

群論

next page →



1. 点群

点群とは

分子には様々な形がある。対称性に関しても様々なものがある 群、とはまた別の機会に

また表記として $X = V$ というような表記を用いて X が点群の名前であり、 V はその群の要素(対称操作)の集合である。例 C_{2h}, C_{nv}

2. 点群の種類

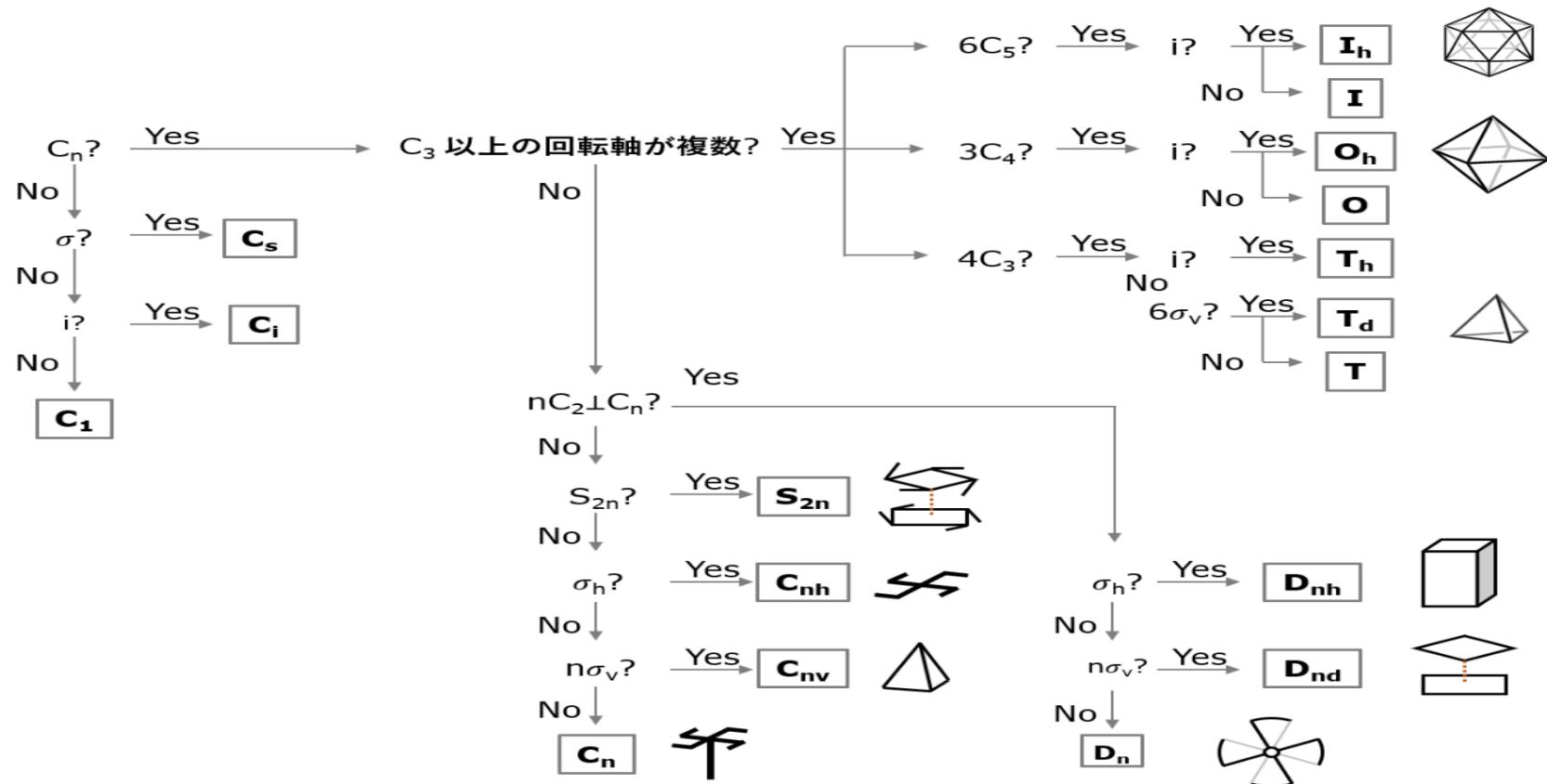
点群は、分子がどのような対称性を持っているかという観点からグループ分けされたもの 対称性の種類は以下の
ようなものがある

1. 対称軸(回転軸)
2. 対称点(回転点)
3. 鏡映面(回映面)

ここで挙げた対称性の種類は、対称操作にあたるものである。与えられた形から、これらの性質を持っている
かを考えてその形がどのような点群に属するかを考えていく

フローチャートから考える

分子の点群を帰属する方法として、以下のようなフローチャートがある。この見方を覚えることで、対称性の分析の仕方を身につける 注意するべき点としては、異なる原子は違うものであると考える、ということ。たとえば、 CH_4 と $CHBrCl$ は全く点群が異なる。



1. 主軸になる回転軸を探す

主軸とは、たとえば理想的に作られたプレーンのドーナツは、

1. No $\rightarrow C_1 \text{ or } C_i \text{ or } C_\sigma$
2. Yes \rightarrow 選択肢いっぱい

既約表現

規約表現は点群の対称操作をまとめて、それを行列表現したもの

例えば D_{2h} の対象操作は $\{E, C_2, C'_2, \sigma_h\}$