

分子分光学 (20260420) M: 以下は宮本のコメント

22S2015: 錯体化学で習った表とは違った形式の表だったのですが、なにか別の活用法があるのか。

M: 意味不明な質問です。// “錯体化学で習った表” とは何ですか？ 錯体化学 (太田先生担当) の教科書 (長谷川靖哉, “錯体化学”, 講談社 (2014)) には, そもそも積表など掲載されていないようですし, シラバスのリンク先にも積表はなさそうです。一体全体, どんな形式の積表を見たのでしょうか?? // “別の活用法” とは, “何と別” のことでしょうか? 積表なので二つの要素の積がどうなっているかを示すもので, 例えば小学校の九九の表みたいなものです。そしてこの表も道具の一種ですから, 工夫して上手に使えばいいのではないのでしょうか? この様に使わなければイケナイなどという規則・法律などありませんので。日常でも道具を当初の目的・作成意図とは異なる使い方をする例はいくらでもあるのではないのでしょうか。「温度計を用いて建物の高さを測る〇〇通りの方法」なんて有名ですね :-p

23S2011: 群の名称の付け方がわかりません。水分子の群の名称は「 C_{2v} 」ですが、4つの対称要素があるのになぜ「 C_2 」と「 v 」のみで表せるのでしょうか。

M: 教科書 pp.492-493 に簡単に書かれているが, 簡単すぎですね。そういう時には参考書を読んで勉強すればいいのでは? // もちろん, この講義でも後ほどその件にふれる予定です。

23S2022: 対称操作や対称心などを見つけることの目的が何か気になりました。

M: そうですか, しかしこれはあなたの感想であって質問になっていませんね。// 分子 (物質) の性質を整理して理解すること, 予想することが目的。

24S2002: いずれかの回転軸操作が成立する分子の場合、鏡映操作は必ず成立しますか

M: 自分で色々な分子や図形を考えてみればいいのでは? 例えば表裏が異なる色の巴 (三つ巴) とか。// 点群がどんな対称操作を含んでいるか, 指標表を見て色々調べてみればいいのでは? (もちろん, 指標表が何であるか, どのように見ればいいのか等は, まだ講義で説明していないことは承知しています。しかし, 興味のあることを自主的に勉強するのが大学生でしょ?)

24S2009: 恒等操作 E は何も変化を与えない操作ですが、分子には元の形があるのに、なぜ点群の対照操作として定義する必要があるのでしょうか?

M: 対照操作は対称操作の誤りでは? // “分子には元の形があるのに、なぜ点群の～ (圏点は引用者)” のところの論理がわかりません。なぜ「分子に元の形があるならば, 恒等操作を対称操作として定義する必要がない (質問文はそのように暗示していると読める)」と考えたのでしょうか? // “群” には単位元が必要だから。

24S2012: 対称操作の C_n によって回転角度が分かることと、VSEPR 理論の電子反発による原子間結合の角度の予測は関連させることが出来ますか

M: 微妙に誤解の予感。“回転操作 C_n により回転角度が分かる” には違和感がある。むしろ逆で, 結合角が分かっている (決める) から, C_n の対称操作・対称要素が決まる。// 例えばベンゼンは正六角形だから面外方向に C_6, C_3, C_2 が存在する。もしも 1,4 位の炭素の結合角が広がり, 逆に 2,3,5,6 位の炭素の結合角が狭くなれば (つまり構造が決まれば), もはや C_6, C_3 は存在せずに C_2 だけが存在することになる (対称操作・対称要素の存在非存在が決まる)。// 分子の構造を決めたければ, 推定したければ, VSEPR に基づいて考えたければ考えればよい。分子の概形が与えられれば, 対称性を考えて点群に帰属することができる。

24S2036: 一つの炭素中心にそれぞれ別々の置換基が結合しているキラルな分子は、E のみを対象要素にもっていると考えられる。教科書第 12 章の冒頭 487 ページでは群論を使えば分子の様々な性質を導いたりすることができるかと書かれているが、このような対象要素が E のみの

分子についても群論は役立つのだろうか。

M: 対象要素ではなく 対称要素 では? // 対称要素 E しか持たないという情報は, その分子の構造の特徴をあらわしているのでは? つまりキラルな構造の分子であるとわかる. ($S_1=\sigma$, $S_2=i$ であることを含めたうえで, S_n を持たなければキラルであるといえる.)

24S2040: 群であるための条件に要素間の演算が定義されているとありましたが, 点群の演算に値するものは対称操作の合成であると考えました。対称操作の合成は乗法記号 (\times) を用いて示されていましたが, これは対称操作の合成が演算とは厳密に言えないが便宜上乗法記号を用いているだけで厳密には乗法とは異なるのでしょうか? それとも乗法であると断言できるのでしょうか?

M: そもそも $a * b = c$ は, 二つの要素から一つの要素を得る演算 $*$ なので, それを合成と呼ぶのであれば必ずそう言えます。また逆に言えば, 演算と言えない合成はあり得ない。// 便宜上の “ \times ” ではなく本当の乗法だとしたら, 一体全体どんな計算をするつもりなのでしょうか?

24S2054: 対称操作の例として取り上げた水と同様の構造を持つ分子, 例えば二酸化窒素などは例外なく C_{2v} の構造を持つのか?

M: 自分で考えてみれば分かるのでは? // 水と同様の構造を持つ分子が, 水の C_{2v} と異なる構造を持つ可能性があると考えているのはなぜだろうか?