

分子分光学 (20220516) **M:** 以下は宮本のコメント

質問カードには「良い質問」を書くのであって、ふと思いついた疑問や教科書を読んでいてあなたが理解できなかった点についての質問を書くのではない。この違いを理解していないと思われる質問が多数あるようだ。

16s2052: 群論の対称要素を考える際のモデルでは、分子の表裏は無視していましたが、今日は原子価軌道の $\pm$ や水素原子の番号など、表裏も考えていましたが結果は変わりませんでした。こういった点が化学において群論を使うことの便利なところなのでしょうか

M: ちょっと意味が分かりません。“結果は変わりませんでした”とは、何のことを言っているのか？

19s2053: 既約表現の数と類の数が等しいのはどうしてですか？ **M:** 大直交性定理

$$\sum_R [\Gamma_i(R)_{mn}] [\Gamma_j(R)_{m'n'}]^* = \frac{h}{\sqrt{l_i l_j}} \delta_{ij} \delta_{mm'} \delta_{nn'} \quad (1)$$

から

$$\sum_{p=1}^k \chi_i(R_p) \chi_j(R_p) g_p = h \delta_{ij} \quad (2)$$

が導出できる。詳細は参考書 (*1) を参照。

(*1) F.A.Cotton, “コットン 群論の化学への応用”, 丸善, 東京 (1980), pp.83-88.

20s2029: 任意の基底を基に作った表現行列がどのような規約表現を含むか調べるにはどうすればいいですか **M:** 講義内容を全く理解されていないようで残念。// 簡約

20s2030: 既約表現における A や B の違いはなにが理由となっているのですか？ **M:** 参考書を読んで勉強すればいいのでは？ // A, B は 1 次元 (B は C_n に対して反対称), E, T (または F) はそれぞれ二次元と三次元の表現。以下次元数が増加するにしたがって G, H, ... とアルファベット順に。添え字は 1, 2 が主軸に直交する C_2 軸に対して対称か反対称か。' (プライム) と " (ダブルプライム) は σ_h に対して対称か反対称か。u, g は i に対して対称か反対称か。

20s2034: 軌道の形が未知の分子についても群論を適用することができるのか **M:** ちょっと意味不明。“群論を適用する”って、一体全体、群論をどう適用するという話なのか？