

分子分光学 (20210412) **M:** 以下は宮本のコメント

18s2010: 対称操作単体でなく群として分子の対称性をみる利点はあるのか **M:** σ_v があるかどうかだけでは, 水分子 H_2O とアンモニア分子 NH_3 の形の違いを区別できない.

18s2014: 群の定義についてですが、定義の (0) から (4) までをたどりながら反例を見つける方法が最適なのでしょうか。 **M:** 最適も何も、他に方法があれば教えてください。// てゆーか, “定義” って, o そう使うものでしょ.

19s2031: 群論は分子の形や対称性で用いられているとありましたが、他に用いられているものはありますか? **M:** ガロアは, 5 次の代数方程式の解の公式が無いことを証明するために群論を発見 (?) した.

19s2039: アセチレン分子の対称性を考えると C-C 間の π 軌道を考慮するかしないかで結合軸上の回転軸の n の値が変化すると考えたのですが、分子の対称性を考えるとき π 軌道やローンペアの扱いはどのようになるのでしょうか。 **M:** カノニカルな (正準の) 分子軌道は, 分子の属する点群の既約表現に属する. // アセチレンの π 軌道は, 二重縮重しているので, それらの任意の重ね合わせもまた π 軌道と言える.