２．錯体の対称性　（島津省吾）

群論入門

・分子の立体構造を理解し、分類するために必要な手段
・分子内の化学結合は軌道の対称性に大きく規制されている
　対称性が一致しないと結合形成できない

群論
Evariste Gallois (仏1811-1832)
21才で決闘で死亡。決闘前夜に記した手紙に「ガロアの法的式論」の中に記述されていた。

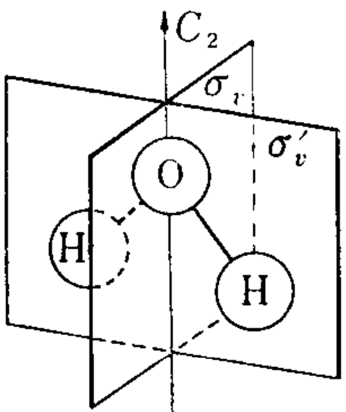
分子軌道

対称性 ---　定性的な解釈
波動関数（を用いた量子力学計算）--- 定量的な解釈

点群
Arthur M. Schoenflies(独)は、群論を用いて結晶構造を研究した。1891年に230種の空間群の理論を大成させた。この理論で点群記号を用いた。

例　水分子形状を分析して、その対称性分類したい（＝点群の決定）
方法
１．対称要素を探す

$\left.\begin{array}{l} C_2 \text{　軸} \\ \sigma\text{、}\sigma'\text{面} \end{array}\right\} \Rightarrow$ 点群　C_{2v}　（Schoenflies点群）



H_2O

対称要素

対称：変換に対して不変であること
　　　対称の操作をすると物体（図形）は、変換後も変化しない

対称要素	記号	対称操作
恒等操作	E	そのままにしておく
直線　固有軸	C_n	軸の回りの回転（2π/nだけ回転）
非固有軸	S_n	回転と反射の組合わせ（ 2π/n＋σ_h）
平面（反射面、鏡面）	σ	σ_v：主軸を含む対称面（v：vertical） σ_d：主軸を含み、かつ主軸に直行する軸を二等分する対称面(D_n対称以上に存在, d：dihedral) σ_h:主軸に垂直な対称面(h: horizontal)
点（反転中心、対称心）	i	1点を通じての反転

主軸：C_n 軸の内、最も nの大きいC_n 軸のこと
n＝軸の回りにn 回まわすともとに戻る

点群記号	群の要素（対称操作）	群の位数(要素の数)
C_1	E	1
C_s	E, σ	2
C_i	E, i	2
C_n	$E, (n-1)C_n$ ［注：$C_n^{\,n} = E$］	n
S_n（n:偶数）	$E, S_n^{\,1}, C_{n/2}^{\,1}, S_n^{\,3}, C_{n/2}^{\,2}, S_n^{\,5}, \cdots, S_n^{\,n-1}$	n
C_{nv}（n:奇数）	$E, (n-1)C_n, n\sigma_v$	$2n$
C_{nv}（n:偶数）	$E, (n-1)C_n, n/2\sigma_v$（頂点を含む）, $n/2\sigma_d$（辺を２等分する）	$2n$
C_{nh}	$E, (n-1)C_n, \sigma_h, (n-1)S_n$	$2n$
D_n	$E, (n-1)C_n, nC_2'$	$2n$
D_{nd}	$E, (n-1)C_n, nC_2', n\sigma_d, nS_{2n}$	$4n$
D_{nh}（n:奇数）	$E, (n-1)C_n, nC_2', \sigma_h, n\sigma_v, (n-1)S_n$ ［注：i は無い］	$4n$
D_{nh}（n:偶数）	$E, (n-1)C_n, nC_2', \sigma_h, n/2\sigma_v$（頂点を含む）, $n/2\sigma_d$（辺を２等分する）, $(n-1)S_n$ ［注：$S_n^{\,n/2} = i$］	$4n$
T_d	$E, 8C_3, 3C_2, \sigma_h, 6\sigma_d, 6S_4$	24
O_h	$E, 8C_3, 6C_2'$（辺を２等分する）, $6C_4, 3C_2(=C_4^{\,2})$（頂点を含む）, i, $3\sigma_h, 6\sigma_d, 6S_4$（頂点を通る）, $8S_6$（面の中心を通る）	48
$C_{\infty v}$	$E, 2C_\infty^{\,\phi}, \cdots, \infty\sigma_v$	∞
$D_{\infty h}$	$E, 2C_\infty^{\,\phi}, \cdots, \infty C_2', \sigma_h, \infty\sigma_v, 2S_\infty^{\,\phi}, i$	∞

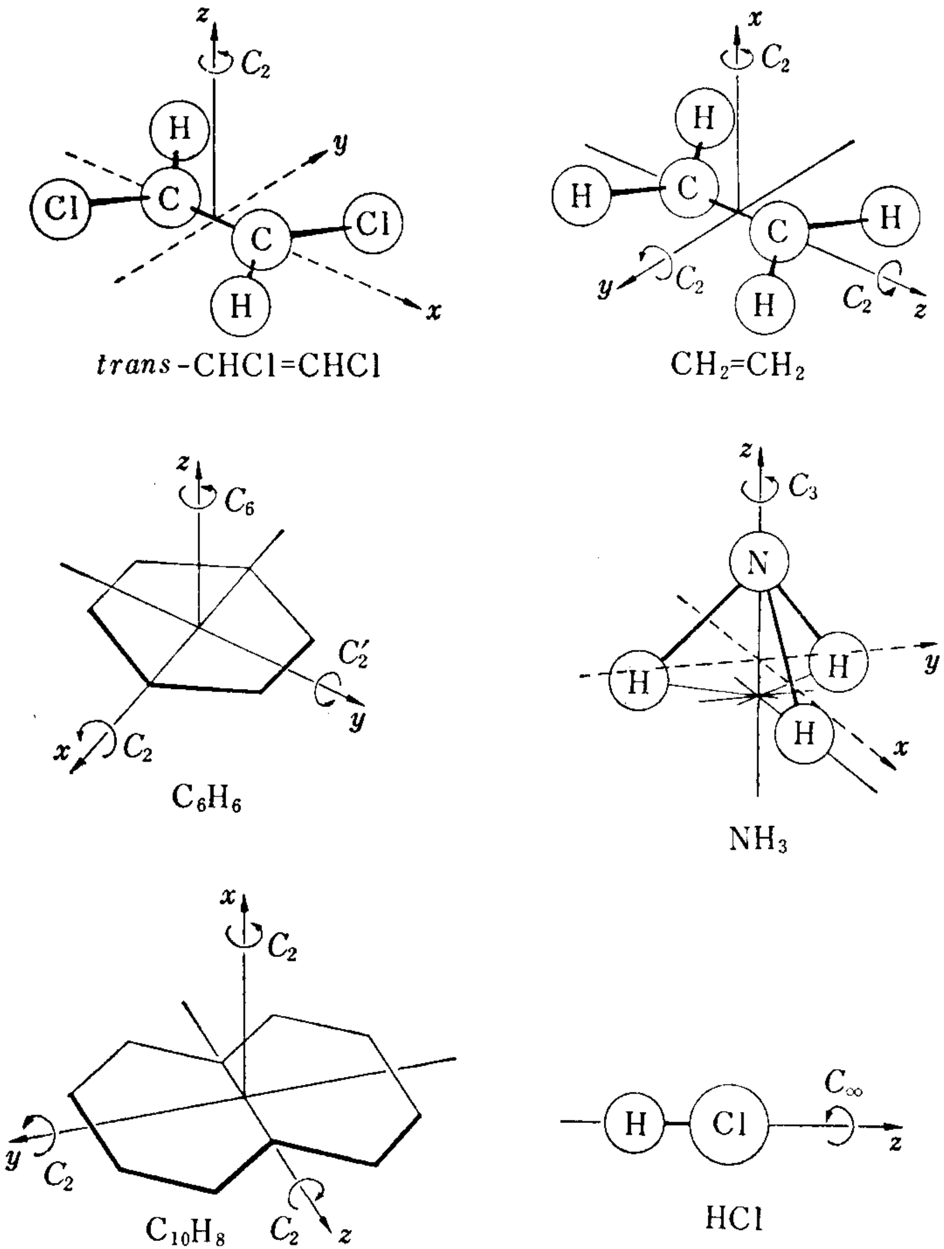


図 1-2 座標軸と回転軸

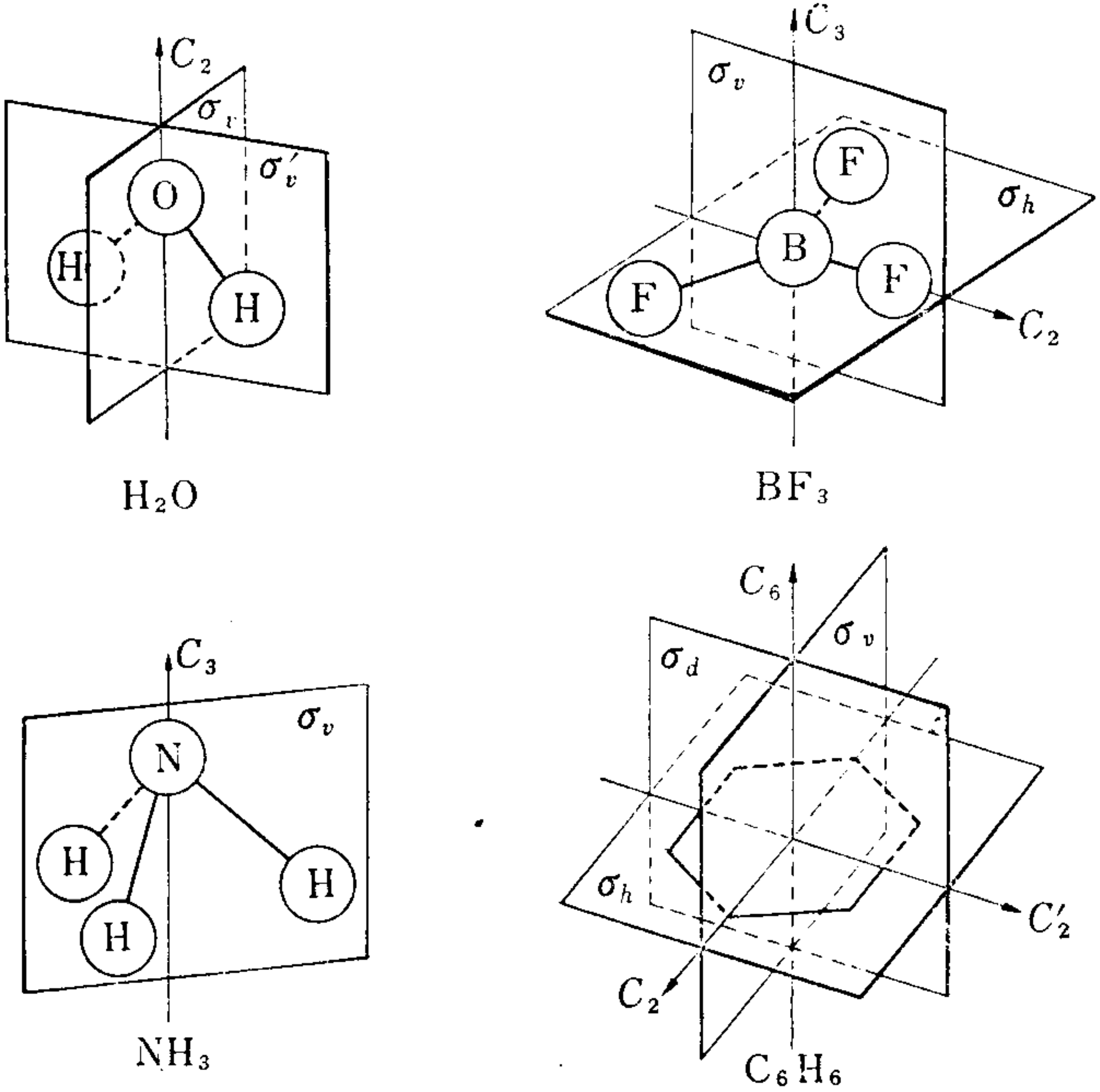

C_2
σ_v
σ'_v
O
H
H
H_2O
C_3
σ_v
F
B
F
F
σ_h
C_2
BF_3
C_3
σ_v
N
H
H
H
NH_3
C_6
σ_v
σ_d
σ_h
C'_2
C_2
C_6H_6

図 1-3 対　称　面

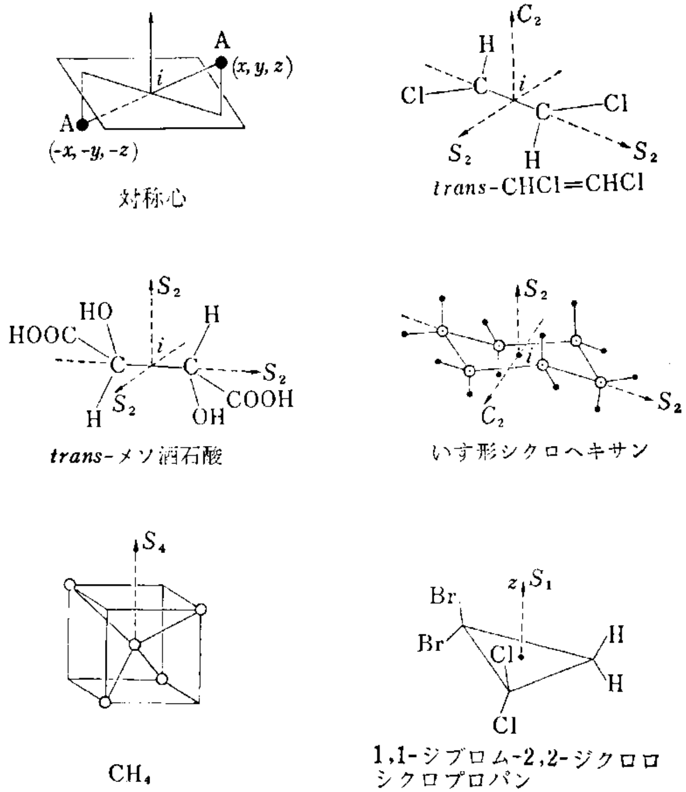


図 1-4 対称心と回映軸

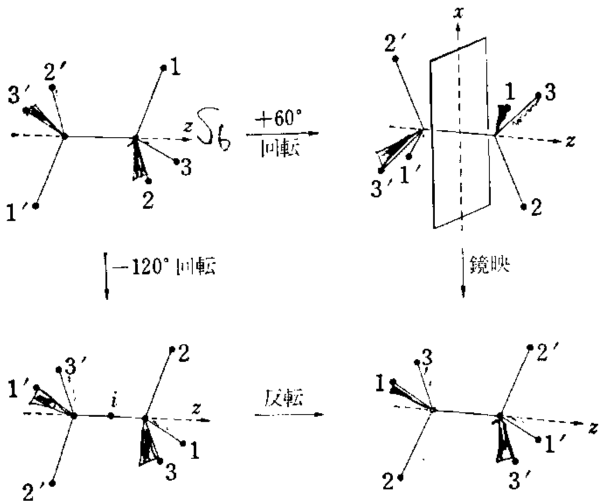
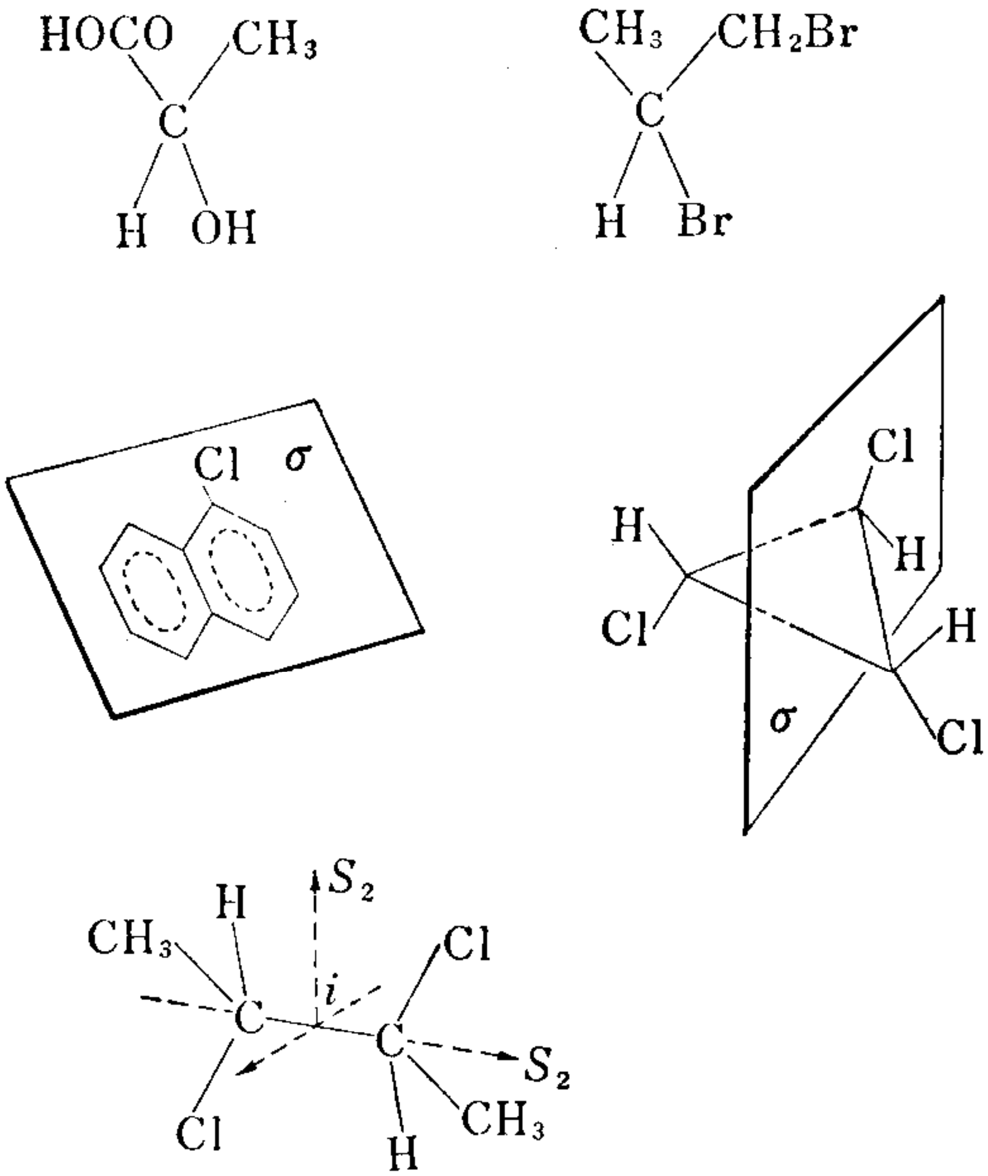


図 1-5 回映と回反



C_1　不斉炭素

C_s　(σ, S_1)

C_i　(i, S_2)

図 1-7　回転軸をもたない群

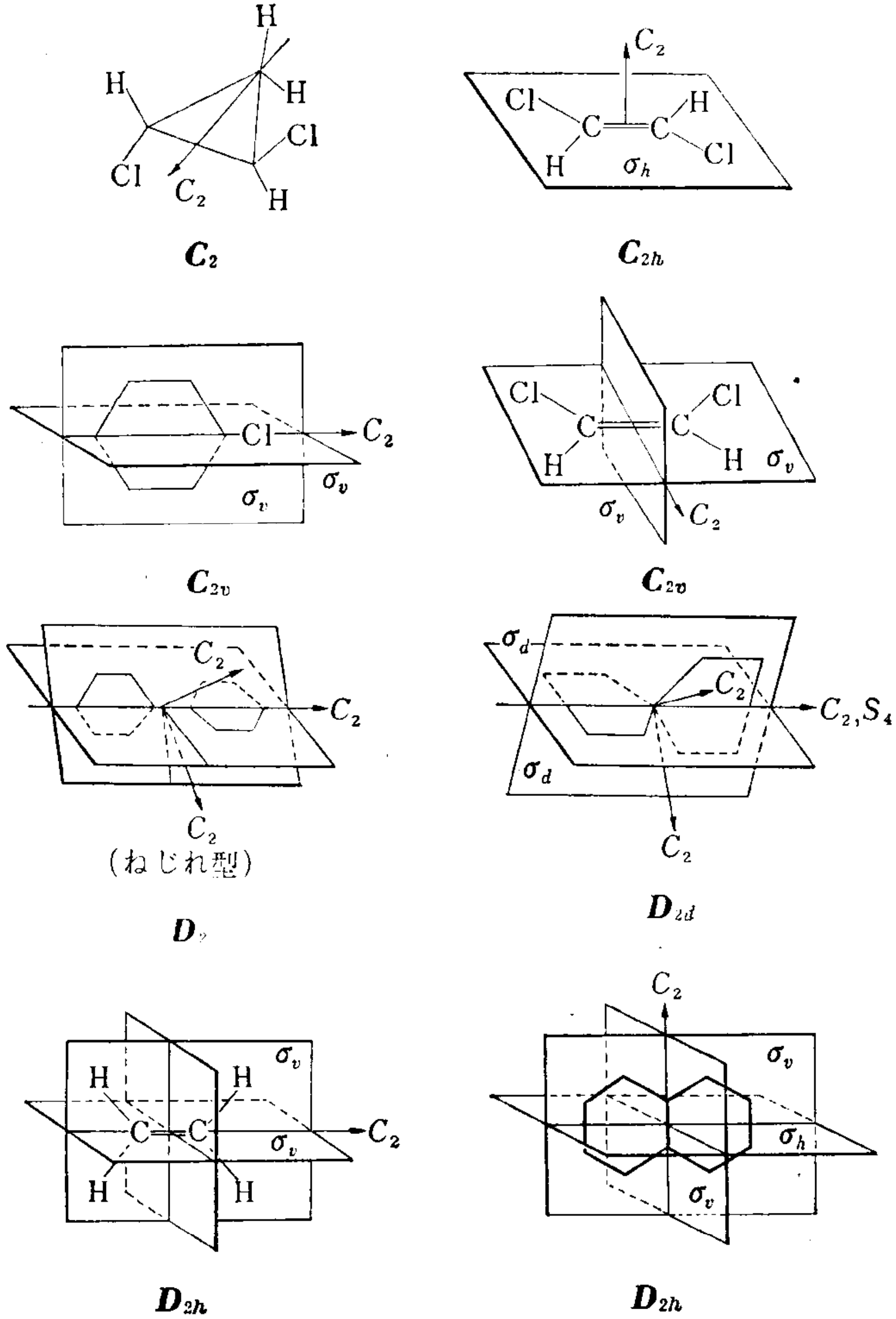


図 1-8　$\boldsymbol{C}_2$, $\boldsymbol{D}_2$ の 比 較

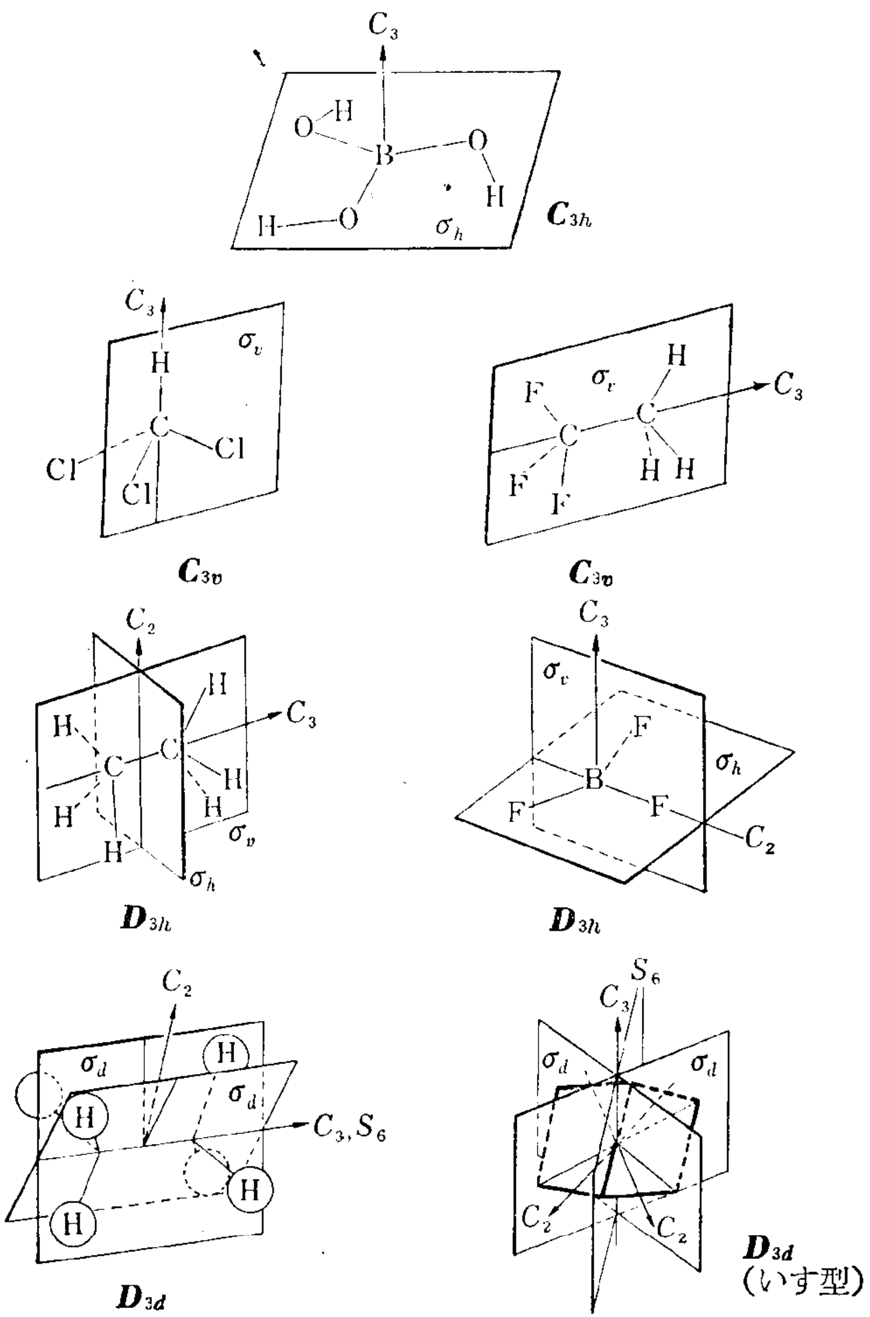


図 1-9　$\boldsymbol{C}_{3h}$, $\boldsymbol{C}_{3v}$, $\boldsymbol{D}_{3h}$, $\boldsymbol{D}_{3d}$

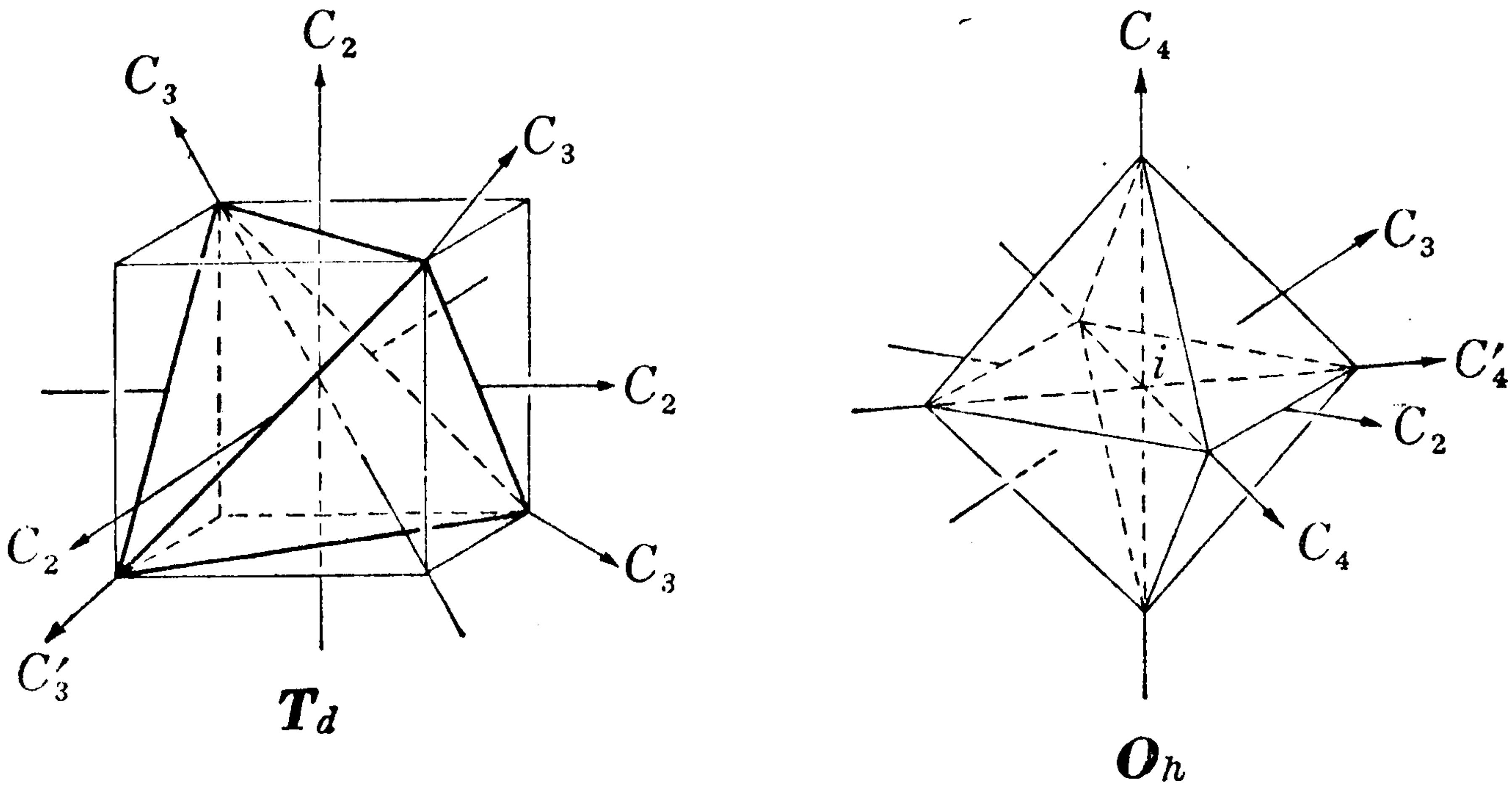
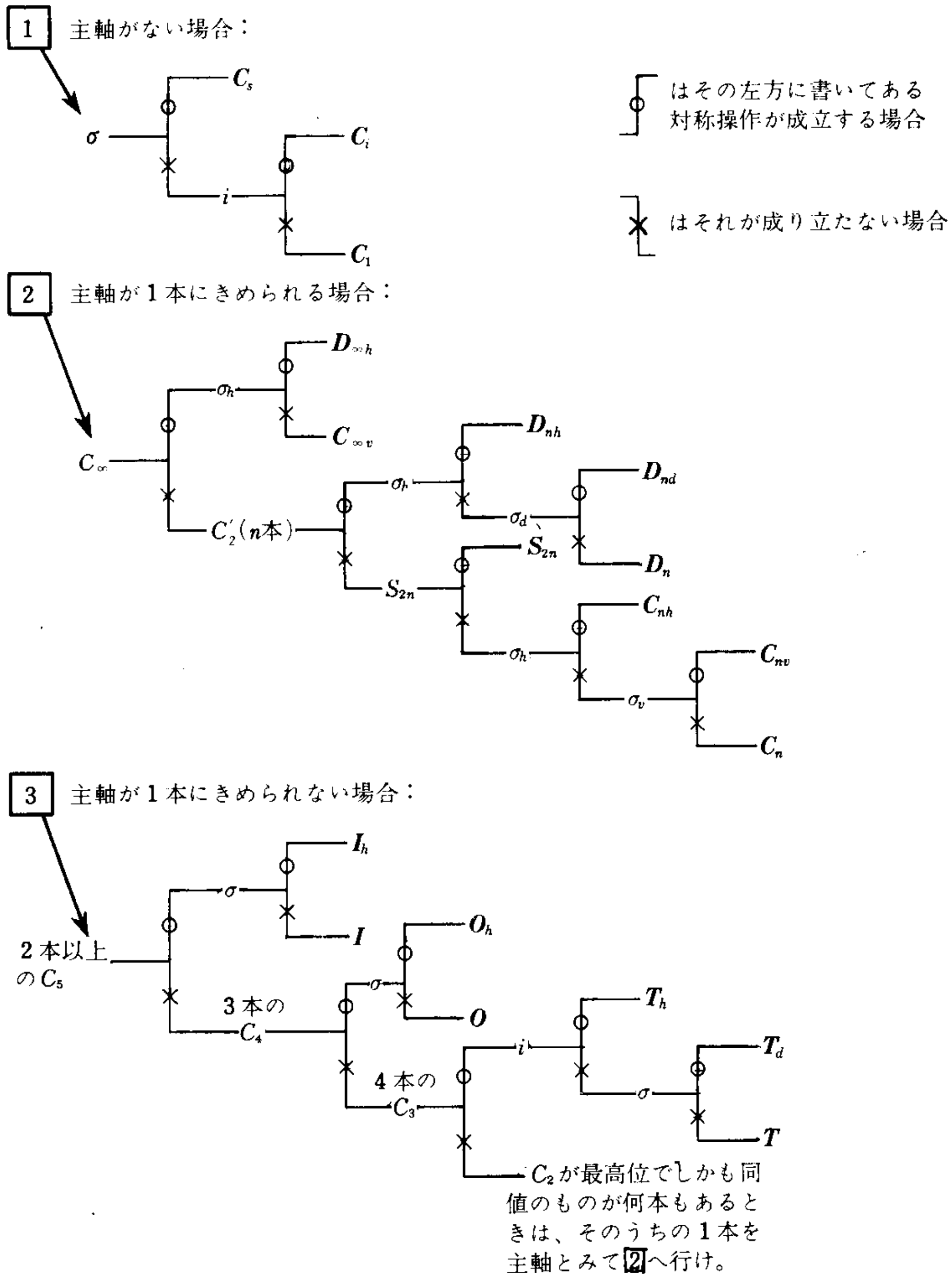


図 1-10　T_d と O_h

点群の決定方法



1 主軸がない場合：
σ
C_s
i
C_i
C_1
はその左方に書いてある対称操作が成立する場合
はそれが成り立たない場合
2 主軸が1本にきめられる場合：
C_∞
σ_h
$D_{\infty h}$
$C_{\infty v}$
C_2'(n本)
D_{nh}
σ_d
D_{nd}
D_n
S_{2n}
C_{nh}
C_{nv}
σ_v
C_n
3 主軸が1本にきめられない場合：
2本以上のC_5
I_h
I
3本のC_4
O_h
O
4本のC_3
T_h
T_d
T
C_2が最高位でしかも同値のものが何本もあるときは、そのうちの1本を主軸とみて2へ行け。