

目 次

| | |
|------------------------|--------|
| 0. 対称性と群論の役割 | 頁 1 |
|------------------------|--------|

1. 群

| | |
|--|---|
| § 1.1 群の定義 6 § 1.2 群の例: 正多角形の合同 操作群 9 § 1.3 群の例: 対称群 14 § 1.4 組み換え定理 17 § 1.5 同型と準同型 18 § 1.6 部分群 19 | § 1.7* 剰余類, 剰余類分解 20 § 1.8 共役元, 類 21 § 1.9* 類の積 23 § 1.10* 不変部分群 25 § 1.11* 剰余類群または商群 26 § 1.12 直積群 28 |
|--|---|

2. ベクトル空間

| | |
|--|--|
| § 2.1 ベクトル空間 30 § 2.2 ベクトルの射影 33 § 2.3 ベクトルの変換 35 § 2.4 不変部分空間 39 | § 2.5 計量ベクトル空間 40 § 2.6 エルミート行列, ユニタリ 行列の対角化 42 § 2.7* 線形変換群 44 |
|--|--|

3. 群の表現 (I)

| | |
|---|--|
| § 3.1 群の表現 46 § 3.2 群 C_{3v} の既約表現 51 § 3.3 対称操作による関数の変換 . . . 53 § 3.4 同次多項式によってつくら | れる C_{3v} の表現 57 § 3.5 表現論一般 60 § 3.6 指 標 64 § 3.7 表現の簡約 67 |
|---|--|

| | | | | | |
|---------|--------------|----|--------|-----------------------|----|
| § 3.8 | 積表現 | 69 | § 3.12 | 共役な表現 | 77 |
| § 3.9 | 直積群の表現 | 72 | § 3.13 | 付録 群の表現に関する 諸定理の証明 | 81 |
| § 3.10* | 正則表現 | 73 | | | |
| § 3.11* | 既約表現の指標の求めかた | 75 | | | |

4. 群の表現 (II)

| | | | | | |
|--------|--------------------|----|--------|--------------|----|
| § 4.1* | 誘導表現 | 87 | § 4.3* | 小群の既約表現, 小表現 | 92 |
| § 4.2* | 不変部分群をもつ群の既約 表現 | 89 | § 4.4* | 射線表現 | 95 |

5. 表現論と量子力学

| | | | | | |
|-------|------------------------|-----|-------|--------|-----|
| § 5.1 | 波動関数と演算子の対称 操作による変換 | 105 | | の分裂 | 111 |
| § 5.2 | ハミルトニアンの固有状態 と既約表現 | 106 | § 5.4 | 基底の直交性 | 112 |
| § 5.3 | 摂動によるエネルギー準位 | | § 5.5 | 選択則 | 113 |
| | | | § 5.6 | 射影演算子 | 116 |

6. 回転群

| | | | | | |
|-------|----------------------|-----|--------|----------------------------|-----|
| § 6.1 | 回転 | 119 | § 6.10 | クレブシュ-ゴルダン係数 またはウィグナー係数 | 140 |
| § 6.2 | オイラー角による表示 | 121 | § 6.11 | テンソル演算子 ウィグ ナー-エッカートの定理 | 144 |
| § 6.3 | 演算子としての回転, 無限 小回転 | 123 | § 6.12 | 等価演算子 | 150 |
| § 6.4 | 無限小回転の表現 | 125 | § 6.13 | 3つの角運動量の合成 ラカー係数 | 152 |
| § 6.5 | 回転群の表現行列 | 128 | § 6.14 | 電子配置 $(nl)^x$ の波動関数 | 159 |
| § 6.6 | SU(2) と O(3) | 131 | § 6.15 | 電子と孔 | 164 |
| § 6.7 | 表現の基底 | 133 | § 6.16 | 演算子の行列要素の計算 | 168 |
| § 6.8 | 球関数 | 135 | | | |
| § 6.9 | 表現行列の直交性 | 137 | | | |

7. 点群

| | | | |
|--------------------------|-----|---|-----|
| § 7.1 対称操作 | 171 | § 7.5 2価表現と2重群 | 179 |
| § 7.2 点群とその命名法 | 173 | § 7.6 スピン関数と軌道関数の変換 | 183 |
| § 7.3 点群の類構造 | 176 | § 7.7 付録 狭義回転から成る 点群の一般的導出 | 184 |
| § 7.4 点群の既約表現 | 177 | | |

8. 分子の電子状態

| | | | |
|--|-----|--|-----|
| § 8.1 分子軌道 | 188 | § 8.6 分子の多重項 | 210 |
| § 8.2 2原子分子 LCAO法 | 191 | § 8.7 原子価結合の理論 | 218 |
| § 8.3 LCAO MO の作り方 ベンゼンの π 電子近似 | 195 | § 8.8 付録 単一可約群のクレブ シュ-ゴルダン係数, ウィグナー-エッカート の定理 | 226 |
| § 8.4 混成軌道 | 200 | | |
| § 8.5 配位子場理論 | 202 | | |

9. 分子振動

| | | | |
|----------------------------|-----|--|-----|
| § 9.1 規準モードと規準座標 | 234 | 選択則 | 242 |
| § 9.2 規準モードと群論 | 236 | § 9.4 核の変位と電子との相互作用 用 ヤーン-テラー効果 | 244 |
| § 9.3 赤外吸収とラマン散乱の | | | |

10. 空間群

| | | | |
|-------------------------------|-----|-------------------------------|-----|
| § 10.1 結晶の並進対称性 | 251 | § 10.6 逆格子とブリルアン域 | 263 |
| § 10.2 結晶を不変に保つ対称操作 | 252 | § 10.7 並進群の既約表現 | 266 |
| § 10.3 空間群の構造 | 254 | § 10.8 k 群とその既約表現 | 268 |
| § 10.4 ブラベー格子 | 258 | § 10.9 空間群の既約表現 | 274 |
| § 10.5 空間群の命名法 | 261 | § 10.10 2重空間群 | 278 |

11. 結晶の電子状態

| | | | | | |
|--------|---------------------------------|-----|---------|------------------------------|-----|
| § 11.1 | ブロッホ関数と $E(k)$ スペクトル | 281 | § 11.7 | 格子振動 | 295 |
| § 11.2 | エネルギー帯構造の例, Ge と TlBr | 283 | § 11.8 | スピン軌道相互作用と 2重空間群 | 297 |
| § 11.3 | 適合関係 | 286 | § 11.9 | 格子振動による電子の散乱 | 299 |
| § 11.4 | ブロッホ関数を平面波によって表わす | 287 | § 11.10 | 光遷移 | 300 |
| § 11.5 | 原点のとりかた | 290 | § 11.11 | 分子結晶の励起子 ダビドフ分裂 | 303 |
| § 11.6 | ブロッホ関数を原子軌道によって表わす | 292 | § 11.12 | 付録 空間群の場合の 選択則 | 309 |

12. 時間反転と非ユニタリ群

| | | | | | |
|--------|---------------------------|-----|--------|-----------------------------|-----|
| § 12.1 | 時間反転 | 318 | § 12.4 | 磁性空間群 | 333 |
| § 12.2 | 非ユニタリ群と複表現 | 322 | § 12.5 | 磁性化合物の励起子 スピン波 | 335 |
| § 12.3 | 空間群の場合の判定条件とその例 | 327 | | | |

13. ランダウの相転移理論

| | | | | | |
|--------|---------------------------|-----|--------|-------------------------|-----|
| § 13.1 | ランダウの 2 次相転移の理論 | 343 | § 13.3 | 付録 リフシツツ条件の導出 | 357 |
| § 13.2 | 結晶構造とスピン配列 | 352 | | | |

14. 対称群

| | | | | | |
|--------|---------------------|-----|--------|---------------------|-----|
| § 14.1 | 対称群 | 362 | § 14.4 | 表現行列の基底 | 369 |
| § 14.2 | 既約表現の指標 | 365 | § 14.5 | ユニタリ群と対称群 | 371 |
| § 14.3 | 既約表現行列の構成 | 367 | § 14.6 | 分岐則 | 379 |

| | | |
|--------|-------------------------|------------------------------|
| § 14.7 | 多電子系の波動関数 381 | としての $D^{(j)}$ 384 |
| § 14.8 | 付録 SU(2) の既約表現 | |
| 付録 A | 32 点群 | 390 |
| 付録 B | 点群の既約表現の指標 | 392 |
| 参考書 | | 400 |
| 索引 | | 401 |

本書では各章の始めを、対称美の日本的表現である紋章をカットに用いて飾った。文様の世界でのこれらの呼び名は下記のとおりである。これらの文様の対称性と章の番号との対応は、読者の賢察に委ねる。

- | | |
|-----------------------|-------------------------------|
| 0. 絹巻手鞠 ^{まり} | 8. 石持落し八つ鷹羽車 |
| 1. 折鶴 | 9. 九つ丁子 ^{ちょうじ} |
| 2. 二つ追掛稲の丸 | 10. 蔭の重桔梗 ^{かさねききょう} |
| 3. 三開唐傘 | 11. 丸に上羽蝶 ^{あげはちよう} |
| 4. 四つ茶実 | 12. 丸二つ袋 |
| 5. 剣五つ葵 | 13. 糸輪三つ重爽剪 ^{かさねはさみ} |
| 6. 六つ瓜唐花 | 14. 丸に四方剣片喰 |
| 7. 七本矢車 | |

要するに文様は点群の幾何学的実現である。