

分子分光学 (20240415)

M: 以下は宮本のコメント

22S2014: H₂O の C₂ と分子を置いた面に垂直かつ結合角を 2 等分するような鏡を置いた時の σ など結果が同じ対象要素を顧慮しなければいけないのはなぜなのでしょう？片方の要素が存在すればおのずともう片方の要素も存在することがわかるので、構造を決定するための要素としては考慮する必要のないことに思えます。

M: 文章の意味がよくわかりません。“結果が同じ対象要素を顧慮”するとは、何のことでしょうか？言葉づかいが雑なために、論理的に考えることに不自由しているように見受けられます。// 水分子 H₂O の三つの原子の位置 (あるいは三つの原子の s オービタル関数) のような非常に単純な基底では、複数の対称操作が同じ結果になる (または表現行列が同じになる) ことは十分にありえることです。しかしもう少し複雑な基底を考えれば、たとえば水分子でも便宜上表と裏に別な色を塗ってあることを考えれば、C₂ と σ は異なった結果になります (異なる表現行列になります)。つまり、ここで問題にしているのは“対称操作”であって、“動かした結果”ではありません。動かす規則と動かした結果を混同しないように。// それから、“片方の要素が存在すればおのずともう片方の要素も存在することがわかる”は、常に成り立つことでしょうか？ ((C_{2v} { E, C₂, $\sigma(xz)$, $\sigma(yz)$ } と C₂ { E, C₂ } とは、異なる点群です。))

22S2023: 回映軸の S₄ は C₄ と σ_n が同時に起こっていると考えても良いのでしょうか？

M: 自分で判断できないのはなぜなのでしょう？良いか悪いかは、他人が決め、自分はそれに盲目的に従うものなのでしょう？神託なのでしょう？暗記事項なのでしょう？// また、言葉の使い方が雑です。あなたがここで用いた“同時”は、具体的にどいう意味でしょうか？初期位置から最終位置へ向かって、原子が動いていく経路をどのように考えていますか？あなたは、分子の初期配置に対して、回映の操作後に各原子がどこに移動するかを考えると、そのように考えるのですか？// 講義中の私の説明は、「90 度回転した 後でその回転軸に垂直な平面で鏡映する」です。たいていの教科書でも、回映軸をこのように説明していると思いますが、それではいけないのでしょうか？なおこれは普通の意味で“同時”ではありませんね。

22S2031: S₄ と C₂ はプロセスは違えど同じ結果になっていると思っています。かつてこの二つを区別してみてもどのようなことを発見できましたか？

M: 意味が分かりません。“同じ結果”とは、何と何とがどのように同じだというのでしょうか？// 講義では C₂ については H₂O で、S₄ については C₄H₄Cl₄ で説明しました。これはそもそも全く異なる分子ですよね？“結果が同じ”と言われても、全く理解できません。軸まわりの回転の角度だけを見れば、S₄ と C₂ はそれぞれ 90 度と 180 度で、全く違うと思うのですが。“結果が同じ”と言われても意味が分かりません。

22S2036: 回転の向きは決まっているのですか。また、もし決定しなければならないなら、正負の記号で区別するのですか。

M: 自分で判断できないのはなぜなのでしょう？ // 三角関数を初めて学んだ時、原点に中心を置いた単位円を考え、その円周上を点が動いていて、その点の位置を角度で表して～のとき、回転の向きは決まっていたか？