 1	-1	2 6.000000				
-2 3	$ \begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ $	-2	2 6.000000				
-1 0	1 6. 000000 4 1	-1	2 -6.000000				
0 1	4 3.464102 8 1	0	5 -3.464102	0	7 -3.464102	0	8 3.464102
1	4 -1.732051 12	-1 +	4 3.000000	1	5 1.732051 5+6	-1 +	5 3.000000

+	12	+-		+		+	78+
1	7 –1. 732051 4 1	-1	7 -3.000000	1	8 1.732051	-1	8 -3.000000
0	4 3.464102	0	5 -3. 464102	0	7 3.464102	0	8 -3. 464102
-1 -1 1	3 4.000000 5 1.000000 8 -1.732051	1 -1 -1	4 1.732051 6 -4.000000 8 -1.000000	-1 1	4 1.000000 7 1.732051	1 -1	5 -1.732051 7 -1.000000
2 2 2 2	4 –1. 732051 7 1. 732051 8 1	-2 -2	4 -3.000000 7 -3.000000	2 2	5 1.732051 8 -1.732051	-2 -2	5 -3.000000 8 -3.000000
1	4 -1. 732051 7 1. 732051	-1 -1	4 3.000000 7 3.000000	1 1	5 1.732051 8 -1.732051	-1 -1	5 3.000000 8 3.000000
2 0	4 3. 464102	0	5 -3.464102	0	7 -3. 464102	0	8 3.464102
2 I -1 -1 1 2 1	0 1 3 4.000000 5 1.000000 8 1.732051	1 -1 -1	4 1.732051 6 4.000000 8 1.000000	-1 1	4 1.000000 7 -1.732051	1 -1	5 -1.732051 7 1.000000
-2 -2 2 2	3 4.000000 5 1.000000 8 -1.732051	2 -2 -2	4 -1.732051 6 4.000000 8 1.000000	-2 2	4 1.000000 7 1.732051	2 -2	5 1.732051 7 1.000000
3	4 3. 464102	3	5 -3.464102	3	7 3. 464102	3	8 -3. 464102
3 2 2 2	4 –1. 732051 7 –1. 732051	-2 -2	4 -3.000000 7 3.000000	2 2	5 1. 732051 8 1. 732051	-2 -2	5 -3.000000 8 3.000000
3 1 1 2	6 -1. 732051 7 -1. 732051	-1 -1	4 3.000000 7 -3.000000	1 1	5 1. 732051 8 1. 732051	-1 -1	5 3.000000 8 -3.000000
0	4 3.464102	0	5 -3.464102	0	7 3.464102	0	8 -3. 464102
-1 -1 1 2 1	3 4.000000 5 1.000000 8 -1.732051	1 -1 -1	4 1.732051 6 -4.000000 8 -1.000000	-1 1	4 1.000000 7 1.732051	1 -1	5 -1.732051 7 -1.000000
-2 -2 2	3 4.000000 5 1.000000 8 1.732051	2 -2 -2	4 -1.732051 6 -4.000000 8 -1.000000	-2 2	4 1.000000 7 -1.732051	2 -2	5 1.732051 7 -1.000000
-3 -3 21 eu	6 1 3 4.000000 7 2.000000 /y	-3 -3	4 -2.000000 8 2.000000	-3	5 -2.000000	-3	6 -4. 000000
1 -1	2 1 1 -6. 000000	-1	2 -6.000000				
2 -2	2 1 1 6.000000	-2	2 -6.000000				
2 -1	2 1 1 -6. 000000	-1	2 6.000000				
-2	2 1 1 6.000000	-2	2 6.000000				
-1	2 1 1 -6. 000000	-1	2 -6.000000				
U +	4 I 12	+-	34	+		+	78+

	12	+	3+4	+	5+6	+	7+8+
1 8	4 -3.404102 3 1	0	5 3.404102	0	7 -3. 404102	0	o 3. 40410Z
	4 1.732051 7 -1.732051	-1 -1	4 -3.000000 7 -3.000000	1 1	5 -1.732051 8 1.732051	-1 -1	5 -3.000000 8 -3.000000
0 4	4 -3. 464102	0	5 3.464102	0	7 3.464102	0	8 -3.464102
	4. 000000 5 1. 000000 3 1. 732051	1 -1 -1	4 1.732051 6 4.000000 8 1.000000	-1 1	4 1.000000 7 -1.732051	1 -1	5 -1.732051 7 1.000000
	4 1. 732051 7 1. 732051	-2 -2	4 3.000000 7 -3.000000	2 2	5 -1.732051 8 -1.732051	-2 -2	5 3.000000 8 -3.000000
	4 1. 732051 7 1. 732051	-1 -1	$\begin{array}{ccc} 4 & -3.\ 000000 \\ 7 & 3.\ 000000 \end{array}$	1 1	5 -1.732051 8 -1.732051	-1 -1	5 -3.000000 8 3.000000
	4 -3. 464102	0	5 3.464102	0	7 -3. 464102	0	8 3. 464102
2 10 -1 3 -1 4 1 8	3 4.000000 5 1.000000 8 -1.732051	1 -1 -1	4 1.732051 6 -4.000000 8 -1.000000	-1 1	4 1.000000 7 1.732051	1 -1	5 -1.732051 7 -1.000000
-2 -2 -2 -2 -2 -2 -2 -2	3 4.000000 5 1.000000 3 1.732051	2 -2 -2	4 -1.732051 6 -4.000000 8 -1.000000	-2 2	4 1.000000 7 -1.732051	2 -2	5 1.732051 7 -1.000000
3 4	4 -3. 464102	3	5 3.464102	3	7 3. 464102	3	8 -3. 464102
	4 1. 732051 7 -1. 732051	-2 -2	4 3.000000 7 3.000000	2 2	5 -1.732051 8 1.732051	-2 -2	5 3.000000 8 3.000000
	4 1.732051 7 -1.732051	-1 -1	4 -3.000000 7 -3.000000	1 1	5 -1.732051 8 1.732051	-1 -1	5 -3.000000 8 -3.000000
	4 -3. 464102	0	5 3.464102	0	7 3. 464102	0	8 -3. 464102
-1 (-1 (1 (1 (3 4.000000 5 1.000000 8 1.732051	1 -1 -1	4 1.732051 6 4.000000 8 1.000000	-1 1	4 1.000000 7 -1.732051	1 -1	5 -1.732051 7 1.000000
-2 -2 -2 -2 -2 -2 -2 -2	3 4.000000 5 1.000000 3 -1.732051	2 -2 -2	4 -1.732051 6 4.000000 8 1.000000	-2 2	4 1.000000 7 1.732051	2 -2	5 1.732051 7 1.000000
-3 -3 21 eu	3 4.000000 7 -2.000000	-3 -3	4 -2.000000 8 -2.000000	-3	5 -2.000000	-3	6 4. 000000
1 2	2 1	1	2 6 000000				
2 2	2 1	י ס	2 _6 000000				
2 2	2 1	۲					
3	1 6.000000 2 1		2 -6.000000				
2	1 6. 000000 1+2	2 +	2 6. 000000 3+4-	+	5+6	+	78+

+	1	+	3-	4_	+	5+	6+-	7+8+
3	2 1 1 6.000000	1	2	6. 000000	·	0		,
000	3 4.000000 7 2.000000	0 0	4 8	-2. 000000 2. 000000	0	5 -2.00000	0 0	6 -4.000000
1 -1 1	10 1 3 4.000000 5 1.732051 8 1.000000	1 1 -1	4 6 8	1. 000000 4. 000000 -1. 732051	-1 1	4 -1.73205 7 1.00000	1 1 0 -1	5 1.000000 7 1.732051
0	3 4.000000 7 -2.000000	0 0	4 8	-2. 000000 -2. 000000	0	5 -2.00000	0 0	6 4.000000
1 1 0	4 -3.000000 7 -3.000000	-1 -1	4 7	-1. 732051 1. 732051	1 1	5 -3.00000 8 -3.00000	0 -1 0 -1	5 1.732051 8 -1.732051
2 -2 2 2	$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	2 2 -2	4 6 8	1. 000000 -4. 000000 -1. 732051	-2 2	4 1.73205 7 -1.00000	1 2 0 -2	5 1.000000 7 1.732051
1 -1 1 2	3 4.000000 5 1.732051 8 -1.000000	1 1 -1	4 6 8	1. 000000 -4. 000000 1. 732051	-1 1	4 -1.73205 7 -1.00000	1 1 0 -1	5 1.000000 7 -1.732051
2 0 0	3 4.000000 7 2.000000	0 0	4 8	-2. 000000 2. 000000	0	5 -2.00000	0 0	6 -4.000000
2 1 1	4 -3. 000000 7 3. 000000	-1 -1	4 7	-1. 732051 -1. 732051	1 1	5 -3.00000 8 3.00000	0 -1 0 -1	5 1. 732051 8 1. 732051
2 2 2	8 1 4 3.000000 7 -3.000000	-2 -2	4 7	-1. 732051 -1. 732051	2 2	5 3.00000 8 -3.00000	0 -2 0 -2	5 1. 732051 8 1. 732051
3 3 3	⁶ 4. 000000 7 -2. 000000	3 3	4 8	-2. 000000 -2. 000000	3	5 -2.00000	0 3	6 4.000000
3 2 -2 2	$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	2 2 -2	4 6 8	1. 000000 4. 000000 1. 732051	-2 2	4 1.73205 7 1.00000	1 2 0 -2	5 1.000000 7 -1.732051
3 1 -1 1 3	3 4.000000 5 1.732051 8 1.000000	1 1 -1	4 6 8	1. 000000 4. 000000 -1. 732051	-1 1	4 -1.73205 7 1.00000	1 1 0 -1	5 1.000000 7 1.732051
0	3 4.000000 7 -2.000000	0 0	4 8	-2. 000000 -2. 000000	0	5 -2.00000	0 0	6 4.000000
3 1 1	$\begin{array}{c} 8 \\ 4 \\ -3.000000 \\ 7 \\ -3.000000 \end{array}$	-1 -1	4 7	-1. 732051 1. 732051	1 1	5 -3.00000 8 -3.00000	0 -1 0 -1	5 1.732051 8 -1.732051
3 2 2	4 3.000000 7 3.000000	-2 -2	4 7	-1. 732051 1. 732051	2 2	5 3.00000 8 3.00000	0 -2 0 -2	5 1.732051 8 -1.732051
3 -3	4 1 4 3. 464102	-3	5	-3. 464102	-3	7 -3.46410	2 –3	8 3. 464102
+	symOrb v2.3	d +	3	/_		5+	6+-	78+
	· · Z		0	· +		0		,

--+---6----+---7---+--8--+ 3 -5--1-Δ. -+-** Nsym, Isyml, Jsyml ** 8 1 2 1 2 1 1 1 1 1 1 0 1 1 1 0 1 with angular momentum= $\{\{0, 3\}, \{0, 3\}\}$ D3d Number of atoms= 8 Equivalent atoms a02 a01 a04 a03 a05 a06 a07 a08 Positions of atoms Hold[0, 76755] 0 0 1 0 0 -Hold[0.76755] 2 Hold[1.02017] Hold[1.16263] 0 3 -Hold[1.02017] Sqrt[3] Hold[1.02017] 2 2 Hold[1.16263] 4 -Hold[1.02017] -(Sart[3] Hold[1.02017]) 2 2 Hold[1.16263] 5 -Hold[1.02017] 0 -Hold[1.16263] 6 Hold[1.02017] Sqrt[3] Hold[1.02017] 2 2 -Hold[1.16263] 7 -(Sqrt[3] Hold[1.02017]) Hold[1.02017] 2 2 -Hold[1.16263] 8 D3d Positions of atoms 8 0.000000000 0.000000000 0.7675500000 1 1 0.000000000 0.000000000 -0.7675500000 2 1 3 1.0201700000 0.000000000 1.1626300000 2 2 4 -0.51008500000.8834931362 1.1626300000 2 5 -0.5100850000-0.8834931362 1.1626300000 -1.02017000000.000000000 2 6 -1.16263000002 7 0.5100850000 0.8834931362 -1.16263000002 0.5100850000 -0.8834931362 8 -1.1626300000-2 Λ .5 3-4. 【c:¥dvxa¥exec¥d3d26n.bat】プログラム全自動実行バッチファイル @echo off if exist f01 goto err1

if exist f25 goto err2 %dvdir%¥object¥d3d26n.exe copy %dvdir%¥data¥d3d26 f25 call %dvdir%¥exec¥makef05scfs call %dvdir%¥exec¥existf05 if exist FO5exist.txt goto fexist goto err3 fexist del F05exist.txt goto scatrun ∶scatrun call %dvdir%¥exec¥dvscat if exist converge bat goto del1 goto cont1 :del1 del converge.bat goto cont1 :cont1 if exist convd.txt goto del2 goto cont2 :del2 del convd.txt goto cont2 :cont2 if exist notconv.txt goto del3 goto cont3 :del3 del notconv.txt goto cont3 :cont3 call %dvdir%¥exec¥cnvchk150 call converge.bat if exist convd.txt goto cont4 if exist notconv.txt goto cont4 del converge.bat goto scatrun :cont4 del converge.bat call %dvdir%¥exec¥contrdall dir/w *.sca call %dvdir%¥exec¥netc call %dvdir%¥exec¥bndodr call %dvdir%¥exec¥popanls rename F08P F08P S call %dvdir%¥exec¥popanl call %dvdir%¥exec¥atlist >atlist.out call %dvdir%¥exec¥bllist >bllist.out

```
call %dvdir%¥exec¥prests
call %dvdir%¥exec¥wavnum <%dvdir%¥data¥zero
call %dvdir%¥exec¥makel04 <%dvdir%¥data¥three
call %dvdir%¥exec¥lvlshm
call %dvdir%¥exec¥hlgap
call %dvdir%¥exec¥hlgaps
type i08
type f08e
if exist notconv.txt goto notconv
del convd.txt
goto end
:notconv
echo:
echo *** WARNING ** WARNING ** WARNING ** WARNING ** WARNING ***
echo *** SCAT (NonSpin version) has not been converged vet. ***
echo *** WARNING ** WARNING ** WARNING ** WARNING ** WARNING ***
del notconv.txt
goto end
:err1
echo ***ERROR*** f01 already exist
goto end
∶err2
echo ***ERROR*** f25 already exist
goto end
∶err3
echo ***ERROR*** F05 not exist
goto end
: end
3-5. 【c:\#dvxa\#Macros\#eduDV.mac】eduDV メニュー秀丸エディタマクロ
menu
″01.D∞h 対称【等核二原子分子】A2 型分子(H2,02,N2 など)...″.
″02. C∞v 対称【異核二原子分子】AB 型分子(一酸化炭素や塩化水素など)...″,
"03.D∞h 対称【直線 AB2 型分子】B-A-B 型分子 (二酸化炭素など)...",
"04. D∞h 対称【直線 A2B2 型分子】B-A-A-B 型分子(アセチレンなど)...
"05. C∞v 対称【直線 ABC 型分子】A-B-C 型分子(シアン化水素など)...'
″06.C∞v 対称【直線 ABCD 型分子】A-B-C-D 型分子 (HCNO など)....'
"07. C2v 対称 【折れ線 AB2 型分子】AB2 型分子(水や硫化水素など)...",
"08. C3v 対称 【三角錐 AB3 型分子】AB3 型分子(アンモニアなど)...",
"09. D2h 対称 【エチレン型分子】A2B4 型分子(エチレンなど)...",
"10. D3d 対称 【エタン型分子】A2B6 型分子(エタンなど)...",
```

+	1	++-	3+	4+		-67
″11	D3h 対称	【平面正三角	形型分子】A	B3 型分子(=	フッ化ホウ	素など) ″
<i>"</i> 12	D/h 动称	【亚面正四角	形型分子】A	BU 型労了、二 BU 刑ಆイオ、	$([P+C]/1])_{-}$	-たど) ″
1Z. ″10	D411 入1 小小 D66 六十千ケ	【十回正四円	ルモガナ』へ	D4 空始1 ク・ CDC 刑(人マ ()	ノ ([1 L0 14] Z ジ ヽ 、 エ゙ヽ , ナ> ば	$\mathcal{A} \subset \mathcal{I} \ldots$
۱۵. ″۱۸		【半面正八角	形空ガナ』A	0D0 空方子 (1	>ノゼノなど	(), =
14.	Id 对称	【止凹面体型	分子】 AB4 型	分子(メタン	や四塩化炭素	素など),
<i>"</i> 15.	0h 対称	【正八面体型	分子】AB6 型	分子 (六フッ	化硫黄など)	,
<i>"</i> 16.	Td 対称	【正四面体型	分子】[A(BC)4]型錯体([Ni (CO) 4] なと	<u>·</u>)",
<i>"</i> 17.	0h 対称	【正八面体型	分子】「A(BC)6]型錯体([Cr(CO)61なと	·) //
″18	D2h 対称	【正八面休型	1 [M(H20)6]	/ *] <u></u> (] へ [n+アクア結イ	$' \pm 2$	_,,
″10.	ていたな	【正四面休刑	M(1) = M(1) + M(1)	or $[M(L)]$	りょう。 n_ 強イオン	"
"00	TU 入小小 Ob 六十千ケ	【工口面仲主		$O[[M](L)] \rightarrow [M](L) $	「」」「コン」	· · · · , //
ZU.		【止八山神空	】 [IVI (L/0][I+ ᡔᆂݖᆇᇛᆇ <i>ᆂ</i>		に頭イオノ	· · · · , - <i>''</i>
ZI.	対称なし	【単原子】原	ナ 朝 退 関 叙 を	見るとさなる	とに便利です	· · · · ,
<i>"</i> 22.	対称なし	【単原子イオ	ン】原子軌道	[関数を見る。	ときなどに使	」利です″,
,						
if(re	esult==1)e	xecmacro ma	crodir + "¥	éeduDV¥¥a2me	enu.mac";	
else	if(result	==2) execmaci	o macrodir	+ "¥¥eduDV¥	¥abmenu mac	
	if (result		o macrodir	+ $^{\prime\prime}$ ¥¥eduDV¥	¥ah?menu ma	~ /
	if (rooult		o macrodir		Yoghgmanu n	10 , 200 ^{″′}
else					™TAZUZIIIUUUUUUUUUUUUUUUUUUUUUUUUUUUUUUUU	
eise	IT (result		ro macrodir	+ ¥¥eauDV¥	**apcmenu. ma	1C ,
else	it(result	==6) execmac	o macrodir	+ ¥¥eduDV¥	¥abcdmenu. n	
else	if(result	==7) execmac	o macrodir	+ "¥¥eduDV¥	¥c2v12menu.	mac";
else	if(result	==8) execmac	o macrodir	+ "¥¥eduDV¥	¥c3v13menu.	mac";
else	if(result	==9) execmac	o macrodir	+ "¥¥eduDV¥	¥d2h24menu	mac":
else	if (result	==10) execma	ro macrodir	+ "¥¥eduDV	¥¥d3d26meni	
	if (result	11) execution	ro macrodin	+ "¥¥aduDW	YYYd?h1?moni	
	if (result		sio macrouii	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	/VVd/b1/map	
erse						
eise	IT (result		cro macrodin	· + ¥¥eduDV	**abnbbmenu	I. mac ,
else	if (result	==14) execma	cro macrodir	+ ¥¥eduDV	¥¥tdl4menu.	mac;
else	if(result	==15) execma	cro macrodin	· + ″¥¥eduDV	Y¥¥oh16menu.	mac";
else	if(result	==16) execma	cro macrodir	· + "¥¥eduDV	′¥¥td144menι	ı.mac″;
else	if(result	==17) execma	cro macrodin	· + "¥¥eduDV	Y¥¥oh166menu	ı.mac";
else	if(result	==18) execma	ero macrodir	· + ″¥¥eduDV	¥¥mh2o6meni	∟mac″:
else	if (result	==10) execmat	ro macrodir	· + ″¥¥eduDV	¥¥ml4menu n	nac"
	if (rocult	-20 avorage	ro maorodin	· + "YYoduDV	VYYml6monu.n	100 ; 100" ;
					/++IIII 0III⊂IIU. II /// o+ommolou	
erse	II (result		cro macrodin		**alommenu.	mac,
else	IT (result	==22) execma	cro macrodir	· + ¥¥eduDV	¥¥ionmenu. n	iac,
,						
+	1	++-	3+	4+	5+	-67
3-6.	【c∶¥dvxa	¥Macros¥edul)V¥d3d26menı	ı.mac】d3d26	ミメニュー秀	丸エディタマクロ
4	1	+2+-	3+	4+		-67
menu	″d3d26n (ノンスピン版	· 全自動実	〒) "		
″d3d2	?6s (スピ`	っ版・全白動		3,,		
"d2d2	(F01.)	- MK エロ助: F95 作式のユ	() $(')$			
	(101 - 1)	1 20 TFJ火UJの	/, xadir / "\/\	/~~~D//// ~~~~	Go maa":	
	;5uit1)e		FIUUII + ¥			
eise	IT (result		o macrodir	+ ¥¥eduDV¥	+aJaZbS. mac	,
else	it(result	==3) execmac	o macrodir	+ [°] ¥¥eduDV¥	¥d3d26. mac"	,
4	1	+2+-	3+	4+		-67

3-7. 【c:\#dvxa\#Macros\#eduDV\#d3d26n.mac】ノンスピン全自動秀丸エディタマクロ loaddll hidemarudir + "¥¥DengakuDLL.dll"; // 田楽 DLL のロード if (!result) { message "DengakuDLL.dll をロードできませんでした。"; endmacro; \$path_dvdir = getenv("dvdir"); \$dirname = "d3d26n_" + year + month + day + hour + minute + second; if (!dllfunc("MKDIR", "/p" + \$path_dvdir + "¥¥CALC¥¥" + \$dirname)) { message "新規フォルダの作成に失敗しました。"; endmacro; } if (!dllfunc("SETCURDIR", \$path_dvdir + "¥¥CALC¥¥" + \$dirname)) { message "新規フォルダに移動できませんでした。" endmacro; } . runsync2 \$path_dvdir + "¥¥EXEC¥¥D3D26N.BAT"; // 分子軌道計算システム eduDV の D3D26N. BAT の実行 openfile "F01"; readonlyopenfile "F06Z"; readonlyopenfile "BN8" readonlyopenfile "IO8"; readonlyopenfile "F08P"; readonlyopenfile "F08P_S"; readonlyopenfile "F08E.hlgaps"; readonlyopenfile "F08E"; endmacro:

4. コンパイル

Windows のコマンドプロンプト画面で

C:¥dvxa>setdvxa.bat [Enter] (C:¥dvxa>setdvxa [Enter]と打ち込んでも同じ)

C:¥dvxa>makedv d3d26 [Enter]

C:¥dvxa>makedv d3d26n [Enter]

C:¥dvxa>makedv d3d26s [Enter]

と打ち込めば, Open Watcom Fortran77 Version 1.9 コンパイラーによるコンパイル作業が終了し,

C:\#dvxa\#object\#d3d26.exe

C:¥dvxa¥object¥d3d26n.exe

C:\dvxa\object\d3d26s.exe

ができあがる.

			<u> – – ×</u>
		Cap	s 1:1
NETC	BNDODR	WAVNUM	eduDV
9	0	, 100, , , ,	<u>, , 11⊨≪</u> ≣
	図1.【	eduDV】ボ	

5. 使用方法(例:エタン分子の電子状態計算)

① "DV-Xa法のための統合支援環境" [4]が構築されている Windows パソコンにて、秀丸エディタを立 ち上げる. なお、本学の学生実習用パソコンは起動するたびにハードディスク内容が初期状態に戻るの で、秀丸エディタを他用途で使う場合を想定し、DV-Xa法計算支援環境の C:¥dvxa ¥Macros¥SCAT.reg を秀丸エディタで読み込む作業は毎回行う必要がある. 秀丸エディタのその他(<u>O</u>)→設定内容の保存/復元 (<u>U</u>)...で SCAT.reg を読み込むと、教育用分子軌道計算システム eduDV が実行できる状態になる.

②秀丸エディタの上右端のボタン【eduDV...】(図1)をクリックすると、22 項目のプルダウンメニュー(図2)が現れる.
 10. D_{3d}対称【エタン型分子】A₂B₆型分子(エタンなど)...】を選択する.

01. D∞h対称【等核二原子分子】A2型分子(H2, O2, N2など)…
- 02. C∞v対称【異核二原子分子】AB型分子(一酸化炭素や塩化水素など)…
-03 .D∞h対称【直線AB2型分子】B-A-B型分子(二酸化炭素など)…
04. D∞h対称【直線A2B2型分子】B-A-A-B型分子(アセチレンなど)…
05. C∞v対称【直線ABC型分子】A-B-C型分子(シアン化水素など)…
06.C∞v対称【直線ABCD型分子】A-B-C-D型分子(HCNOなど)…
07.02v対称【折れ線AB2型分子】AB2型分子(水や硫化水素など)…
08. C3v対称【三角錐AB3型分子】AB3型分子(アンモニアなど)…
09. D2h対称 【エチレン型分子】 A2B4型分子(エチレンなど)…
10. D3d対称 【エタン型分子】 A2B6型分子(エタンなど)…
11. D3h対称【平面正三角形型分子】AB3型分子(三フッ化ホウ素など)…
12. D4h対称 【平面正四角形型分子】AB4型錯イオン([PtGl4]2-など)
13. D6h対称【平面正六角形型分子】A6B6型分子(ベンゼンなど)…
14. Td対称 【正四面体型分子】AB4型分子(メタンや四塩化炭素など)…
15. Oh対称 【正八面体型分子】AB6型分子(六フッ化硫黄など)…
16. Td対称 【正四面体型分子】[A(BC)4]型錯体([Ni(CO)4]など)
17. Oh対称 【正八面体型分子】[A(BC)6]型錯体([Cr(CO)6]など)
18. D2h対称【正八面体型】[M(H2O)6]n+アクア錯イオン
19. Td対称 【正四面体型】[M(L)4]n+ or [M(L)4]n- 錯イオン
20. Oh対称 【正八面体型】[M(L)6]n+ or [M(L)6]n- 錯イオン
21.対称なし【単原子】原子軌道関数を見るときなどに便利です…
22.対称なし【単原子イオン】原子軌道関数を見るときなどに便利です…

図2. eduDVのプルダウンメニュー

③すると図3のようにプロダウンメニューでスピン分極は考慮しない DV-Xa法分子軌道計算(ノンスピン版 SCAT)を全自動で実行するのか,スピン分極を考慮した DV-Xa法分子軌道計算(スピン版 SCAT)

を全自動で実行するのか,それとも DV-Xα法分子軌 道計算は実行せずに,その入力ファイル (座標と原子 番号が書かれた入力ファイル F01 と,対称軌道(実 数型球面調和関数の線形結合式)が書かれた入力ファ イル F25)を準備するだけの作業を行うのかを訊いて

d3d26n (ノンスピン版・全自動実行)… d3d26s (スピン版・全自動実行)… d3d26 (F01・F25作成のみ)…

図3. D3d26 メニュー

くる. ここでは d3d26n(ノンスピン版・全自動実行)... を選択する.

④会話式で原子番号や原子間距離・角度を以下のように入力する(図4).
 なおエタン分子の場合,炭素(C)の原子番号は6,水素(H)の原子番号は1,C-C間の原子間距離は
 1.5351 Å,C-H間の原子間距離は1.0940 Å,C-C-Hの原子間角度(∠CCH)は111.17°である[17].

C:¥Windows¥system32¥cmd.exe
*** Program D3d26 (symOrb NON-SPIN version) *** for A2B6 type molecule (e. g. C2H6)
Input Atomic Number(Z) (1 < Z < 94) of Central Atom A, Z = ? 6
Input Atomic Number(Z) (1 < Z < 94) of Terminal Atom B, Z = ? 1
Input Distance(angstrom), A - A = ? 1.5351
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.0940
Input Angle(degree)(90 deg.< Angle < 180 deg.), A-A-B = ? 111.17

図4. プログラム d3d26n 実行画面

⑤DV-Xα法分子軌道計算(ノンスピン版 SCAT)が実行され、マリケン・ポピュレーション・アナリシ スを使ったセルフ・コンシステントな方法(セルフ・コンシステント・チャージ法)で各原子軌道の電 子数がセルフ・コンシステントになるまで繰り返し計算が行われ(この場合は28サイクルで収束する), 各分子軌道のエネルギー固有値表(f08e)が秀丸エディタ画面に出力される(表1).

💑 Ci	器 C¥dvxa¥calc¥d3d26n_20121219154947¥f08e (上書き禁止) [Shift-JIS] [CR+LF] - 秀丸						
771	ιν(<u>F</u>) 編集(E) 表示(⊻) 検索	索(S) ウィンドウ(W) マクロ(N	1) その他(<u>0</u>)		
	M	1	<u>∎₹</u> <u>∎</u> € <u></u> !⇔	I 🕪 📭 🙉 🔍	E XYZ2F0)1 MAKEF25 MA	AKEF05 DVSCA
×	f01	🕱 f06z	🛛 🗷 bn8 🕅 🕱 i0	08 🕱 f08p 🕱 F08P_S	🕱 FO8Ehlgaps	🕱 f08e	
>>	- 1	0	10	. 20	40,,,1,,,	, 50 , , , , , , ,	50
L	1	Ļ					
	2	1 1					
	3	Ļ	201 2	12112-1212-1212-1212-121			
	4		*** M.O.	EIGENVALUE 🤳			
	5	\downarrow					
	6			(RY)	(HR)	(EV)↑	
1	7	Ļ					
	8	1	1 alg	-19.12871	-9.56436	-260.21800	2.00000↓
	9	2	1 a2u	-19.12845	-9.56423	-260.21450	2.00000↓
1	0	3	2 alg	-1.16280	-0.58140	-15.81813	2.00000↓
1	1	4	2 a2u	-0.92765	-0.46382	-12.61926	2.00000↓
1	2	5	1 eu	-0.59788	-0.29894	-8.13330	4.00000↓
1	3	7	3 alg	-0.43594	-0.21797	-5.93034	2.00000↓
1	4	8	1 eg	-0.41909	-0.20954	-5.70104	4.00000↓
1	5	10	2 eu	0.87483	0.43741	11.90074	0.00000↓
1	6	12	3 a2u	0.93255	0.46628	12.68598	0.00000↓
1	7	13	4 alg	0.94665	0.47332	12.87778	0.000004
	8	14	4 a2u	1.03885	0.51942	14.13200	0.000001
1	9	15	2 eg	1.08337	0.54168	14.73759	0.000004

表1. エタンの分子軌道エネルギー固有値表

表1では、各分子軌道のエネルギー固有値が左より、リュードベリ (rydberg, Ry)、ハートリー (hartree, hr)、電子ボルト(electron volt, eV) で示されている. 右端の数字は、各分子軌道における占有電子数である. すでに秀丸エディタ画面に出力されているポピュレーション解析プログラム (POPANL)の出力 (f08p) (表2) を見れば、各分子軌道がどの原子 (炭素または水素)のどの原子軌道(C-1s, C-2s, C-2p, H-1s)から構成されているかを読みとることができる.

表2. エタンの分子軌道のポピュレーション解析結果

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS OF 81 GOR LEVEL
C(1) -260.2180 EV
(1 1s) 1.0000 (1 2s) 0.00000 (1 2p) 0.0000 (2 1s) 0.0000
C(2) = -15.8181 EV
(1 1s) 0.0000 (1 2s) 0.6469 (1 2p) 0.0193 (2 1s) 0.3339
(11s) 0.0000 (12s) 0.0160 (12b) 0.8280 (2.1s) 0.1560
C(4) 12.8778 EV
(1 1s) 0.0000 $(1 2s) 0.3371$ $(1 2p) 0.1528$ $(2 1s) 0.5101$
CHRG OF alg BLOCK
NO. OF ELECTRONS IN FORBITAL OF X ATOM
(1 1s 0) 2.0000 (1 2s 0) 1.3258 (1 2p 0) 1.6945 (3 1s 0) 0.9797 (
CHRG(X ATOM, Y ATOM)
1) 4.7091
3) 0.6223 0.6686
MULLIKEN POPULATION ANALYSIS OF $\mathbf{a}_{2\sigma}$ FOR LEVEL
CHRG OF a2g BLOCK
NO. OF ELECTRONS IN I ORBITAL OF X ATOM

CHRG(X ATOM, Y ATOM)
MULLIKEN POPULATION ANALYSIS OF a _{1u} FOR LEVEL CHRG OF a1u BLOCK NO. OF ELECTRONS IN I ORBITAL OF X ATOM CHRG(X ATOM, Y ATOM)
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$
$\begin{array}{cccccc} \text{MULLIKEN POPULATION ANALYSIS OF} & \mathbf{e_g} & \text{FOR} & \text{LEVEL} \\ \text{E(1)} & & -5.7010 & \text{EV} \\ (1 \ 2\text{p}) \ 0.4275 & (2 \ 1\text{s}) \ 0.5725 & (\\ \text{E(2)} & & 14.7376 & \text{EV} \\ (1 \ 2\text{p}) \ 0.5725 & (2 \ 1\text{s}) \ 0.4275 & (\\ & & \text{CHRG OF} & \text{eg} & \text{BLOCK} \\ & & & \text{NO. OF ELECTRONS IN I ORBITAL OF X ATOM} \\ (1 \ 2\text{p} \ 1) & 0.8550 & (3 \ 1\text{s} \ 0) & 1.1450 & (\\ & & & & \text{CHRG(X ATOM, Y ATOM)} \\ (1) & & 0.5058 \\ (3) & & 0.6985 & 0.7958 \end{array}$
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$

表1と表2を読みとった結果を分かりやすいように整理しなおすと、表3のようになる.

表3. エタンの分子軌道計算結果

	М.О.	${ m eV}$	電子数	C-1s	C-2s	C–2p	H–1s	
	2eg (LUMO+4)	14.738	0	-	-	57.25%	42.75%	
	4a _{2u} (LUMO+3)	14.132	0	0.00%	39.34%	7.16%	53.49%	
	4a _{1g} (LUMO+2)	12.878	0	0.00%	33.71%	15.28%	51.01%	
	3a _{2u} (LUMO+1)	12.686	0	0.00%	19.13%	80.66%	0.21%	
	2e _u (LUMO)	11.901	0	-	-	44.52%	55.48%	
	1eg (HOMO)	-5.701	4	_	_	42.75%	57.25%	
	3a _{1g} (HOMO-1)	-5.930	2	0.00%	1.60%	82.80%	15.60%	

1e _u (HOMO-2)	-8.133	4	_	_	55.48%	44.52%
2a _{2u} (HOMO-3)	-12.619	2	0.00%	41.53%	12.18%	46.29%
2a _{1g} (HOMO-4)	-15.818	2	0.00%	64.69%	1.93%	33.39%
1a _{2u} (HOMO-5)	-260.21	2	100.00%	0.00%	0.00%	0.00%
1a _{1g} (HOMO-6)	-260.22	2	100.00%	0.00%	0.00%	0.00%

⑥表3の内容を直感的に理解するために、それぞれの分子軌道の成分を図示するプログラム LVLSHM を 実行する. eduDV では LVLSHM の入力ファイル L04、L05 が自動的に準備されて、LVLSHM が実行さ れているので、秀丸エディタの【DVPLOT】ボタンをクリックして L07 を選択するだけで図を表示する ことができる. ここでは以下のように L04、L05 を編集してから改めて【LVLSHM】ボタンをクリック して LVLSHM を再実行し、図を作成した(図5).



⑦eduDV では、全分子軌道(波動関数)および電子密度、静電ポテンシャルについて、VESTA で読め るデータファイルを作成するプログラム(CONTRDALL)が全自動で実行されている. 秀丸エディタの F01 タブをつまんで(クリックして)をアクティブにし、【VESTA】ボタンをクリックすれば VESTA が 立ち上がる. その後の操作の詳細についてはマニュアル[7]を参照されたし. 全分子軌道の等値表面図(図 6~図21)、静電ポテンシャル(図22)、静電ポテンシャルマップ(図23)を示す.



⊠ 6 . 1a_{1g} (HOMO-6), Isosurface level: ±0.005a0^{-3/2} C−1s 100.00%, C−2s 0.00%, C−2p 0.00%, H−1s 0.00%



 \boxtimes 7 . 1a_2u (HOMO-5), Isosurface level: $\pm 0.005 a_0^{-3/2}$ C–1s 100.00%, C–2s 0.00%, C–2p 0.00%, H–1s 0.00%



⊠ 8. 2a_{1g} (HOMO-4), Isosurface level: ±0.05a₀^{-3/2} C−1s 0.00%, C−2s 64.69%, C−2p 1.93%, H−1s 33.39%



 \boxtimes 9 . 2a2u (HOMO-3), Isosurface level: $\pm 0.05 a_0^{-3/2}$ C–1s 0.00%, C–2s 41.53%, C–2p 12.18%, H–1s 46.29%



 \boxtimes 1 0 . 1eu (HOMO-2) #1, Isosurface level: ±0.05a_0^-3/2 C–2p 55.48%, H–1s 44.52%



 \boxtimes 1 1 . 1eu (HOMO-2) #2, Isosurface level: ±0.05a0^-3/2 C–2p 55.48%, H–1s 44.52%



⊠ 1 2. 3a_{1g} (HOMO-1), Isosurface level: ±0.05a₀^{-3/2} C−1s 0.00%, C−2s 1.60%, C−2p 82.80%, H−1s 15.60%



 \boxtimes 1 3 . 1eg (HOMO) #1, Isosurface level: ±0.05a_0^-3/2 C=2p 42.75%, H=1s 57.25%



⊠ 1 4 . 1eg (HOMO) #2, Isosurface level: ±0.05a0^{-3/2} C−2p 42.75%, H−1s 57.25%



 \boxtimes 1 7. 3a_{2u} (LUMO+1), Isosurface level: $\pm 0.06a_0^{-3/2}$ C–1s 0.00%, C–2s 19.13%, C–2p 80.66%, H–1s 0.21%



 \boxtimes 1 8. 4a1g (LUMO+2), Isosurface level: $\pm 0.06a0^{\cdot 3/2}$ C–1s 0.00%, C–2s 33.71%, C–2p 15.28%, H–1s 51.01%



 \boxtimes 1 9. 4a_2u (LUMO+3), Isosurface level: $\pm 0.06a_0^{-3/2}$ C–1s 0.00%, C–2s 39.34%, C–2p 7.16%, H–1s 53.49%



 \boxtimes 2 0 . 2eg (LUMO+4) #1, Isosurface level: ±0.06a0^-3/2 C–2p 57.25%, H–1s 42.75%



図23. 静電ポテンシャルマップ(電子密度の isosurface level: 0.02 a⁻³)

6. まとめ

エタン型 A₂B₆型 (D_{3d}対称) 分子が計算できるプログラム d3d26 シリーズ (d3d26n, d3d26s, d3d26) を開発し,教育用分子軌道計算システム eduDV に組み込むことに成功した.エタンはもとより,この形 の分子であれば (原子間距離と角度の実験データは調べる必要がある) 他の分子でもエタンと同じ手順 で電子状態を計算することができる.たとえばヘキサフルオロエタン C₂F₆ (ねじれ型) の場合,炭素(C) の原子番号は 6,フッ素(F)の原子番号は 9,C-C 間の原子間距離は 1.545 Å,C-F 間の原子間距離は 1.326 Å,C-C-F の原子間角度 (\angle CCF) は 109.8°である[17].

炭素-炭素間の多種多様な結合パターンの代表例として eduDV では単結合のエタン(C_2H_6 ,ねじれ型, D_{3d} 対称), 共役系 1.5 重結合のベンゼン(C_6H_6 , D_{6h} 対称), 二重結合のエチレン(C_2H_4 , D_{2h} 対称), 三重結合のアセチレン(C_2H_2 , $D_{\infty h}$ 対称)を取り扱えるようになった.

参考文献 · URL

- [1] 坂根弦太, "DV-Xα分子軌道計算プログラムと三次元可視化システム VENUS の大学基礎化学教育 での活用", *日本教育情報学会第 22 回年会(岡山) 論文集*, 2D3, 198-199 (2006).
- [2] 坂根弦太, 小和田善之, "教育用 F01・F25 準備システム eduDV と錯体計算用 F05 準備システム MAKEF05SCFS", Bulletin of the Society for Discrete Variational Xa, 20(1&2), 247-251, (2007).
- [3] 門馬綱一, 泉富士夫, 坂根弦太, "3 次元可視化システム VESTA と DV-Xα法計算支援環境の開発", Bulletin of the Society for Discrete Variational Xα, 20(1&2), 252-253, (2007).
- [4] Genta Sakane, Koichi Momma, Fujio Izumi, "Building of an Integrated Assistance Environment for the DV-Xα Method", 7th Award for Distinguished Contributions, Memorial Award Lecture, *Bulletin of the Society for Discrete Variational Xα*, **21**(1&2), 13-17, (2008).
- [5] 坂根弦太, "教育用分子軌道計算システム eduDV の開発(2)", *岡山理科大学情報処理センター研究* 報告, **32**, 11-36, (2011).
- [6] 坂根弦太、"化学が大好きな高校生・大学生のみなさんへ、分子軌道計算を今すぐ始めよう!,教科書に出てくる原子、分子、錯体の楽しい電子状態計算~パソコンで簡単に始められる周期表の全元素を 対象とした分子軌道計算~",http://www.chem.ous.ac.jp/%7Egsakane/fun/index.html#edudv
- [7] 坂根弦太, "はじめての DV-Xα法分子軌道計算支援環境-タブエディタ(秀丸エディタ)上で使う DV-Xα法計算支援環境利用の手引き-", 1-146, (2010), http://www.chem.ous.ac.jp/%7Egsakane/HidemaruDV/HidemaruDV.pdf
- [8] 坂根弦太, "人材育成のための授業紹介, 化学, 教育用分子軌道計算システム eduDV を利用した電子 についての基礎化学教育", *JUCE Journal (大学教育と情報)*, **18**(4), 15 (2010), http://www.juce.jp/LINK/journal/1002/03_03.html
- [9] Hirohiko Adachi, Masaru Tsukada, Chikatoshi Satoko, "Discrete variational Xα cluster calculations. I. Application to metal clusters", *Journal of the Physical Society of Japan*, 45(3), 875-883 (1978).
- [10] 足立裕彦監修,小和田善之,田中功,中松博英,水野正隆共著,"はじめての電子状態計算 ■DV-Xα分子軌道計算への入門■",三共出版,1-190,(1998).
- [11] 小和田善之,山田善信,"はじめての電子状態計算■DV-Xa分子軌道計算への入門■", ダウンロード・ページ,次世代版 dvscat プログラム, dvxa_v1_04, http://chem.sci.hyogo-u.ac.jp/hajimete/download.html
- [12] 有限会社サイトー企画, "秀まるおのホームページ", ソフトウェア, 秀丸エディタ, http://hide.maruo.co.jp/software/hidemaru.html
- [13] 泉富士夫, "泉 富士夫の粉末回折情報館", 3D Visualization System VENUS, 11.1.2 The assistance environment for the DV-Xa method, http://fujioizumi.verse.jp/visualization/VENUS.html#assistance environment
- [14] Koichi Momma, Fujio Izumi, "VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data", *Journal of Applied Crystallography*, 44(6), 1272-1276 (2011), http://dx.doi.org/10.1107/S0021889811038970
- [15] 門馬綱一, "JP-Mineral", Software, VENUS system, VESTA(Visualization for Electronic and Structural Analysis, http://www.geocities.jp/kmo_mma/crystal/jp/vesta.html
- [16] Open Watcom, version 1.9, http://www.openwatcom.org/
- [17] 日本化学会編纂, 化学便覧基礎編 改訂 5 版, 第 II 巻, 16.1 分子構造, 表 16.3 有機化合物の 構造定数, p. II-802, 808, 丸善, 2004 年, 化学書資料館, https://www.chem-reference.com/

英語の読みにおける脳波 $[\alpha 波 + \theta 波]$ 積分値の変化

岡山理科大学 情報処理センター

岩崎彰典

秋田県立大学 総合科学教育研究センター

岡崎弘信

環太平洋大学 次世代教育学部

木戸和彦

創価大学 ワールドランゲージセンター

福田衣里

環太平洋大学 教職センター

江原智子

倉敷市立精思高等学校

水野純次

1. はじめに

fMRI (functional Magnetic Resonance Imaging) や NIRS (Near InfraRed Spectoroscopy) のような非侵襲的な手法・装置が発達してきたおかげで,近年,脳に焦点を当てた第2言語習得に関する研究が活発に行われるようになってきた(石川, 2009;大石, 2006 他)。本研究でも,fMRIやNIRSのよりも空間的な解像度は劣るが時間的な解像度では優位な EEG (Electroencephalogram)に注目し,日本人英語学習者の英文リーディングに関する実験を行った。

2. 目的

脳内における言語処理過程の研究では、ある出来事に反応する脳波、事象関連脳電位 (Event Related Potential: ERP)を用いた調査がしばしば行われている。しかし、ERP は微弱な脳波のため、そのままでは背景脳波に埋没してしまい計測が困難である。そのた め、眼球運動やまばたき等のアーチファクトが混入したデータを除外した上で、数十回の 加算平均処理を行う必要がある。しかし英語のリーディングは有意味刺激であり、繰り返 し行う場合、記憶・慣れにより、毎回、等質な刺激を確保するのは困難である。また、読 む動作はつまり眼球を動かす行為そのものであることから、本来コントロールすべき眼球 運動によるアーチファクトが混入してしまう可能性が増大してしまう。ある程度かたまり のある英文(例えば 100 語以上)では、尚更である。

このような理由から,我々は,ERPではなく,リーディング時における脳波[α波+θ波] 積分値の推移を観察することで,外国語としての英文リーディングにおける習熟度別の脳 波特性を明らかにできるのではないかと考え,実験を行った。

3. 方法

実験参加者は,男6名,女4名の計10名,習熟度の異なる日本人英語学習者(TOEIC スコアが300点台~900点台),全員,右利きの健常者である。

参加者の左右前額部の Fp1 と Fp2 と両耳朶に脳波用電極を装着する。7 分間の安静時間 ののち我々が収集した過去のデータから,正答率が TOEIC 上位者と下位者で分かれている 問題,全体的に正答率の高い問題,正答率の低い問題から英文を抜粋し各被験者に読んで もらい,その間の 10 秒ごとの脳波[α 波+ θ 波]積分値を測定・記録する手法を用いた。脳 波積分値を利用した実験は,Kubo・Okanoya・Kawai (2012) や李・三谷・木村 (1999) などで,また θ 波と第2言語という文脈ではNakano・Yoshida・Natsume(2007)で用いら れた手法である。

4. 結果と考察

図 1, 図 2 はそれぞれ英語上級者(TOEIC960)と英語初級者(TOEIC380)の脳波[α 波+ θ 波]積分値の推移例である。脳波[α 波+ θ 波] 積分値は、ベースとなる値(安静状態の平均値:以降、基準値と呼ぶことにする)に個人差があるため平均値での比較が難しい。 そこで、各個人の平均値からの偏差を比較することで、脳波の変動に差があるかどうかの検証を行った。



図 1.上級者 (TOEIC960) の脳波 $[\alpha 波 + \theta 波]$ 積分値の推移例



図 2.初級者 (TOEIC380) の脳波 $[\alpha 波 + \theta 波]$ 積分値の推移例

参加者 10人に対する実験のうち2名分は,機器的な不具合によるものと考えられる異常 な数値が示されたので対象から除外。残り8名の TOEIC スコアの内訳は,

900以上 2名(男1・女1) 700未満 6名(男4・女2)

参加者の **Fp1**(左前額部)と **Fp2** (右前額部)の脳波[α波+θ波]積分値の分散値をリ ラックス時とリーディング時で比較。有意水準 5%で評価した。

また、大学生33名に対して事前に行った課題の正答率は以下の通りであった。

リーディング1 小問1:64% 小問2:33%

リーディング2 小問1:33% 小問2:55% 小問3:36%

リーディング3 小問1:6% 小問2:42% 小問3:27% 小問4:24%

5.まとめ

実験参加者数が少ないので、平均を求めるなどの統計的な処理は行っていないが、実験 の結果からある傾向性がうかがえる。

1. 難易度の高くないリーディング1とリーディング2に対して上級者2名の脳波はリ ラックス時と比してそれほど反応していないが、上級者以外では1名を除いて Fp1, Fp2 のどちらか、もしくは両方に反応している。これは問題の難易度に対する習熟度の差が表 れた結果と考えられるのではないか。 2. 上級者は2名のうち1名は難易度の高いリーディング3で有意な反応を示した。リ ーディング1,2課題に比べて集中力を要したと考えられるのではないか。

3. 上級者以外で有意差が確認できないのは7ケースだが、1ケース以外はすべて難易度 の高くないリーディング1と2で観察されている。上級者以外でも課題の難易度により集 中の仕方が異なっていると考えられるのではないか。

今後は、さらに実験参加者を増やし、また機材の充実を図りながら研究を継続していく 予定である。

記

本研究は文教協会の助成により実施された。

参考文献

石川慎一郎 (2009). 第2 言語習得研究と脳科学: MRI 実験の知見から 『システム制御情報 学会誌』53(4), 143-148.

Kubo, K., Okanoya, K., & Kawai, N. (2012). Apology isn't good enough: An apology suppresses an approach motivation but not the physiological and psychological anger. PLoS one, 7(3), e33006.

李寧・三谷惠一・木村基剛 (1999). 機械的振動を用いた三谷式漸進的弛緩法による額の筋 電位積分値および脳波α波積分の減衰 『心理学研究』70(2), 87-93.

Nakano, H., Yoshida, N., & Natsume, K. (2007). Analysis of EEG pattern measured at eight electrodes on L2 English rhythm acquisition. Language Education and Technology, 44, 155-167.

大石晴美(2006).『脳科学からの第二言語習得論 英語学習と教授法開発』京都:昭和堂.

考古地磁気学データベースと Web サービスの設計 Design of online database and web services for archaeomagnetism

*畠山唯達(岡山理科大学情報処理センター)

Tadahiro Hatakeyama (Information Processing Center, Okayama University of Science)

Abstract

Now we are introducing the design and specifications of a new web-based database of archaeomagnetis in Japan and the plan of publishing the database as a web service. The targets of this service are researchers of geomagnetism / paleomagnetism, researchers and investigators of archeology, people related to education, students and general citizens. Our web service will provide the information of archeomagnetic dataset, locations and eras with search engine and map.

1. はじめに

我々はこれまでに、考古学試料(土器・瓦やそれを焼いた窯跡、)の持つ残留磁化(試料が最後 に焼かれた時代の地磁気の様子を記録した磁化の方位や強度)を測定した考古地磁気データを集め て、データベースを作成してきた。この大きな目的は過去数百年~数千年に渡る地磁気の変動「地 磁気永年変化」の様子を探ること、また、日本における地磁気永年変化の標準モデル(標準曲線) を作成することで年代が判らない試料に対して残留磁化の方位や強度からその年代を調べる「考古 地磁気年代推定法」の開発と洗練のためである。これまでの成果として、我々は2千数百サイトに 及ぶ考古地磁気データを収集し、そのうち信頼できる考古学年代がついたもの約700のデータをま とめ上げた考古地磁気データベース作成してきた^[1]。この次の目標は、データベースのさらなる拡 充とこのデータベースを広く公開し閲覧・利用してもらうことである。そのために、データの篩分 け、および、公開可能な形式としてのデータベースの仕様と公開用のサービスの実装仕様の策定を する必要がある。本稿では作成してきたデータベースを基に、データベースのオンライン化を行い、 Web 上で公開するための方法について述べる。

2. データベースの構造

今回扱うデータベースは、規模としては非常に小さなものになる予定である。使用するテーブル は4枚で、いずれもデータの数は数百~数千程度である。テーブルのうち2枚は考古地磁気学デー タに関するもの、残りの2枚は発掘された遺跡やデータが記載されている文献についてのものだが、 その関係性も単純な構造だ。ただし、データ数だけでなく、取り扱うデータの種類が歴史溶岩や湖 沼底堆積物等への古地磁気データ等に対しても増える可能性があり、いくらか拡張性を持たした構 造にすることが求められる。 (1) データテーブル (方位データ):

考古地磁気データのうち方位(伏角+偏角)のデータを持つものを格納する。考古地磁 気データのうち、9割以上の大部分は方位のみを持ったデータが占めている。方位デー タは、土器・陶器・瓦を焼成する窯遺跡の床面や竈跡の床面、製鉄跡の床面等、高温で 焼かれた履歴を持つ、ゆがみにくい安定な面から切り出したから採取された定方位試料 (採取時に現在の方位や水平線を試料上に記録したもの)に対して古地磁気学的測定を 行って抽出されたものである^[2]。

(2) データテーブル(強度):

考古地磁気データのうち強度(全磁力)のデータを持つものを格納する。古地磁気強度 データは通常方位データとは測定方法が全くことなるため、通常は独立に測定される^[3]。 さらに、実際には、強度データと方位データとを同一の条件で扱うことは少ない。その 理由は、強度は方位より測定が難しく誤差がずっと大きいこと、および、強度を測定す る試料は土器片である場合が多く仮に強度を測定できても方位が確定しないこと、など がある。現実問題として、強度データの数は方位データのそれと比べてずっと少ない。 ただし、ある観測点(遺跡)において強度・方位の両データを得ることができれば、そ の場所におけるその時代の地磁気3成分(北向き、東向き、下向き)を再構成すること ができ、地磁気永年変化を調べるためにもっとも良い材料となる。

(3) 文献テーブル:

考古地磁気データの掲載されている文献の大部分はその遺跡の発掘報告書である。つま りそこには、考古地磁気の結果だけでなく遺跡全体に関する調べられた情報が記述され ている。場合によっては他の考古学者や考古理学者たちが導いた遺跡の年代値も書かれ ている。ただし、国内の遺跡発掘報告書の場合、ほとんどが日本語の文献であるので遺 跡名を含めて英訳を付する必要がある。

(4)遺跡テーブル:

「遺跡」は複数の窯跡(サイト)を含む。それぞれの窯跡は異なる年代を持っている。 また、1つの遺跡の報告が複数巻の発掘報告書によってされている場合も多い^[4]。ここ では各遺跡単位についての情報をまとめる。さらに、最近はインターネット上に遺跡の 情報が出ているサイトもかなりある。そのようなものが見つかれば、リンクも記す。当 初、他のデータベースと直接親和性(互換性)のあるデータベースを作成することも検 討したが、日本の考古学遺跡に関するデータベースで統一的なフォーマットが採用され ていないようなので、今回はネット上の情報へのリンクにとどめることにした。

それぞれのテーブルの要素およびその型については以下の図に示す。現時点で手持ちのデータで は、それぞれのテーブルにおけるデータ数は、考古地磁気データ(方位)=約2200、考古地磁気デ ータ(強度)=約30、文献=約300、遺跡=約300であるが、すぐに公開できるほどは吟味されて いないデータがたくさんある。また、今後考古地磁気データそのものの発掘作業も行いデータ数を 増やす予定である。このような現状を鑑み、設計するデータベースには少し余裕を持たせた構成を 考えている。

フィールド	型
通し番号(主キー)	符号なし整数
遺跡	符号なし整数(遺跡データテーブル通し番号)
窯(サイト)番号	テキスト
窯(サイト)番号(英語)	テキスト
サイト通し名	テキスト
サイト通し名(英語)	テキスト
サイトの種類(古窯・瓦窯・竈跡・陶片…)	テキスト
サイトの種類(古窯・瓦窯・竈跡・陶片…)(英語)	テキスト
地方	テキスト
県	テキスト
市町村	テキスト
地方(英語)	テキスト
県(英語)	テキスト
市町村(英語)	テキスト
サイト経度	実数(東経を正とする)
サイト緯度	実数(北緯を正とする)
試料個数	符号なし整数
消磁の方法	テキスト
消磁のレベル	テキスト
NRM 強度	テキスト(不明=ND を含む)
平均偏角(Dm)	実数
平均伏角(Im)	実数
集中度パラメータ(k)	実数
信頼限界(a95)	実数
考古学年代値	実数(不明の場合は+9999)
考古学年代の推定幅(誤差)	実数(不明の場合は+9999)
考古学年代値の種類	テキスト
その系統(例:土器編年の型式番号)	テキスト
その系統(例:土器編年の型式番号)(英語)	テキスト
文献	符号なし整数(文献テーブル通し番号)の配列
強度データ	符号なし整数(強度データテーブル通し番号)
Web 公開可能フラグ	符号なし整数、もしくは、ブール値
備考(公開)	テキスト
備考(非公開)	テキスト
レコードアップデート日付(バージョン)	テキストまたは符号なし整数

表 1-1. データテーブル (方位データ)

フィールド	型
通し番号(主キー)	符号なし整数
遺跡正式名	符号なし整数(遺跡データテーブル通し番号)
窯(サイト)番号	テキスト
窯(サイト)番号(英語)	テキスト
サイト通し名	テキスト
サイト通し名(英語)	テキスト
サイトの種類(古窯・瓦窯・竈跡・陶片…)	テキスト
サイトの種類(古窯・瓦窯・竈跡・陶片…)(英語)	テキスト
地方	テキスト
県	テキスト
市町村	テキスト
地方(英語)	テキスト
県(英語)	テキスト
市町村(英語)	テキスト
サイト経度	実数(東経を正とする)
サイト緯度	実数(北緯を正とする)
試料個数	符号なし整数
強度推定の手法	テキスト
NRM 強度	テキスト(不明=ND を含む)
古地磁気強度	実数
古地磁気強度の不確定性(誤差)	実数
考古学年代値	実数(不明の場合は+9999)
考古学年代の推定幅(誤差)	実数(不明の場合は+9999)
考古学年代値の種類	テキスト
その系統(例:土器編年の型式番号)	テキスト
その系統(例:土器編年の型式番号)(英語)	テキスト
文献	符号なし整数(文献テーブル通し番号)の配列
方位データ	符号なし整数(方位データテーブル通し番号)
Web 公開可能フラグ	符号なし整数、もしくは、ブール値
備考(公開)	テキスト

備考(非公開)	テキスト		
レコードアップデート日付(バージョン)	テキストまたは符号なし整数		
表 1-2. データテーン	ブル(強度データ)		

フィールド	型
通し番号(主キー)	符号なし整数
発行年	符号なし整数
論文著者	テキスト
論文タイトル	テキスト
所蔵文献(報告書)名	テキスト
文献発行機関	テキスト
論文著者 (英語)	テキスト
論文タイトル(英語)	テキスト
所蔵文献(報告書)名 (英語)	テキスト
文献発行機関 (英語)	テキスト
文献の種類(報告書・和文)	テキスト
考古地磁気以外の年代値の付与ありなし	符号なし整数、もしくは、ブール値
考古地磁気推定年代あり	符号なし整数、もしくは、ブール値
文献所蔵機関	テキスト
文献⊐ピーの有無	テキスト
外部へのリンク	テキスト(Web 上ではハイパーリンクとして機能)
備考(公開)	テキスト
備考(非公開)	テキスト
レコードアップデート日付(バージョン)	テキストまたは符号なし整数

表 1-3. 文献テーブル

フィールド	型
通し番号(主キー)	符号なし整数
遺跡正式名	テキスト
遺跡略称	テキスト
地方	テキスト
県	テキスト
市町村	テキスト
遺跡正式名 (英語)	テキスト
遺跡略称 (英語)	テキスト
地方 (英語)	テキスト
県(英語)	テキスト
市町村 (英語)	テキスト
遺跡経度	実数(東経を正とする)
遺跡緯度	実数(北緯を正とする)
サイト(窯)数	符号なし整数
文献	符号なし整数(文献テーブル通し番号)の配列
外部へのリンク	テキスト(Web 上ではハイパーリンクとして機能)
備考(公開)	テキスト
備考(非公開)	テキスト
レコードアップデート日付(バージョン)	テキストまたは符号なし整数

表 1-4. 遺跡テーブル

3. Web におけるサービス

上記のデータベースに対して、一般に向けて提供するサービスとして Web を用いたフロントエンドを作成する。このサービスは以下のような人を対象としている。

- ✓ 地磁気・古地磁気研究者:彼らはこのデータベースから直接古地磁気データを読み取って、研 究や教育に活かす。また、考古地磁気学測定を行っておられる研究者には新規のデータを提供 していただき、データベースの質・量の強化にご協力いただければありがたい。
- ✓ 考古学研究者:考古学研究者が考古地磁気に期待していることは年代推定である。考古地磁気のデータを含む古地磁気データから過去の地磁気がどのように変化したかを示す地磁気永年

変化標準モデルが作成され、これを基に未知の年代を持つ考古学試料について古地磁気測定を 行うことで、モデルと合えば年代が推定できる。この曲線は過去にも作成されてきたが^[5]、我々 の新データベースを利用した新しいモデルも報告されつつある^[6]。今回のWebサービスでは この地磁気永年変化モデルや年代推定の提供を計画していないが、次期のバージョンでこれら を取り込む予定である。これからも考古地磁気学が考古理学の1つとして考古学全体の発展へ 寄与したいと考えている。

✓ 教育関係者、学生生徒、一般の人:地磁気の分野は小学校~高等学校の理科教科の範囲ではあ まり取り扱わない。しかし、方位磁針を用いた各種学習中に「磁針が北を向かない」という事 実とともに「地磁気は時代とともに大きく変化していきたし、これからもしていく」というこ とを学習する際に利用いただければありがたい。また、考古学に興味を持つ方々にもご利用い ただきたい。

このような人を対象として考古地磁気データをわかりやすく検索・調査するための Web サービス(80/tcp)として以下のような仕様を作成した(図 1)。

- 1. ユーザーが検索して、特定のデータへたどり着くことができるようにする。基本的には検索画 面が入口のサイトとなる。
- 2. 検索対象となるキーはそれぞれのテーブルから、
 - A) 考古地磁気方位データ検索:遺跡名(部分マッチ)、地方、都道府県、サイト位置(範囲 指定)、年代値(上限下限指定)
 - B) 考古地磁気強度データ検索:遺跡名(部分マッチ)、地方、都道府県、サイト位置(範囲 指定)、年代値(上限下限指定)

また、次年度以降に文献検索、遺跡検索を追加することを検討している。

- 3. 考古地磁気データ(方位、および、強度)検索結果画面において、
 - A) 検索結果にマッチするすべてのデータについて「データテーブル(方位)」もしくは「デ ータテーブル(強度)」の各項目を抜き出した表を表示し、また、テキスト形式でダウン ロードできるようにする。これは、古地磁気関係の研究者が他のサイトとの比較や地磁気 永年変化の研究をするためには欠かせない機能である。
 - B) 検索結果表の遺跡名かサイト番号をクリックすると、地図情報にアクセスできるようにする。
 - C) 検索結果表の外部データベースをクリックすると、該当する外部のオンラインデータベー スへアクセスできるようにする。
 - D) 検索結果表の「強度データ」に該当する数値がある場合、クリックするとそのデータを表示することでできるようにする。
- 地図情報は無料で利用できるものが望ましい。地図サービスで最も利用されている Google Maps API はアクセス数に応じて有料化^[7]されたため、地図の利用が少し難しくなった。他の 地図サービスも含めて検討する事項である。
- 5. アクセス数、および地図情報へのアクセス数を記録しておけるようにする。ただし、アクセス 解析に google-analytics 等の他サイトへ情報を提供するようなものの利用を避ける。

- 6. 後ほど地図情報の利用の上限を超えそうな場合、リクエストを遮断する更新を平易に付け加え られるようにしておく。
- 7. ページレイアウトはスタイルシート(CSS)にて決定し、将来の変更(とスマートフォン対応) の余地を残しておく。
- 8. ページは日本語および英語で提供する。
- 9. 次年度の事業として改変・機能追加する余地を残しておく。

遺跡の説明等外部 サイトへのリンク	日本考古地磁気データベース eomagnetic Data Archive of Jap の方位 0 3度 0 2566 能 能 後	pan)						
Contraction Contracti		Read (Rectinition) 77 (Act Act Act Act Act Act Act Act Act Act	())) - ()), hadroom -	-481-4580			- Crap	
検索編果:地図表示		検索結5	果:一覧表示	ŧ				
遺跡2 遺跡2 遺跡5 …♡		サイト 遺跡1-1 遺跡2-2 遺跡3- 遺跡5-3	N D 14 -16.5 4 -6.1 10 -12.4 12 -10.2 9 -11.7	+45.4 +52.3 +48.8 +45.1 +51.4 括ダウン	k 302.3 111.2 1662.3 345.6 298.9	a95 1.6 3.2 0.8 1.1 2.1	Age 670 680 680 680 690	+- 20 20 15 10 20

図 1. Web サービスのごく簡単なイメージ図、他の考古学情報サイトへのリンクをつけ、将来的に は連携をはかりたい。(図の地図は OpenStreetMap Japan^[8]より)

4. 今後の予定

以上のように、日本で最初の広く公開された考古地磁気データベースを作成する計画を立てた。 これからは、この実装に移る予定である。また実装作業と同時に、地磁気・古地磁気学関係、考古 学関係、や教育関係等の各方面とも連携を取りながら、より一層使いやすいデータベースとその公 開の仕組みにしていく。さらに、今後は地磁気永年変化曲線(モデル)の提供や、未知の年代の試 料について古地磁気データを入力すると年代推定をしてくれるようなサービスを導入することも 検討している。将来的には地磁気を知る・研究するためのナレッジベースの1つとして、我々が他 に開発している他のサービス等とも統合していきたい。

References and Notes

- Hatakeyama, T., H. Shibuya, K. Hirooka, H. Nakamura, A. Yoshihara, M. Yamamoto, M. Torii, A New Archeomagnetic Database of Japan, (in prep)
- [2] 中島正志, 夏原信義, 考古地磁気年代推定法, 考古学ライブラリー9, ニューサイエンス社, 96pp, 1981.
- [3] Sakai H., Hirooka K., Aachaeointensity Determineations from Western Japan, J. Geomag. Geoelectr., 38, 1323-1329, 1986.
- [4] たとえば、日本の考古地磁気学において最もたくさんのデータを提供している大阪府陶邑遺跡 では5つの報告書が出ているが、考古地磁気データは I~IV までの4つの報告書に分散して報 告されている。
- [5] Hirooka K., "Results from Japan", in "Geomagnetism of baked clays and recent sediments" eds. Creer, K. M., Tucholka, P. and Barton, C. E., Elsevier, 150-157, 1983.
 Shibuya, H., "Geomagnetic Secular Variation in Southwest Japan for the Past 2,000 Years
- [6] 畠山唯達,山本真央,考古地磁気データを用いた日本における過去 2000 年間の地磁気変動標 準曲線の作成について,岡山理科大学情報処理センター研究報告, 32, 41-48, 2011.

by Means of Archaeomagnetism", MS thesis, Osaka University, 54pp, 1980.

- [7] https://developers.google.com/maps/faq?hl=ja
- [8] http://openstreetmap.jp/
- [9] http://mage-p.org/

謝辞

データベース作成と実装に関して、鳥居雅之博士、広岡公夫博士、中村浩博士、渋谷秀敏博士、 吉原新博士、山本真央さんらのご助言を頂き参考にさせて頂いた。本稿のデータベースの実装につ いては、平成 24 年度科学研究費補助金の助成を受けて行われる。

岡山オルガノンにおける大学連携による教育の共有化−Ⅱ

— ライブ型遠隔授業や VOD 方式による e-Learning 教育—

竹内 涉^{*1}*2、木村 宏^{*1}、北村 光一^{*1}、岡戸 真理子^{*1}、本田 絢也^{*1} TAKEUCHI Wataru, KIMURA Hiroshi, KITAMURA Kouichi, OKADO Mariko, HONDA Aya

Key Words: 遠隔教育、e-Learning、テレビ会議システム、VOD 方式、学習管理システム、 大学連携

1. はじめに

岡山理科大学を代表校とし岡山県内 15 大学が連携して展開している、「岡山オルガノンの構築 -学士力・社会人基礎力・地域発信力の融合を目指した教育-」事業のコアプロジェクトと位置 づけている遠隔教育に関連した部分の報告を昨年に引き続き行う。本事業は平成 21 年度文部科学 省の「大学教育充実のため戦略的大学連携支援プログラム」に選定されたもので、教育共有を目 的とする遠隔教育の実施に当たっては、本学情報処理センターより施設提供および VOD コンテン ツ作成支援の面で、多大なるご協力をいただいており、深甚なる謝意を表します。

本事業における遠隔教育は TV 会議システムを用いた双方向ライブ型教育、およびインターネットを活用した VOD 型教育の2方式で実施しており、それらの基本的なシステム構成と仕組みについては昨年度に報告したので、ここでは平成23年度に取り組んだ事項を中心に報告を行うことにする。

2. 平成23年度の遠隔教育の展開

ライブ型遠隔教育

平成 21 年 7 月に補助事業の採択が発表されて以来、TV 会議システムの選定、通信インフラの 決定、遠隔講義科目の決定、および全連携大学との調整作業を行い、平成 22 年度からのライブ型 遠隔講義の実施に向けた準備を進めた。同年度末に、最大 6 大学までが同時参加できる仕組みが 完成し、無事ライブ型遠隔講義の開講体制が整った。これには岡山商科大学オフィスと大学教育 連携センターの緊密な連携があって実現したものと考えている。また、本事業向けに開講科目を 設定していただいた岡山商科大学、川崎医科大学、倉敷芸術科学大学の担当教員諸氏に感謝しな ければならない。

平成 22 年度には前期 2 科目、後期 3 科目の配信が実現し、全体で 20 名の受講者があった。こ の人数は計画段階当初に想定していた人数の 1/2 以下ではあったが、新規に科目提供を行い、し かも全く新しい仕組みでの科目提供であり、各連携校における広報活動も不十分であったことか ら、やむを得ないものと判断した。同年度の夏期休業中に MCU (多地点接続)装置に導入を行い、 全連携校が同時に送受信できる体制を構築した。さらに同年度末に、MCU 制御用パソコンを接続 するための IP アドレス確保のため、全連携校にギガビット VPN ルータの設置を行って TV 会議シ ステムを完成させた。

^{*1} 岡山理科大学 大学教育連携センター

補助事業の完成年度である平成23年度には、前期7科目、後期7科目のライブ型講義が開講さ れ、配信大学数も11大学と一気に教育内容の多様化と充実化が図られた。本格的な運用に当たっ て、配信大学はもとより受信大学もTV会議システムの立ち上げや接続確認を担当する教職員を配 置するなど、万全の体制を敷いて望んだ。また、配信大学では受信大学の学年暦の相違などによ る補講対応、不慮の通信障害発生などに対処するため、講義状況のビデオ撮影・録画を行うなど、 通常の講義より遙かに手間を掛けざるを得なかった。本学では、大学教育連携センターが設置さ れていたので、これらの作業をセンター職員が担当した。

大学名	期	科目名	担当教員			
岡山大学	前	大学と社会	和賀 崇			
岡山県立大学	後	音楽の鑑賞	岡﨑 順子			
四山蚕封士賞	前	経営学特殊講義 I (岡山経営学)	(社)岡山経済同友会ボランテ ィアプロフェッサー (担当教員:大崎 紘一)			
	後	経営学特殊講義Ⅱ(岡山経営学)	(社) 岡山経済同友会ボランティアプロフェッサー(担当教員:大崎 紘一)			
岡山理科大学	後	岡山学	 亀田 修一、能美 洋介、西戸 裕 嗣、西村 敬一、波田 善夫、白 石 純、北岡 豪一、志野 敏夫、 北川 文夫 			
川崎医科大学	前	個人・社会と医療考	大槻 剛巳			
川崎医療福祉大学	前	哲学	安藤 正人			
	前	まちづくりインターンシップ	小出 肇、神田 鉄平			
倉敷芸術科学大学	前	倉敷まちづくり基礎論	五十嵐 英之、村山 公保			
	後	倉敷まちづくり実践論	カスパー シュワーベ、小山 悦 司			
環太平洋大学	後	スポーツ栄養学	前村 公彦			
くらしき作陽大学	前	特別支援教育総論	橋本 正巳			
山陽学園大学	後	宗教思想	尾崎 誠			
中国学園大学	後	現代子ども学入門	林修他			

表 1 平成 23 年度双方向ライブ型遠隔講義科目一覧

本学においては、入学者数の増加対策として情報処理センターの改造計画が平成22年末に確定 し、6階フロア全体が改造対象となったため、これまで借用していた6階実習室と隣の機器室(MCU 装置等を設置)に代わる場所を求める必要性が生じた。情報処理センター等と折衝の結果、同セ ンター5階のサーバー室にMCU等の機器を設置し、ライブ型科目の受信専用室として5階の「イ ンターネット端末室1」(収容人数12名~16名)を借用できることになった。本学から新たに発 信する「岡山学」は本学内の受講生数が数10名に達することが想定されたので、5階の実習室(116 名収容可能)を割り当てていただけることになった。そのため、4月中に5階への移転工事を終 わらせた。その結果、ライブ授業の受講は受講機器を常設した「インターネット端末室1」を用 いて実施できるようになった。「岡山学」の発信対応策として、5 階実習室への UTP ケーブル増設 工事は夏期休業中に実施し、講義時には TV 会議システムを移動させて配信を行った。

ライブ型科目受講室の収容人数が 12 名程度であり、これで十分であるかが問題となったが、1 科目あたりの受講者数は前期で 2 名程度であったので、後期についてもこの収容人数の範囲内で 実施できるものと想定し、当面はこの環境で運用することとなった。

また、TV 会議システムは、「岡山オルガノン」事業の各種委員会開催でも活用されたが、やは り本学主催の会議を5階の受講室(「インターネット端末室1」)では狭小であり、今後の対応が 課題として残っている。

(2) VOD型遠隔教育

VOD 型遠隔教育は、新規に講義科目を立ち上げるため、コンテンツ作成に多くの準備期間が必要であったことや、学習管理システムの整備等に手間取り実際の開講は平成22年後期からとなった。当初の開講科目数は3科目であったが、加計教育コンソーシアムから借用した「アルゴリズム入門」、および新規に撮影・編集を行った「スポーツ産業論」と「睡眠学」というユニークな科目でスタートを切ることができた。「睡眠学」には117名の受講生が集まり、逆に受講人数の多さに事務担当部局間での調整が必要となるほどであった。担当された保野先生の素晴らしい講義スタイルは、現在もプロモーションビデオで配信されている。新規のビデオ収録・編集においては、担当教員と大学教育連携センター担当職員の協力体制がスムーズに展開できたことが成功の要因であったと考えている。

平成 23 年度には前年後期に撮影・編集が行われた科目が加わり、前期 6 科目、後期 12 科目と 一気に科目数を増やすことができた。新しい試みにチャレンジしていただける教員層の厚さを知 らされた感を強く持った。担当大学数も前年の 3 大学から、10 大学に拡大し、VOD 型遠隔教育方 式に対する理解者が増えつつある証であると見ている。受講者数も年間 413 名に達し、順調な伸 びを示していることが特筆できる。また、岡山県立大学では自学の学生対象に自習用教材として 提供する新しい e-Learning システムの活用方法も始まっている。

他方、ビデオ撮影・編集担当者の負荷が大幅に増えたこと、特に、本学内で常設スタジオが確保できないため25号館8階控室を借用して撮影を行わなければならず、使用の度にスタジオ設定作業が必要となり、かなり苦労を強いられることが、今後のコンテンツ作成上の課題として残っている。

学習管理システム(Momotaro)は本学の大西研究室が開発した独自設計のシステムである。8 年以上にわたって加計教育コンソーシアム等、多くのサイトでの利用実績があり「岡山オルガノ ン」では地域発の e-Learning システムとして採用した。残念なことに、このシステムが推奨する オーサリングツール「StreamAuthor」が、開発業者(CyberLink 社)の都合により開発およびサポ ートが終了してしまった。PowerPoint 画面とビデオ撮影した映像と組み合わせて編集できる便利 なツールであったが、V-4 に改版されて以降、MS Office の新版に一部の機能が対応し切れなくな り、さらにこの度サポートが終了してしまったことで、今後のコンテンツ開発に大きな不安材料 を提供することとなった。現状では工夫を行って、コンテンツ作成と運用に当たっており、特段 の問題点は発生していないが、VOD 型遠隔教育を支えるシステム編成全体の将来構想を見直す時 期が早晩到来するものと考えられる。

大学名	期	科目名	担当教員名
岡山県立大学	前	解析学 I (*1)	小松 弘明
岡山商科大学	後	パーソナルファイナンス:	高林宏一
		金融資産運用・不動産 I	
岡山理科大学	前	環境と社会	井上 堅太郎
	後	環境と社会	井上 堅太郎
	前	インターネット入門	榊原 道夫、大西 荘一
	後	インターネット入門	榊原 道夫、大西 荘一
	前	アルゴリズム入門	大西
	後	アルゴリズム入門	大西
	後	環境考古学	富岡 直人
川崎医療福祉大学	後	睡眠学	保野 孝弘
環太平洋大学	後	レクリエーション論	山本 孔一、田原 陽介
吉備国際大学	後	スポーツ産業論	清水 正典
くらしき作陽大学	前	音楽療法概論	柿崎次子
	前	食心理学	河村教
山陽学園大学	後	現代中国論	班偉
计中十年	後	日本人の思想	苅米 一志
	後	日本美術史 b	土井 通弘
中国学園大学	後	運動生理学	森脇 晃義、森 恵子

表 2 平成 23 年度 V O D 型遠隔講義科目一覧

*1 自学の学生を対象とする補助教材としても利用。

3. 遠隔教育の成果と課題

補助事業最終年度における「岡山オルガノン」の遠隔教育の成果について述べる。表3に示す ように、ライブ型講義の受講生は、前期が11名、後期が16名と想定を下回る実績であった。も ちろん、発信大学にはそれぞれ自学受講生が多数いるので、講義としては特に問題なく実施され た。本事業の計画当初では全連携校の在学生数役3.5万人の1%、すなわち350名程度の受講者数 を想定していた。提供科目数を年間12科目とし、各科目に平均10大学からの受講があり、1大 学当たり3名受講生があれば、それだけで360名の受講生が出る可能性があると見積もっていた。 ただし、既に実施していた対面講義(提供科目数は250科目に及ぶ)への受講生が年間30名程度 しか出ないことから、多少この想定値は緩いとの見解もあった。実際にこの予想は外れたのであ るが、その要因として考えられる課題を以下に述べる。

①連携校の既存のカリキュラム編成上、自由選択科目の履修が難しい大学が相当数ある。主に 資格取得を目指すカリキュラムポリシーを打ち出した大学にこの傾向が強い。この課題だけ は現状のままでは解消が困難であり、今後は同じような教育分野の大学間で相互に共有でき る科目を設定し、双方向ライブ型講義として実施することが望ましいと考える。

②講義実施時間帯の調整がうまく機能しなかった。各連携校では。それぞれの学内事情に従っ て異なった講義開始時刻が設定されていたので、本事業の開始に当たり「双方向コンテンツ 委員会」、「岡山オルガノン代表者委員会」および「大学コンソーシアム岡山代表者会議」等 においてライブ型講義の共通開始時刻を3パタン(午前の1コマ目、午後の1コマ目、午後 3コマ目)設定した。一部の科目はこれに依拠した時刻で実施されたが、受講大学ではこの 実施時刻の前後の開講コマへの配慮までは行われず、結果的に受講したくても困難な学生が かなり存在したようである。

③新しい遠隔教育の広報活動が十分機能しなかったこと、および履修申請期限の設定が不適切であったことがあげられる。この件は、VOD型遠隔講義にも当てはまる問題点であるが、折角、他大学の学生向けの教育提供に協力していただいた先生方の好意に応えるだけの広報活動が実施できなかった。各連携校からの要望数だけ、在学生向けの遠隔教育紹介リーフレットを作成し、新学期開始時に合わせて配布したが、必ずしも全学生にゆき届かなかった大学や、オリエンテーションでの口頭説明までは実施されなかった大学が多かったようである。

また、受講申請(登録)時期が大学毎に異なっている実態の下で、統一した申請期限を設 定したため、どうしても一番早く新学期が開始される大学に合わせざるを得ず、遅い大学で はオリエンテーションの前に締め切り日が来る矛盾が存在していた。

期	区分	配信大学	科目名	岡大	県大	学院	商大	理大	医大	医福	環大	吉備	倉芸	作陽	山陽	就実	中国	清心	計
前		岡山大	大学と社会		0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	0	2	4
	ライブ	岡山商科大	経営学特殊講義 I	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
		川崎医科大	個人・社会と医療考	0	0	0	0	2		0	0	0	0	0	0	0	0	0	2
		川崎医福大	哲学	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0	0
		倉敷芸科大	倉敷まちづくり基礎論	1	0	0	0	1	0	0	0	0		0	0	0	0	0	2
			まちづくりインターンシップ	2	0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	2
		くらしき作陽大	特別支援教育概論	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	1
			ライブ合計	4	0	0	0	3	0	0	0	0	1	0	1	0	0	2	11
沏		岡山県立大	解析学 I	0	66	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	5	0	0	73
			環境と社会	4	0	0	0		0	0	4	0	0	1	0	16	0	0	25
	V	岡山理科大	インターネット入門	2	3	0	0		0	0	3	0	0	0	0	1	0	0	9
	0		アルゴリズム入門	1	3	0	0		0	0	2	0	0	0	0	1	0	0	7
	D	心した佐四十	音楽療法概論	8	1	0	0	3	0	0	3	0	1		0	17	0	0	33
		いていている人	食心理学	9	0	0	0	6	0	0	2	0	3		0	16	1	0	37
			VOD合計	24	73	0	0	9	0	0	14	0	5	2	0	56	1	0	184
		平成23	年前期合計	28	73	0	0	12	0	0	14	0	6	2	1	56	1	2	195
		岡山県立大	音楽の鑑賞	0		0	0	1	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	3
	ライブ	岡山商科大	経営学特殊講義Ⅱ	1	0	0		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	2
		岡山理科大	岡山学	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
		環太平洋大	スポーツ栄養学	2	0	0	0	3	0	0		0	1	0	0	1	0	0	7
		倉敷芸科大	倉敷まちづくり実践論	0	0	0	0	2	0	0	0	0		0	0	0	0	0	2
		山陽学園大	宗教思想	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0		0	0	0	2
		中国学園大	現代子ども学入門	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		0	0
		ライブ合計		4	0	0	0	7	0	0	0	0	2	0	1	2	0	0	16
		岡山商科大	パーソナルファイナンス	4	0	0		4	0	0	1	0	2	0	1	0	0	0	12
仫		岡山理科大	アルゴリズム入門	0	0	0	0		0	0	1	0	0	0	0	1	0	0	2
伎 期			インターネット入門	0	0	0	0		0	0	2	0	0	0	0	1	0	0	3
			環境と社会	1	0	0	0		0	1	3	0	0	0	1	9	0	0	15
			環境考古学	0	0	0	0		0	0	2	0	0	0	0	7	0	0	9
	V	川崎医福大	睡眠学	8	0	0	0	43	0		7	0	0	2	3	21	3	0	87
	O D	環太平洋大	レクリエーション論	4	0	0	0	7	0	0		0	2	1	0	0	0	1	15
		吉備国際大	スポーツ産業論	3	0	0	2	13	0	0	6		0	0	0	1	0	0	25
		山陽学園大	現代中国論	2	0	0	0	7	0	1	2	0	1	0		2	0	0	15
		计中十	日本人の思想	0	0	0	0	8	0	0	3	0	1	0	3		0	0	15
		永天八	日本美術史b	0	0	0	0	5	0	0	3	0	1	0	0		0	0	9
		中国学園大	運動生理学	0	0	0	1	11	0	0	1	0	0	2	0	7		0	22
	VOD合計			22	0	0	3	98	0	2	31	0	7	5	8	49	3	1	229
平成23年後期合計			26	0	0	3	105	0	2	31	0	9	5	9	51	3	1	245	
				54	73	0	3	117	0	2	45	0	15	7	10	107	4	3	440

表3 平成23年度遠隔教育の受講状況表

一方、VOD型遠隔教育の受講者数に関しては、前期が6科目配信で184名、後期が12科目配 信で229名と順調な伸びを示している。ただし、科目数の増加に応じた程の伸びではないので、 科目内容の検討や広報活動の効果的な実施方法、遠隔教育の適正な受講者人数の検討など、今後 の運営上の課題と捉えている。

また、科目間での受講者数に大きな幅(2~87 名)が見られるため、受講者数の多い科目を新 しく配信する大学の学務関連事務部局に驚きと、ルーティンの処理手順とは異なる事務処理量の 増加に対して戸惑いが見られた。急遽、受講制限を掛けたいとの申し出が有ったりしたが、これ は受講申請する学生側に立った対応をお願いした。予め受講制限の設けられていた科目に対して、 一部の大学では履修申込時に受講者枠の残数が少なく立った時点で、調整を行わないまま受付を 拒否したケースが有ったようで、受講制限への対応が重要な課題として残されている。この問題 と履修申込みに対する締切期限の設定問題は、本事業を継承する大学コンソーシアム岡山の「単 位互換委員会」で引き続き検討を行うことが決まっている。

「岡山オルガノン」の補助期間を通じて取り組んできた遠隔教育の実施体験から見えてきた問 題点と課題をまとめると以下の通りとなる。

- ・遠隔教育に対応した教育制度が未整備な連携大学が多く残っている。
- ・カリキュラムポリシー上、遠隔教育の導入が困難な大学が存在する。
- ・大学毎に学年暦が異なり、履修申込みの締切日の設定が非常に難しい。
- ・遠隔教育に対する学生への広報方法や内容が大学間で大きく異なる。
- ・教職員に対する遠隔教育の効果や目的の理解を求める試みが、まだ不十分である。
- ・連携大学間での事務連絡体制が十分確立できていない。
- ・配信科目の内容の検討、および遠隔教育の質の評価体制が未整備である。

今後はこれらの課題解決へ向けて、大学コンソーシアム岡山の場において引き続き取組が進むこ とを期待したい。

4. VOD コンテンツ関係の著作権処理

新たにVODコンテンツを作成し、インターネット上での閲覧を許すシステムの運用に当たっ て、これらVODコンテンツに関わる著作権の取り扱いが、本事業の開始当初より解決すべき検 討課題として浮かび上がっていた。「岡山オルガノン」では e-Learning 委員会において著作権処 理関連の規程作成を進めてきた。平成 22~23 年度にかけて 3 回の e-Learning 委員会で審議を行 い、図1の著作権関連図に示す案をまとめた。その後、岡山オルガノン代表者委員会、および大 学コンソーシアム岡山代表者会議において承認を受け、平成 24 年度の大学コンソーシアム岡山へ の事業継承後、各連携校に対し所定の手続きを行うこととなった。

教育の場におけるコンテンツに関する著作権者・著作物としては、講義を担当する教員、講義 を撮影・編集する職員、成果物である電子メディアやファイル、画面に登場する学生、学生が作 成したレポート等の著作物、教員が講義において配布する引用文献、など多岐にわたる。現在の 著作権法においても、電子化され一般に公表されるコンテンツに関しては基本的に全て著作権が 存在することを規定しているだけで、e-Learningの場に於ける著作権に関する判例が殆どないこ とから、具体的な著作権処理の限界がよく分かっていない。そのため法的整合性がどの程度厳密 に規定できているかは不確かではあるが、大学教育連携センターおよび e-Learning 委員会の智恵 を集約した構想の概略を示す。 当初の案では、講義担当教員をVODコンテンツの著作権者とすることにしていたが、その後 コンテンツ制作費を負担した「岡山オルガノン」の代表者、あるいは大学教育センター長に集約 すべきとの考え方が表明された。国費による補助事業である「岡山オルガノン」は補助期間の終了 後、大学コンソーシアム岡山に事業継承することが予め規定されていたうえ、大学コンソーシア ム岡山が任意団体であることから、いずれにしても安定した著作権の保持者とはなれないことと、 やはり教育を行う教員、あるいは教員の所属する法人が一次著作権者となるべきであるとの結論 に達した。図1では、大学コンソーシアム岡山に事業継承した後の著作権処理関係を表している。



図1 大学コンソーシアム岡山におけるVODコンテンツに関する権利処理の流れ

図1の要点を以下に示す。

- 一次著作権者はVOD科目提供大学の法人あるいは担当講師(以下、担当教員と呼ぶ)とし、学習管理システム「まなびオルガノン」に登録されたコンテンツに関する全ての著作権を有する。登録コンテンツの大学コンソーシアム岡山における独占的利用許諾については、大学コンソーシアム岡山会長と担当教員の間で「コンテンツ利用許諾契約書」を取り交わすこととする。ただし、提供される教材に関する引用文献等の第三者著作物の著作権処理は当該担当教員が管理責任を負うものとする。
- 担当教員の講義内容をビデオ収録し、編集するe-ラーニング担当職員は成果物であるV ODコンテンツの電子メディアに対する制作者としての著作権を有するが、この権利については大学コンソーシアム岡山の会長に譲渡する旨の同意書を会長に送付する。
- 連携校の学生・教職員は、「学習管理システム利用規程」を遵守することで、インターネッ

ト上で運営される「まなびオルガノン」の利用者となれる。

- VOD科目提供大学のライブ講義を収録した際には受講学生から編集後のコンテンツの利用に関して「コンテンツ利用に関する承諾書」を提出してもらう。
- 「まなびオルガノン」の管理は、大学コンソーシアム岡山の e ラーニング担当職員が行う。
- 岡山オルガノン連携大学の教職員(担当教員を含む)が、「まなびオルガノン」以外の教育 活動に登録コンテンツを使用する場合は、大学コンソーシアム岡山会長宛に「コンテンツ利 用申請書」を事前に提出し、許可を得るものとする。
- VOD科目が担当教員からの申し出により終了する場合の処理について「コンテンツ利用 終了に伴う処理に関する内規」を定める。
- 大学コンソーシアム岡山による「岡山オルガノン」の事業継承にともなう「まなびオルガノン」の運営期間は、当面、平成24年4月から平成27年3月までとしその後の運用に関してはこの間に検討することとする。

5. 遠隔教育制度の普及・広報活動

①学生向け遠隔教育リーフレットの作成

平成23年度末に次年度向け遠隔教育紹介のリーフレットを作成し、全連携校に配布する準備を 進めた。遠隔教育の認知度アップを目指した企画であり、前年度に引き続いての取組で、岡山大 学オフィスがデザイン等を担当した。本学では、これを前期オリエンテーション時に全学生に配 布していただいた。



図2 遠隔教育紹介リーフレットの表紙と裏表紙

②ICT 活用教材作成講習会

平成 23 年度の I C T 活用教材作成講習会は、「まなびオルガノンの効果的な活用について」を テーマに、平成 23 年 11 月 10 日 (木)、岡山理科大学第11号館5階実習室で実施した。

実施趣旨としては、教職員に対して e-Learning 活用法やVOD教材作成法の講習会を開き、その手法や取組における必要性について学習する機会を設け、来年度以降も継続して実施される予定の遠隔教育に対し、ICT技術を用いた教育の拡充を図るとともに、多様な形態による教育の提供が行えるようにすることを目指した。

平日での開催にもかかわらず、連携校より教職員28名もの参加があった。

講習会では最初に、単位互換教育に関する学内制度の整備が不十分なためVOD型遠隔教育の 受講が困難な連携校が存在するようなので、この点で先駆的な取組を行ってきた加計学園関連大 学を代表して岡山理科大学から情報提供を行った。「岡山理科大学の単位互換制度について」と題 して、大学教育連携センター長本村宏より資料に基づき説明した。

続いて、「まなびオルガノンの基本操作とその活用方法」について大学教育連携センター e-Learning 専門スタッフ 岡戸真理子が実習を交えた説明を行った。前段では、本取組が独自に採 用した学習管理システム(LMS)の機能と操作方法を詳細に記載したマニュアルに基づいて解 説が行われた。引き続き実習に移ろうとしたが、LMSサーバーがレスポンスを返さない不具合 が発生し、結果的に個別実習を行うだけの時間的余裕を持つことができなかった。そのため、操 作に関する説明はプレゼンテーション画面を中心に実施したが、参加者にはLMSサーバーへの ログインアカウントを付与し、後日各自でLMSの操作体験を行うことができるよう対応策を講 じた。今回のようなサーバーの不具合は初めての発生であり、原因は現在究明中である。

最後に、「まなびオルガノンの特化した活用方法」について、岡山理科大学大学院生の井川真弓 氏より実践報告があった。現在も継続して行われているLMSの機能拡張の現状、特に携帯電話 からの学習管理システムへのアクセス機能の追加を中心とした内容であった。岡山オルガノンの 単位互換教育にはまだ携帯電話の利用を検討していないが、今後の適用可能性に期待が持てる発 表であった。

講習会を開催したことにより、「まなびオルガノン」の機能や操作方法について、連携校教職員の理解が深められ、受講学生に対するサポートの一層の充実を図ることができたと考える。

6. おわりに

平成23年度末で文部科学省の戦略GP事業「『岡山オルガノン』の構築」の補助期間が終了した。 コアプロジェクトとして岡山県内の15大学が連携し、地域に貢献できる人材育成を目指した教育 共有事業を立ち上げ、実現させてきたのであるが、大学コンソーシアム岡山という基盤が存在し たからこそ、このような短期間にライブ型とVOD型の2方式による遠隔教育システムの運営が 可能になったのであると考える。

この3年間は総額1.8億円を越える国費援助に応えられる事業の構築を目標とし、多くの人々 の力と智恵を結集して取組を進展させてきた。実質2年間での遠隔教育システムの立ち上げに関 しては、まだまだ残された課題も多いが、平成24年度から無事大学コンソーシアム岡山に事業継 承ができ、少しずつではあるが「岡山オルガノン」の存在意義が連携校の間に浸透しつつあること が実感できるようになってきた。

「岡山オルガン」の事業は、学士力、社会人基礎力、地域発信力の融合を目指した教育の構築と

いう大きな柱に沿ったものであり、遠隔教育以外にも様々な事業展開を行った。ここでは遠隔教 育に絞った報告を行った。

今後は新しい事業展開の方向として次のような遠隔教育システムの活用課題を提案し、検討を 進めていければと考えている。

- 対面型教育の補助システムとして活用
 可視化教材の提供システム :
 復習の補助システム: 岡山県立大学の適用例
 課題提供と返送支援システム:
 補講支援システム: 岡山理科大学では使用
- 社会人教育への適用
 吉備創生カレッジでの講義の一部を収録し、会員へ有料提供
- 高大連携ツールとして活用
 インターネットを用いた大学-高校間の情報交流システム
- 大学間連携への活用
 TV会議システムの利用範囲を拡大し、県内大学間の連絡手段(会議支援システム)として活用

本事業の実施に当たり、本学情報処理センターにはライブ型授業の受講室の提供、およびMC U等の機器設置場所の提供など、多大なご協力をいただいたことに対し感謝いたします。また、 学習管理システムの運用に関して、多くのご指導とご協力をいただいた総合情報学部情報科学 科・大西研究室の院生・卒研生諸君、および加計サイバーキャンパス関係者の方々にも謝意を表 します。

参考文献

岡山オルガノン大学教育連携センター. (2012). 事業報告書(平成 21 年 9 月~平成 23 年 9 月). 岡山オルガノン公式ホームページ. http://okayama-organon.jp/ まなびオルガノン. https://manabi-organon.jp/ 大学コンソーシアム岡山. http://www.consortium-okayama.jp/ 文部科学省ホームページ. http://www.mext.go.jp/

LMS「MOMOTARO」における e ポートフォリオ

時岡貴幸 大西荘一 大倉将人 久山真宏 鈴木陵平 高杉祐太 岡山理科大学大学院 総合情報研究科 情報科学専攻

1. はじめに [1]

LMS「MOMOTARO」とは、岡山理科大学情報科学科大西研究室で開発された学習管理 システムである.現在、加計学園が管理している「加計サイバーキャンパス」(図1)、大 学コンソーシアム岡山が管理している「まなびオルガノン」(図2)、吉備国際大学が管理 しているの「メディア授業」、岡山理科大学情報処理センターが管理している「学習管理シ ステム」に利用されている. MOMOTARO に近年注目されている e ポートフォリオの導入 を検討した.

MOMOTARO 自身に e ポートフォリオ機能を組み込むには相当な開発労力と時間を要す るため、開発の効率化を考えオープンソースソフトウェアで比較的広く利用されている Mahara と連携する設計とした.



図1. 加計サイバーキャンパス

図2. まなびオルガノン

2. e ポートフォリオとは

ポートフォリオは個人のプロフィールや成果物を収集・整理したファイルである. 主 に紙媒体のポートフォリオであったが,近年はデジタル化されてきている.こうしたデジ タル化されたポートフォリオは e ポートフォリオ,デジタルポートフォリオ,もしくは電 子ポートフォリオと呼ばれる.従来の紙媒体のものよりもインターネットを利用できる環 境で扱いやすく,動画やハイパーリンク等も利用出来る.また,ポートフォリオを公開す ることも可能になっており,必要な情報の検索が容易になる等のメリットがある.

文部科学省の調査によると e ポートフォリオ導入により,人の意見に対して自分なりの 意見を持つ,自己理解が深化,表現力の向上,計画力の向上,積極性を高める,学習意欲 を高める効果があるとされている [2].

3. Mahara の機能と学習効果 [3][4]

Mahara はオープンソースソフトウェアの e ポートフォリオシステムである. e ポートフ ォリオシステムに Mahara を選んだ理由としては, MOMOTARO と同じく PHP 言語と MySQL で開発されており MOMOTARO と親和性が高いからである. また, 日本語ドキュ メントも比較的充実している. Mahara は必要に応じて言語パック, テーマ, プラグインを 作成し, システム上で切り替えることが出来る.

Maharaと連携することにより MOMOTARO にはなかった以下の機能を利用することができ、教育効果の向上が期待できる.

- (1) ページの作成機能
 - 機能:受講生が登録した情報,集めたファイルを整理して,ブロックとして配置しペ ージを作る機能である.
 - 効果:ページを作成する過程で、学習内容の再確認を行う、自分の考えを取り入れて まとめる等が期待される.
- (2) ページの公開機能
 - 機能:受講生が作成した自分のページを選択したユーザ,グループもしくは Mahara 全体に公開することが出来る.
 - 効果:公開された他の受講生のページを閲覧することで、人の考えを知り自分の学習 に取り入れることが出来る.また、自身の学習成果を公開することにより他か らの評価が得られ考えが深化する.
- (3) フォーラム機能
 - 機能:グループの持つ機能の一つであり、リッチテキストで投稿できる掲示板の様な ものである.
 - 効果:表や画像を内容に含めることが出来るので、プレーンテキストより分かりやす く説明することが出来る.
- (4) メッセージ機能
 - 機能:メッセージ機能のメッセージは送った相手だけが見ることが出来る. 効果:1対1の受講生間のコミュニケーションが可能になる.
- (5) 検索機能
 - 機能:Mahara に蓄積されたファイルとページに利用者は任意のタグをつけることができ,つけたタグの名前で検索をすることができる.ページの検索ではタイトル,

説明文,タグの登録情報から検索が行える.

効果:目的の学習成果のデータを見つけやすい.

(6) エクスポート機能

機能:受講生が作成したページを自身のパソコンにダウンロードできる. 効果:学習成果の整理がしやすい.

(7) プラン機能

機能:スケジュールの登録を行い,完了したものにチェックを付けることができる. 効果:課題の提出忘れの予防や,過去に行った学習活動の確認が出来る.

4. MOMOTAROとMaharaの連携機能

MOMOTARO から前述の Mahara の機能を利用できるようにするため,連携機能の開発 を行った. Mahara はオープンソースの e ポートフォリオシステムであり,今後も開発が 続き新バージョンの出ることが予測される. バージョンアップする毎に Mahara の改造部 分の書き直しが必要になれば大きな負担になるため, Mahara のソースコードに変更を加え ないことを意識して, MOMOTARO 用のプラグインを開発した.



図3. eポートフォリオの項目を追加した MOMOTARO

Mahara へのアクセスを行うための Mahara へのリンクを MOMOTARO に作った. 図 3 の「e ポートフォリオ」の項目をクリックすることで, Mahara にログインできる.

連携機能として以下の開発を行った.

(1) 自動アカウント登録・更新機能

図3のeポートフォリオをクリックしたときにログインしている MOMOTARO のID, パスワード情報が自動的に Mahara に送られ登録できる.

Mahara は MOMOTARO から転送された登録情報をユーザアカウントにして連携 することになる. すなわち Mahara が独自にアカウント作成した場合は, そのア カウントでは MOMOTARO と連携できない. MOMOTARO の ID と Mahara の ユーザ名を関連付けて連携を行っている. MOMOTARO から Mahara にアクセス すると、Mahara 内のユーザ名にアクセスした MOMOTARO の I Dがなければ自 動的に Mahara にその I Dでユーザ名が作られる. (図4)



図4. 自動アカウント登録・更新

(2) シングルサインオン機能

MOMOTARO へのログインのみで Mahara にアクセスできる.

(3) 科目履修データの登録・更新機能

(1)と同様,自動的に MOMOTARO の科目履修データがMahara に送られ登録 できる.

(4) 教材の収集機能

MOMOTARO で教材を登録したときに自動的にその教材が Mahara に送られる.

(5) 提出物の収集機能

MOMOTARO で出席カードや課題を提出したときに自動的にそれらのデータが Mahara に送られる.

提出物		
第1回出席カード 【第1回 講稿概要の説明】制限時間:制限なし 問題数:5		
この講義はLIVEで受講しましたか? (必須)		
Oyes ONo		
(01) 質問内容 授業の難易度を選択してください。(易しい1~5難し い) (アンケート) (必須)		
○易し) ○やや易し) ○入つう	HTML	
C やや黄色しい C 舞曲しい	第1回出席カード【第1回 講義概要の説明】	
(02) 新しい発見があれば記述してください。 (アンケート)	質問項目	回答内容
	この講義はLIVEで受講しましたか?	LIVE
(03) 理解できなかった点や質問などがあれば記述してください。 (アンケート)	(01) 質問内容 授業の難易度を選択してください (易しい1~5難しい)	<u>易</u> し い
	(02) 新しい発見があれば記述してください。	
(U4) その他感想などを記述してくたい。 (アンケート)(必須)	(03) 理解できなかった点や質問などがあれば記述してください。	
	(04) その他感想などを記述してくだい。	
(06) インターネット社会において重要なことはなんだと考えます か?(考え方は人それぞれですから、いろんな側面から考えて記述し てください)	(05) インターネット社会において重要なことはなんだと考えますか?(考え方は人それぞれですから、いろんな側面から考えて記述してください)	
(アンテート)(25頃)		
確認画面 リセット	発了	

図 5. MOMOTARO の出席カード 図 6. Mahara ブロック



両システムの文字コードとデータフォーマットは異なっている。例えば、出席カードの 収集機能では図5のような出席カードを MOMOTARO で提出すると、自動的に HTML フ オーマットに変換し Mahara へ転送される. Mahara のページ作成でブロックとなった出 席カードが図6である. MOMOTARO の文字コードは Extended Unix Code(EUC)であ り、Mahara は Unicode である. 連携機能はこれらの変換を行い Mahara にデータを転送 する (図7).



図7. 連携機能を用いたデータの流れ

連携機能の導入により, Mahara のログインフォームの入力や提出物のアップロード等の 手間を省くことができ、さまざまな Mahara の機能を利用できる.

5. 今後の課題

今回, MOMOTARO と Mahara の連携を可能にしたことにより. 比較的短期間で

MOMOTARO に e ポートフォリオ機能を組み込むことが出来た.しかし,現状の連携機能 では十分に教育効果が向上するとは言い難い.今後,さらに MOMOTARO と Mahara の連 携による教育効果を検証し、従来個別に開発されてきた LMS と e ポートフォリオシステム の連携について機能分担等,研究を進める必要がある.

参考文献

[1] サイバーキャンパス https://cyber.kake-group.jp/

[2] 平成22年度 ICTの活用による生涯学習支援事業,文部科学省ホームページ

http://www.mext.go.jp/component/a_menu/education/detail/__icsFiles/afieldfile/2011/07/29/1308644_5.pdf

[3] Mahara ePortfolio System http://mahara.org/

[4] Mahara 日本語ドキュメント

https://wiki.mahara.org/index.php/Mahara%E6%97%A5%E6%9C%AC%E8%AA%9E%E 3%83%89%E3%82%AD%E3%83%A5%E3%83%A1%E3%83%B3%E3%83%88