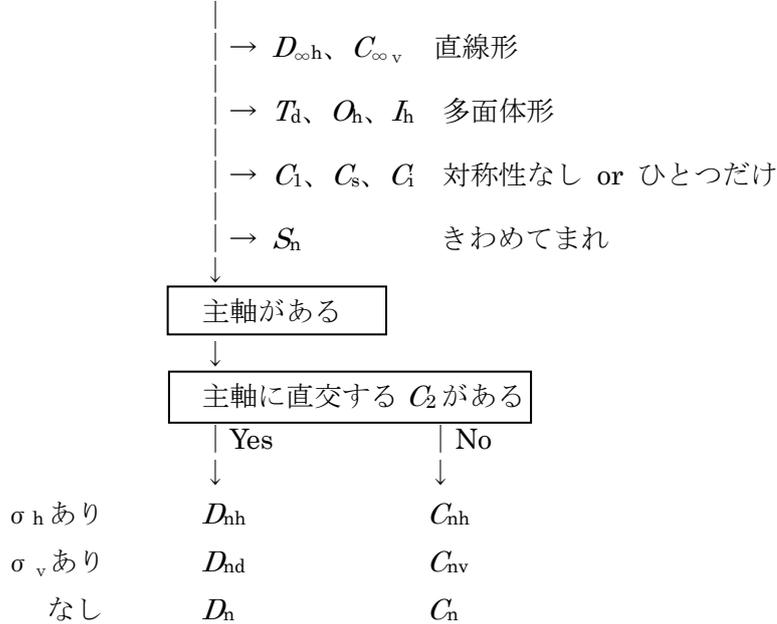


対称性まとめ

1. 分子の形から点群(Schönflies 記号)の決定。



2. 対称軌道による永年方程式のブロック化

- ① 分子の点群を決め、指標表を用意する。(部分群を用いることもある。)
- ② 同種の原子軌道がそれぞれ対称操作 R でどこに動くかを表にし、動かない原子の数 = 指標 $\chi(R)$ を求める。
- ③ この指標 $\chi(R)$ と既約表現の指標 $\chi_i(R)$ との「内積」 $\frac{1}{h} \sum_R \chi_i(R) \chi(R)$ を計算することによって、既約表現に簡約する。[簡約法則] 例 $A_1 + E$
- ④ $\sum_R \chi_i(R) R \chi(R)$ によって対称軌道を作る。(必要ならば規格化しておく。)
- ⑤ 各既約表現ごとに、それに属する対称軌道から永年方程式を作り、これを解く。

3. 指標表の使い方

- ① 波動関数の積 $\phi_1 \phi_2$ の指標は、 ϕ_1 と ϕ_2 の指標を各対称操作ごとに掛け合わせたものである。
- ② 全空間での積分 $\int \phi_1 \phi_2 d\tau$ がゼロにならないのは、 $\phi_1 \phi_2$ が全対称の既約表現を含む場合のみである。特に ϕ_1 と ϕ_2 が異なる既約表現に属する場合は、 $\int \phi_1 \phi_2 d\tau$ は必ずゼロになる。