



# 目 次

<b>1. 対称操作</b>	[1~18]
1-1 はじめに ······	1
1-2 点対称操作 ······	2
1-3 ステレオ投影 ······	7
1-4 32の結晶点群 ······	9
1-5 関連した考察 ······	12
1-6 空間群の例 ······	14
ノート ······	16
問 題 ······	17
<b>2. 群の概念</b>	[19~32]
2-1 はじめに ······	19
2-2 群の定義 ······	19
2-3 対称操作は群をなす ······	22
2-4 関連した群の概念 ······	22
2-5 同型と準同型 ······	24
2-6 特別な種類の群 ······	25
2-7 さらに進んだ群の概念(空間群の因子群を含む) ······	26
2章の付録 ······	28
ノート ······	30
問 題 ······	31
<b>3. 有限群の行列表現</b>	[33~44]
3-1 はじめに ······	33
3-2 表 現 ······	33
3-3 既約表現 ······	37
3-4 因子群の表現 ······	40
3章の付録 ······	41
ノート ······	42
問 題 ······	42

<b>4. 有限群の行列表現の指標</b>	[45~68]
4-1 既約表現の指標の性質	45
4-2 指標表	51
4-3 可約表現の簡約	52
4-4 基底関数	53
4-5 例—ノイマンの原理	56
4-6 原子位置	62
4-7 ハミルトニアン	64
4章の付録	66
ノート	67
問 題	67
<b>5. 分子と結晶の振動</b>	[69~92]
5-1 3N自由度	70
5-2 一般的考察	70
5-3 分子の規準モードの数と型	75
5-4 分子内座標	79
5-5 結 晶	80
5-6 固有ベクトルと対称適合ベクトル	83
5-7 射影演算子	85
5-8 射影演算子の規準座標への応用	87
ノート	91
問 題	91
<b>6. 規準モード(直積と選択則)</b>	[93~110]
6-1 既約表現の直積	93
6-2 振動の波動関数	98
6-3 選択則—赤外とラマン	99
6-4 分子近似(位置対称性とダビドフ分裂)	106
ノート	108
問 題	109
<b>7. 量子力学*</b>	
7-1 原子波動関数	
7-2 関数の変換	
7-3 基底関数としての固有関数	
7-4 回転と角運動量	

## 目 次

- 7-5 摂 動
- 7-6 行列要素(選択則)
- 7-7 一般的な永年方程式問題
- 7章の付録
- ノート
- 問 題

**8. 結晶場理論\*(および原子物理学)**

- 8-1 オイラー角による回転
- 8-2 全回転群の表現
- 8-3 対称性の低下
- 8-4 エネルギー準位図(相関図)
- 8-5 結晶2重群
- 8-6 2重群を含む相関図
- 8-7 その他の結晶場効果
- 8章の付録
- ノート
- 問 題

**9. 混成関数\***

- 9-1 はじめに
- 9-2 単純な混成関数と結合
- 9-3 四面体の混成化
- 9-4 その他の混成関数
- 9-5  $\pi$ -混成関数
- 9-6 混成軌道に関するコメント(スレーター行列式)
- ノート
- 問 題

**10. 分子軌道理論\***

- 10-1 水素分子イオン
- 10-2 簡単な MO 理論
- 10-3 遷移金属錯体
- 10-4 共役炭化水素の  $\pi$  電子の LCAO-MO
- 10-5 ウッドワード・ホフマン則
- ノート
- 問 題

<b>11. 結晶格子の対称性</b>	[111~140]
11-1 実アフィン群	111
11-2 空間群	112
11-3 並進格子	114
11-4 International Tables for X-Ray Crystallography, 國際記号など	123
11-5 磁気群(色つき群)	133
ノート	138
問 題	139
<b>12. 固体のバンド理論</b>	[141~190]
12-1 並進対称	142
12-2 シンモルフィックな空間群	156
12-3 シンモルフィックでない空間群	175
12-4 バンドに及ぼすスピン軌道の影響	180
12-5 時間反転の対称性	184
ノート	190
問 題	190
<b>13. 全回転群*</b>	
13-1 2次元特殊ユニタリ群 $SU(2)$ と 3次元回転群との同型	
13-2 $SU(2)$ の既約表現	
13-3 ウィグナー係数	
13-4 既約テンソル演算子	
13-5 ウィグナー・エッカートの定理	
13-6 3j 記号とラッカー係数	
ノート	
問 題	
<b>付 錄</b>	[193~232]
1. 晶 系	193
2. 32の点群	199
3. 指標表	201
4. 空間群	213
5. 行列、ベクトル空間および線形演算子	220
6. 直積の表	226
7. 相関表	228
8. 球面調和関数*	

## 目 次

9. 田辺・菅野の図*	
10. 2重群の指標表*	[233~235]
文 献	[237~240]
索 引	