

分子分光学 (20260511) M: 以下は宮本のコメント

- 22S2015:** 相似変換がよくわからなかった M: そうですね. しかしこれは質問ではありませんね. // 分からないことがあれば, 教科書や参考書で調べればいいのか?
- 23S2052:** 群の表現では抽象的な群の要素を行列として表しますが, 行列に置き換えることでどのようなメリットが生じるのでしょうか? M: 具体的な立体図形を空想上で考えていじりまわしたりすることなく, 抽象的な単なる行列の代数という計算で, すなわち機械的な操作だけで, 行列の計算方法を知っている人なら誰でも何時でも必要なことを正しく得ることができる. これが数学というツールを使う最大のメリット. // 24S2009 参照
- 24S2002:** エタンの対称操作を考える際 Newman 投影式を活用したように, 対称操作を考える際複数の表記法を活用することはよくありますか M: よくあるかどうか, 私は頻度を数えたことが無いので, 分かりません. // あなたにとって, 必要なときに必要なものを有効に活用すればいいのでは?
- 24S2009:** 群論の行列と普通の線型代数出てくる行列では何か違いはあるのですか? M: 何のために“行列”というツールを使うと思っているのだろうか? もしも時と場合によって取扱い方・振る舞い方が異なる行列があったら, それらをまとめて“行列”という同じ名称でくくる必要性・必然性があるだろうか? // 例えばリンゴと瓶に入った水のように異なるものに対して, 共通の数値という抽象的な概念を適用するから, どちらに対してもその数量的な扱いを共通の算術的操作によって行うことができる. 何時でも何処でも誰にでもできる. 扱うモノごとに異なる計算手順 (秘術) が必要なわけではない. それが人類の文明というものだ. 科学史を勉強すればいいのでは? // 23S2052 参照
- 24S2012:** エタン以外にも一般的な形状から点群を求められる化合物はありますか M: 一般的な形状であろうがなかろうが, フローチャートに従って点群を求めればいいのか? 必ずどれかのゴールに到達するので, 一般的な形状かどうかなど, 関係ないのでは?
- 24S2036:** 炭素は  $sp$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$  混成軌道をとるが, 相手と結合をつくる時には必ず混成軌道をとっているのだろうか. どんな場合に混成軌道をとらないでいるのだろうか. また,  $s$  軌道と  $p$  軌道からなるもの以外にも混成軌道はあるだろうか. ある場合には, そのような混成軌道からなる結合を持つ化合物にはどんなものがあるのだろうか. M: 混成軌道とは, 現代の言葉で言えば LCAO により構成されたオービタルなのだから, MO を LCAO-MO として構成する限り必ず AO の混成を考えていることになる. したがって  $sp^n$  混成に限っても, 混成の程度  $n$  は  $0 < n \leq 3$  の間で無限に考えられる (!) //  $ML_6$  の様な六配位八面体構造が正八面体ならば 6 本の等価な結合があることになるが, 等価な 6 個の AO は無いし  $s$ -オービタルと  $p$ -オービタルの数の合計は 4 なので.....
- 24S2040:** 共役な要素については理解できたのですが, 共役な要素どうしを考えることは実際の研究においてどのように活用されているのですか M: どんな風に活用できるか, 自分で想像してみればいいのか? 新しい活用方法を考えてみればいいのか? // “実際の研究における活用”って, 具体的に何を想定しているのだろうか? 例えば  $C_{3v}$  のアンモニア分子を, 主軸まわりに 120 度回してから反応させるのと 240 度回してから反応させるのとで, 生成物が異なるのか言うつもりなのだろうか? そもそも分子に対する対称操作自体が, 操作の前後で同種の原子がピッタリ重なる様な操作 (言い換えれば, 動かしたか動かしていないか区別がつかない動かし方) なので, そのような対称操作によって分子の性質が変化するわけではない. それにそもそも現代の科学で, そのような精度で化学反応を制御することはできないし, 実用的な分量の生

成物を得るための方法もない. // 共役な操作は類を形成するので, 指標が同じなので計算が楽  
:-p.

**24S2054:** 群論の類に恒等操作の  $E$  がありました, 単一の対称操作でも共役になるのでしょうか?

**M:** 共役の定義を復習する必要があるのでは? //  $C^{-1}AC = B$  となる時,  $A$  と  $B$  は共役であるという ( $A, B, C$  についての重要な制限・限定は, ここでは省略). // なぜ “共役” という概念が必要なのだろうか? ( $0 \pm 0i$  を複素共役な数 と言うか? 言う必要があるか?)