

分子分光学 (20250526) M: 以下は宮本のコメント

21S2006: 表現行列を簡約した結果、規約表現を引くことは考えられますか。

M: 意味不明. “規約表現を引く” とは、何をどうする事ですか？

22S2014: trans-ブタジエンの炭素の $P \pi$ オービタルはその表現行列の中に含まれる既約表現に相当する軌道が含まれている既約表現の数だけありましたが、 H_2O の H の $1S$ オービタルや O の $2P_x$ 、 $2P_y$ 、 $2P_z$ オービタルにも同様に表現行列内に含まれる既約表現に相当する軌道が含まれる既約表現の数だけあるのでしょうか。またそれはどのような軌道なのでしょうか。

M: 簡約の原理から考えて、可約表現の次数と (1 次元の) 既約表現の数または既約表現の次数の和は一致しているはずです。// 原子オービタルは、たいていそのまま既約表現の基底になっています。そういう風に原子オービタルを選ぶのが普通です。23S2049 も参照

23S2021: C_{2v} 水分子の H の $1S$ オービタルを基底とした時の表現行列について、 E と $\sigma_{v'}^{yz}$ の表現行列が全く同じに見えるのですが、この二つの違いや、見分け方などは存在するのでしょうか？

M: $\sigma_{v'}^{yz}$ の表現行列の二乗が E の表現行列になっていることから、区別することができます
:-p

23S2049: trans-ブタジエンの炭素の p_z オービタルを基底としたとき、 Γ は π -分子オービタルの対称性と対応していましたが、水分子の酸素原子の $2p_x$ 、 $2p_y$ 、 $2p_z$ オービタルや、各原子の微小変位ベクトルを基底としたときの Γ は、何かと対応するのでしょうか。

M: 22S2014 の後半も参照。// 原子の動き方、それによる分子の変形の仕方。

23S2050: 一次元の箱の中の粒子と π 分子オービタルの対称性の話がありましたが、これは他の点群についても同じようにグラフと図を対応させることはできますか

M: “グラフと図を対応させる” とは、具体的に何をどうする事でしょうか？ 自分で考えてみれば良いのでは？ // 特定の分子または特定の点群の場合にだけ成立つ (非常に特殊なモノ) と考えるのは、何故でしょうか？ 科学とは、そういう考え方なのでしょうか??

23S2053: 今回の授業では、比較的簡単な水分子をモデルにして、それぞれの対称操作を考えて簡約しましたが、実際の研究上でも同じようにひとつずつ丁寧に考えているのでしょうか。それとも対称性を調べて検索できるようなソフトなどがあったりするのでしょうか。

M: よく考えてみましょう。分子の種類は、いくつあるのでしょうか？ さらにある結合まわりで官能基が回転するなどの配座の違いまで考えると..... そんな状況で、ある程度有用なデータベースを構築できるでしょうか？ 毎回判定するソフトだとすると、分子の構造をどうやってソフトに入力すればいいのでしょうか？ 例えばアンモニア分子について、 C_3 の対称要素があると判定してもらえるように原子の座標を入力することは可能だろうか？ と、苦労している間に、ちゃちゃっと考えた方が速いのでは？