

分子分光学 (20250421) M: 以下は宮本のコメント

21S2006: 単原子分子の対称性はどのように求めますか？

M: 別に、普通に求めればいいのでは？ // 球対称なので K_h

22S2014: なぜ空間群では回映軸を考えないのでしょうか。また、昨年度の講義では群の定義の前に対照操作について取り扱ったと思うのですがなぜ今年度は先に群の定義について取り扱ったのですか。

M: 決めた人に聞けばいいのでは？ 私は誰だか知りませんが、慣習なのだからしょうがないのでは？ // 後半については、特に気にしていません。

23S2021: 2つの操作を連続して実行する際の対称操作の集合が群とありましたが、群であるために必要な、「逆元」の具体例を思いつかなかったのですが、逆元は例えば何がありますか？(水分子の場合) また、共役について、 $C^{-1} \cdot A \cdot C = B$ とありましたが、この操作をした時に $A=B$ になるようにしか思えないのですが、 $A \neq B$ になるような要素 (A, B, C, C^{-1}) は具体的にどのようなものがありますか？

M: 定義に基づいて考えればいいのでは？ そうでなくても、逆の操作は簡単では？ 回転なら逆回転、鏡映ならもう一度鏡映、など。具体的な点群の話なら、積表を考えてみてもいいですね。// C_{2v} では、ひとつの対称操作がそのままひとつの類を作っています。 C_{3v} なら、お望みのことが起こるでしょう。

23S2032: 対称操作を行うということはエナンチオマーやジアステレオマーになるという解釈でいいのでしょうか。また、回転軸 S_n を持たない分子はキラルであるということでしょうか。

M: 大体よさそうな感じがしますが、“操作を行う” ことと“成る” ことは、微妙に違う気がします。// 普通に回映軸を考えると、 n は 2 よりも大きいものを考えます。しかしあえて $n=1$, $n=2$ を考えれば、前者は鏡映 σ で後者は反転 i ですね。

23S2049: 仮にある点群が可換群であるならば、そうでない点群と比較して何か特徴は現れますか。

M: 見られるかもしれませんが見られないかもしれません。私は特に考えたことはありません。

23S2050: 分子の性質は行える対象操作ごとに決まりますかそれとも点群の帰属によって決まりますか

M: 対象操作とは？ 対象をどのように操作するのでしょうか？ // もしも“対称操作” のことであれば、点群の帰属と同じことでは？

23S2053: 類の定義は似た操作であること、と記載されている書籍は、間違ったものであると本日先生に教えていただきました。しかしこのとき、本来の定義である、操作 A に逆元と単位元をかけて、ある操作 B になるということは、 A と B が似た操作である必要はあるのでしょうか。分子における対称操作、逆元と単位元というのが、あまり理解出来ていないため、そちらについてもお教えいただけると幸いです。

M: 微妙にカン違いしている気がします。// 単位元と逆元について、復習が必要では？ // 具

体的な類の例を見れば, “似た操作” という表現に違和感はありません. しかし逆は真ならずで, 似ているからといって類を作るとは限らない.