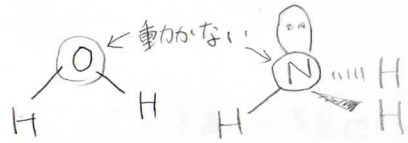


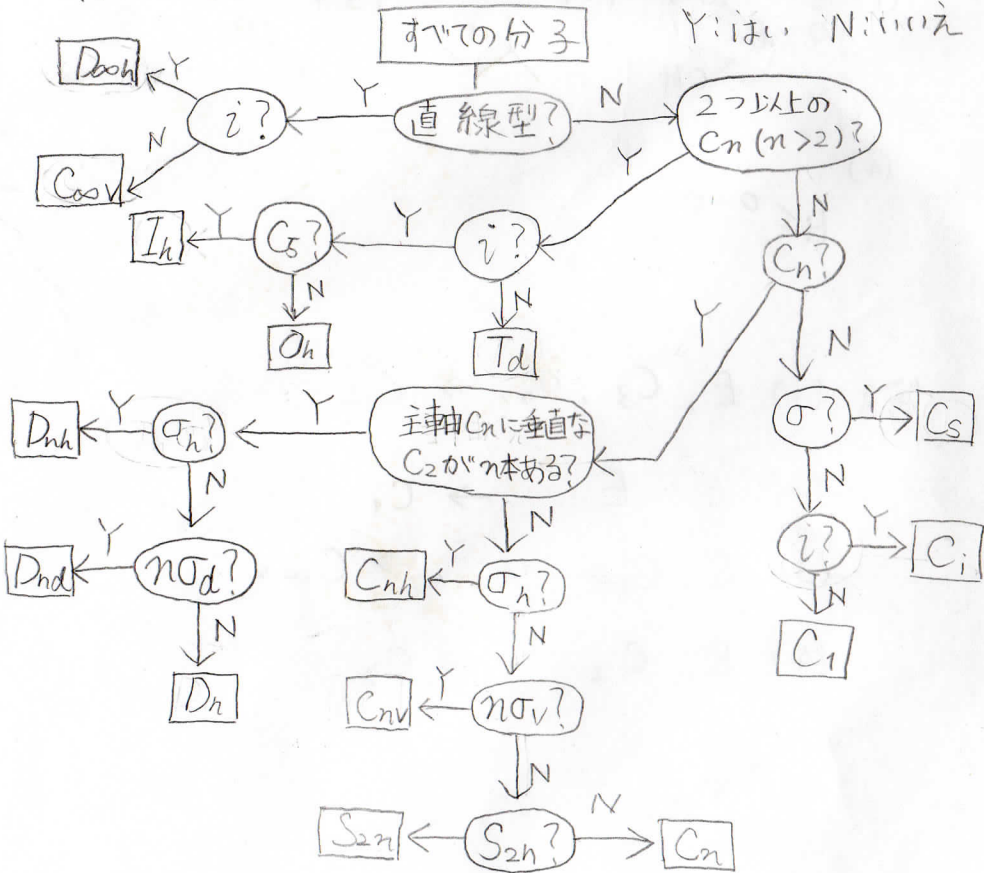
点群 前編

☆ フローチャート

点群... どんな対称操作によっても移動しない共通の点を有するものに存在する対称操作の集合



対称性の同じ分子を見つけるには、点群のフローチャートを使えばいい



☆ 点群の表記法と意味

黒: Schoenflies系 青: Hermann-Mauguin系
ヘルマン エーガン
シェーンフライス

C_i	$\bar{1}$				
C_s	m				
C_1	1	C_2 2	C_3 3	C_4 4	C_6 6
		C_{2v} 2mm	C_{3v} 3mm	C_{4v} 4mm	C_{6v} 6mm
		C_{2h} 2/m	C_{3h} $\bar{6}$	C_{4h} 4/m	C_{6h} 6/m
		D_2 222	D_3 32	D_4 422	D_6 622
		D_{2h} mmm	D_{3h} $\bar{6}2m$	D_{4h} 4/mmm	D_{6h} 6/mmm
		D_{2d} $\bar{4}2m$	D_{3d} $\bar{3}m$	S_4 $\bar{4}/m$	S_6 $\bar{3}$
T	23	T_d $\bar{4}3m$	T_h m3		
O	432	O_h m3m			

○ Schoenflies系の文字と、対称軸方向から見た形状の関係

n=	2	3	4	5	6	∞
C_n						
D_n						
C_{nv}						
C_{nh}						
D_{nh}						
D_{nd}						
S_{2n}						

C_{2v}

 折れ線 (n=2)
 円錐 (n=∞)
 角錐 (それ以外)
 ・は、頂点を指す
 (正四面体は T_h)

一平面、角柱、双角錐
 (正四面体は O_h)

◦ Hermann-Mauguin 系の文字の意味

数字 $n \rightarrow n$ 回回転軸

$m \rightarrow$ 鏡映面

$n/m \rightarrow$ 回転軸に垂直な鏡映面 (σ_h)

$\bar{n} \rightarrow$ その回転が反転と組み合わされている ($m=2$)

$mn \rightarrow$ 回転軸を含む鏡映面

※ 同じ類に属する対称操作は区別しない

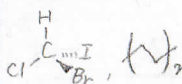
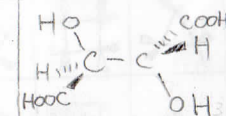
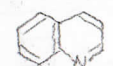
$\text{NH}_3 : C_{3v}$

$\{E\}, \{C_3, C_3^2\}, \{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$

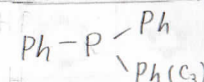
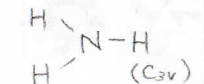
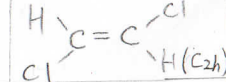
\downarrow
3 m

☆ それぞれの対称要素と分子の例

◦ C_1, C_i, C_s 群

点群	対称要素	例
C_1	E	
C_i	E, i	
C_s	E, σ	

◦ C_n, C_{nv}, C_{nh} 群

C_n	E, C_n	
C_{nv}	$E, C_n, n\sigma_v$	
C_{nh}	E, C_n, σ_h	

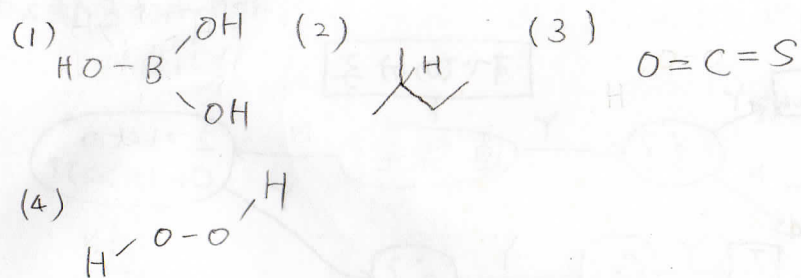
◦ 異核二原子分子 (H-Cl など) は、すべて $C_{\infty v}$ に属する。

◦ $i = C_2 \cdot \sigma_h$ より、 C_{2h} は反転中心も持つことになる。

◦ D_n, D_{nh}, D_{nd} 群 「点群後編」へ続く

☆ 練習問題

次の化合物は、どの群に属する?



答え (1) $E, C_3, \sigma_h \rightarrow C_{3h}$

(2) $E \rightarrow C_1$

(3) $E, C_{\infty}, \infty \sigma_v \rightarrow C_{\infty v}$

(4) $E, C_2 \rightarrow C_2$