群論と量子化学のスケッチ

KENZOU

2018.12.15

第 1 話.　群とは何か

1.1　群の定義

「群」は訓読みで「むれ」と読みますね。もともとは羊が集まるという意味だったそうですが，羊の意味が脱落して「むらがっていること」また「同類のあつまり」という意味になったそうです。この意味からすれば群論（group theory）とは「むらがり」を論じる学問ということになります。しかし，むらがりといっても単に烏合の衆では相手になりません。そこで次の 4 つの鉄の規則（？）を守る集まりを「群」と定義し，その集まり（集合）が織りなす多様な構造を論じていこうというのが群論です（と思います）。4 つの規則はこの後すぐ述べるとして，少し集合の説明を続けます。集合を構成するメンバーを「元」と呼びますが，これは「ただの数」でも「行列」や「関数」または「対称操作」など何でも OK で，とくにメンバーの資格は問いません。このような g 個の異なる元から構成された一つの集合 $\boldsymbol{G}$ を次のように表わします。

$$\boldsymbol{G} = \{G_1, G_2, \cdots, G_g\} \tag{1.1}$$

集合 $\boldsymbol{G}$ の中の任意の 2 つの元 G_i と G_j の“ 積 ”を定義しそれを G_iG_j と表します。“ 積 ”は算術の掛け算（×）だけとは限らず，加算（＋）も“ 積 ”の定義に含みます[1]。

さて，4 つの規則ですが，集合 $\boldsymbol{G}$ が次の 4 つの条件を満たす時，$\boldsymbol{G}$ は初めて「群」となります。そして，元の個数を特に「位数」(order) といい，位数が有限な群は有限群，無限な群は無限群と呼ばれます。

＜群の定義＞

1) 閉集合性：$\boldsymbol{G}$ の任意の 2 つの元の積 G_iG_j は集合 $\boldsymbol{G}$ の元に属する。

$$G_iG_j \in \boldsymbol{G}$$

2) 結合則：$\boldsymbol{G}$ の任意の 3 つの元 G_i, G_j, G_k に対して次式が成り立つ。

$$G_i\,(G_j\,G_k) = (G_i\,G_j)\,G_k$$

[1] 二項演算といいます。

3) 単位元：単位元と呼ばれる特別な元 E が存在し，$\boldsymbol{G}$ の任意の元 G_i に対して次式が成り立つ。

$$G_i\,E = E\,G_i = G_i$$

4) 逆元の存在：$\boldsymbol{G}$ の任意の元 G_i に対して，その逆元と呼ばれる ${G_i}^{-1}$ が存在し次式が成り立つ。

$$G_i\,{G_i}^{-1} = {G_i}^{-1}\,G_i = E$$

以上の 4 つ。一般には積に関して交換則が成り立たないと仮定していますが，交換則が成り立つ群

$$G_i\,G_j = G_j\,G_i$$

を「可換群」あるいは「アーベル群」といい，交換則が成り立たない群を「非可換群」あるいは「非アーベル群」と呼んでいます。

●群の例

抽象的な話はこれくらいにして，具体的な群の例を見てみましょう。元として「数字」と「対称操作」の 2 つのケースを見てみます。

A) 1組の数字が作る群： $1,\,-1,\,i,\,-i$ といった数字を元とする集合 $\boldsymbol{G} = \{1,\,-1,\,i,\,-i\}$ を考えます。果たして $\boldsymbol{G}$ は群なのか？「積」を通常の掛け算（×）と定義とすると，4 つの元の「積表」(multiplication table) は次の通りです。積表を見ればすぐ分かりますが，$\boldsymbol{G}$ の元の 4 個の数字以外の数字は入っ

	1	-1	i	$-i$
1	1	-1	i	$-i$
-1	-1	1	$-i$	i
i	i	$-i$	-1	1
$-i$	$-i$	i	1	-1

表 1.1: $\boldsymbol{G}$ の積表

ていませんね。群の定義の 1 番目の「閉集合性」をクリアしました。次に「積」は通常の掛け算としたので，掛け算の順序を変えても結果は変わらず，2 番目の「結合則」もクリア。単位元は 1 で 3 番目もクリア。最後に，$1\times 1 = 1,\,(-1)\times(-1) = 1$ から分かるように 1 と -1 はそれ自身が逆元で，$i\times(-i) = 1$ などから i と $-i$ はお互いに逆元の関係にあり，4 番目もクリア。ということで集合 $\boldsymbol{G} = \{1,\,-1,\,i\;-i\}$ は「群」を形成しているということになります。

B) 対称操作の集合が作る群： 対称操作が「群」をなす例としてアンモニア $\mathrm{NH_3}$ を取りあげます。N を中心とする四面体構造を取っています。3 個の H がある面を xy 面，その面に垂直で N を通る軸を z 軸とする座標系をとります。対称操作としては，z 軸を回転軸として反時計方向に $2\pi/3$ と $4\pi/3$ の回転操作（←時計方向に $2\pi/3$ の回転と同じ）があります。それぞれの対称操作を C_3，${C_3}^2$（あるいは ${C_3}^{-1}$）

と記号[2]で表します。また，xy 平面に垂直な 3 枚の鏡映面 σ_v, σ_v', σ_v'' による鏡映操作があります（図 1.1 参照)。何もしないことも一つの対称操作で，これを「恒等操作」といい E という記号[3]で表します。以上の対称操作を元とする集合を $\boldsymbol{C}_{3v}$ と名付けるとこれは 6 つの元の集合で

$$\boldsymbol{C}_{3v} = \{E,\, C_3,\, {C_3}^2,\, \sigma_v,\, \sigma_v',\, \sigma_v''\} \tag{1.2}$$

と表わされます[4]。果たして $\boldsymbol{C}_{3v}$ は群であるのか？ それでは積表を作ってみましょう。この場合,「積」

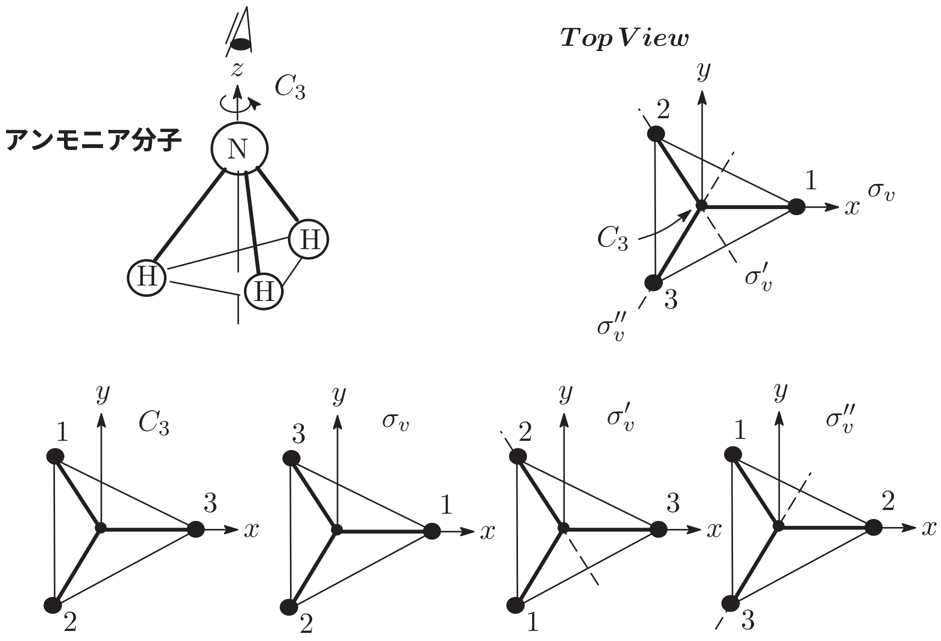

図 1.1: アンモニア分子の対称性

を連続した対称操作と定義します。積表を表 1.2 に示します。この表は上段の操作を最初に行い，続けて左端の操作を行った結果を載せています。例えば $C_3\,\sigma_v = \sigma_v''$ を見てみましょう。σ_v の操作で H の位置が (1, 2, 3) $\longrightarrow$ (1, 3, 2) と変わり，続く C_3 の操作で (1, 3, 2) $\longrightarrow$ (2, 1, 3) となりますが，この連続操作は σ_v'' の操作と同じですね。他の「積」についても同様で確認しておいてください。結局，$\boldsymbol{C}_{3v}$ の

最初の操作→	E	C_3	${C_3}^2$	σ_v	σ_v'	σ_v''
E	E	C_3	${C_3}^2$	σ_v	σ_v'	σ_v''
C_3	C_3	C_3^2	E	σ_v''	σ_v	σ_v'
C_3^2	${C_3}^2$	E	C_3	σ_v'	σ_v''	σ_v
σ_v	σ_v	σ_v'	σ_v''	E	C_3	C_3^2
σ_v'	σ_v'	σ_v''	σ_v	${C_3}^2$	E	C_3
σ_v''	σ_v''	σ_v	σ_v'	C_3	${C_3}^2$	E

表 1.2: $\boldsymbol{C}_{3v}$ の積表

[2] C は cyclic の C

[3] ドイツ語の Einheit からきており「単位」とか単一性」を意味します。

[4] $\boldsymbol{C}_{3v}$ は点群の一つです。点群については第 2 話で詳しくとりあげます。

6 個の元以外の対称操作は表 1.2 には含まれず，群の定義の 1 番目「閉集合性」をクリア。2 番目の結合則も，例えば

$$\left.\begin{array}{l} C_3(\sigma_v\, {C_3}^2) = C_3\sigma_v'' = \sigma_v' \\ (C_3\sigma_v)\, {C_3}^2 = \sigma_v''{C_3}^2 = \sigma_v' \end{array}\right\} \longrightarrow \quad C_3(\sigma_v\, {C_3}^2) = (C_3\sigma_v)\, {C_3}^2$$

となりこれもクリア。3 番目の恒等表現は E。4 番目の逆元は積表で E となる組み合わせを調べればよい。C_3 の逆元は ${C_3}^2$，σ_v の逆元は σ_v というように各元の逆元が存在していて，これもクリア。ということで $\boldsymbol{C}_{3v}$ は位数が 6 の群を形成しています。

ところで，表 1.2 をよく見てみると，2 つの元 C_3 と σ_v から他のすべての元 $\{E,\, {C_3}^2,\, \sigma_v',\, \sigma_v''\}$ を生成されることに気が付きます。次のようです。

$$E = C_3\, C_3\, C_3 = {C_3}^3, \quad {C_3}^2 = C_3\, C_3, \quad \sigma_v' = \sigma_v\, C_3, \quad \sigma_v'' = \sigma_v\, C_3 \tag{1.3}$$

このような元は群 $\boldsymbol{C}_{3v}$ を生みだす元ということで特に「生成元」といわれます。

1.2　元にもいろいろ個性がある

群の構成メンバーである元にもいろいろ個性があり，それらを見ていくことにします。

●巡回群

位数が g の群 $\boldsymbol{G} = \{G_1,\, G_2,\, \cdots,\, G_g\}$ があり，その中から任意の元 G_i を取りだしてその元の積を作っていくと

$$G_i,\, {G_i}^2,\, {G_i}^3,\, \cdots,\, {G_i}^n,\, {G_i}^{n+1}, \cdots$$

という集合が得られますが，閉集合性よりこれらの元はすべて群 $\boldsymbol{G}$ に属します。つまりこれらの元はもともとの群 $\boldsymbol{G}$ のある元と等しく，したがってある n の値のところで ${G_i}^n$ は単位元 E になるはずです。

$${G_i}^n = E \qquad (n \le g)$$

その後は同じことの繰り返し（巡回）となります。こうして，ただ一つの元から生成される群

$$\{G_i,\, {G_i}^2,\, {G_i}^3, \cdots,\, {G_i}^n = E\}$$

を位数が n の「巡回群」(cyclic group)[5]といいます。これはアーベル群です。たとえば $\boldsymbol{C}_{3v}$ の元 C_3 の積を作っていくと，C_3 は z 軸まわりの $2\pi/3$ 回転対称操作なので 3 回繰り返せば元に戻り

$$\{C_3,\, {C_3}^2,\, {C_3}^3 = E\}$$

となりますね。したがって C_3 は位数が 3 の巡回群を形成します。同様に σ_v も

$$\{\sigma_v,\, {\sigma_v}^2 = E\}$$

となるので位数が 2 の巡回群を形成します。σ_v', σ_v'' も同様です。

[5] G_i はこの群の生成元。

●特定の元の集まりからなる部分群

$\boldsymbol{C}_{3v}$ の元の中から $\{E, C_3, {C_3}^2\}$ を取りだした集合を見てみましょう。この集合は表 1.3 の積表から明らかなように群を形成します。この群は $\boldsymbol{C}_3$ と呼ばれますが，このように，ある群の一部の元から構

$\boldsymbol{C}_3$	E	C_3	${C_3}^2$
E	E	C_3	${C_3}^2$
C_3	C_3	${C_3}^2$	E
${C_3}^2$	${C_3}^2$	E	C_3

表 1.3: $\boldsymbol{C}_3$ の積表

成される群をもとの群の「部分群」(subgroup) といいます。$\boldsymbol{C}_3$ は $\boldsymbol{C}_{3v}$ の部分群ということですね。なお,「部分群の位数はもとの群の位数の約数でなければばならない」というラグランジュの定理というのがあります。$\boldsymbol{C}_{3v}$ の位数は 6，その部分群 $\boldsymbol{C}_3$ の位数は 3 でした。

群 $\boldsymbol{G}$ の部分群のうち最大のものは $\boldsymbol{G}$ 自身で最小のものは単位元 E だけからなる群 $\{E\}$ です。どんな群にもこの二つの部分群だけは必ず存在するので，この二つを「自明な部分群」といいます。そしてこれ以外の部分群を「真部分群」[6]といいます。例えば C_{3v} の真部分群は次の 4 個になり，いずれの部分群の位数も元の群 $\boldsymbol{C}_{3v}$ の位数 6 の約数 2 と 3 になっています。

$$\{E, \sigma_v\}, \quad \{E, \sigma_v'\}, \quad \{E, \sigma_v''\}, \quad \{E, C_3, {C_3}^2\} \tag{1.4}$$

●元の間の関係性：共役元と類

群を構成する元はそれぞれバラバラの関係にあるのではなくある種の関係性が見られます。群 $\boldsymbol{G}$ の元 G_i を同じ群の一つの元 G を使ってもう一つの元 $G_i = G^{-1}G_iG$ が作れたとき，元 G_j を G_i に「共役な元」といいます。

$$G_j = G^{-1}G_iG \tag{1.5}$$

共役な元の間には次の関係があります[7]。

1) すべての元は自分自身に共役
2) A が B に共役なら，B は A に共役
3) A と C が共役で，B と C と共役なら A と B も共役（推移律）

元 G_i に共役な元のすべてを集めた集合を G_i の「共役類」(conjugacy class) または単に「類」といいます。恒等元 E は自分自身で一つの類を作ります。

$$E^{-1}\,E\,E = EE = E, \quad G^{-1}\,E\,G = G^{-1}\,G\,E = EE = E$$

[6]真部分群が存在するか否か群によります。
[7]この証明は補足 1）参照。

・類の求め方： さて，同じ類に属する元の求め方ですが，類はその中の 1 個の元を代表として指定すれば定まります。 A がある類に属する元とすると，群 $\boldsymbol{G}$ の任意の元 G に対して $G^{-1}AG$ も同じ類に属することから，群 $\boldsymbol{G}$ のすべての元 $\{G_1, G_2, \cdots, G_g\}$ で挟んだ次の系列をつくります。

$$A, \quad G_2^{-1}AG_2, \quad G_3^{-1}AG_3, \quad \cdots, G_g^{-1}AG_g \qquad (G_1 = E) \tag{1.6}$$

この系列の中には同じ元が繰り返し現れたりもしますが，それは無視して異なる元だけを集めると A の属する「類」が得られます。一つの類に属する元は同じ系列に繰り返し現れることもありますが，異なる系列（他の類）の混じって現れることは決してありません。このことから，群の元は異なる類に類別することができます。

具体的に群 $\boldsymbol{C}_{3v} = \{E, C_3, {C_3}^2, \sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$ で「類」の探索にとりかかりましょう。1 個の元を代表して例えば C_3 を選びます。そして (1.6) の系列を作って異なる元だけを集めると ${C_3}^2$ が得られます。ということで C_3 と ${C_3}^2$ は同じ類であることが分かります。また，${C_3}^2$ を最初に指定しても同じ結果が得られます。表 1.4 を参照ください。

$$\begin{array}{ll} E^{-1}C_3E = C_3 & E^{-1}{C_3}^2E = {C_3}^2 \\ {C_3}^{-1}C_3C_3 = C_3 & {C_3}^{-1}{C_3}^2C_3 = {C_3}^2 \\ \quad\vdots & \quad\vdots \\ (\sigma_v'')^{-1}C_3\sigma_v'' = {C_3}^2 & (\sigma_v'')^{-1}{C_3}^2\sigma_v'' = C_3 \end{array} \tag{1.7}$$

G	E	C_3	${C_3}^2$	σ_v	σ_v'	σ_v''
$G^{-1}\,C_3\,G$	C_3	C_3	C_3	${C_3}^2$	${C_3}^2$	${C_3}^2$
$G^{-1}\,{C_3}^2\,G$	${C_3}^2$	${C_3}^2$	${C_3}^2$	C_3	C_3	C_3

表 1.4: $\boldsymbol{C}_{3v}$ の類（１）

次に σ_v を代表元にとると，表 1.5 の系列が得られます。これから $\{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$ は同じ「類」に属する

G	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ_v'	σ_v''
$G^{-1}\,\sigma_v\,G$	σ_v	σ_v''	σ_v'	σ_v	σ_v''	σ_v'

表 1.5: $\boldsymbol{C}_{3v}$ の類（２）

ことが分かります。以上のことから群 $\boldsymbol{C}_{3v}$ は $\{E\}$, $\{C_3, {C_3}^2\}$, $\{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$ の 3 つの類から構成されていることが分かります。$\boldsymbol{C}_{2v}$, $\boldsymbol{C}_{3v}$, $\boldsymbol{C}_{4v}$ の類とその数は次の通りです。

点群		類	類の数
$\boldsymbol{C}_{2v}$	：	$\{E\}$, $\{C_2\}$, $\{\sigma_v\}$, $\{\sigma_v'\}$	4 個
$\boldsymbol{C}_{3v}$	：	$\{E\}$, $\{C_3, {C_3}^2\}$, $\{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$	3 個
$\boldsymbol{C}_{4v}$	：	$\{E\}$, $\{C_4, {C_4}^3\}$, $\{C_2\}$, $\{\sigma_v, \sigma_v'\}$, $\{\sigma_d, \sigma_d'\}$	5 個

※補足：

1) 証明：恒等元の可換性から $E^{-1}AE = E^{-1}EA = A$ となり (1) が証明されます。(2) は $X^{-1}AX = B \rightarrow XBX^{-1} = X(X^{-1}AX)X^{-1} = A$ で，X の逆元を Y^{-1} とすると $XBX^{-1} \rightarrow Y^{-1}BY = A$ となり，Y，Y^{-1} 群の元に属するので (2) が証明されます。(3) は $A = X^{-1}CX, \quad C = Y^{-1}BY \longrightarrow A = X^{-1}(Y^{-1}BY)X = YXA(YX)^{-1} = Z^{-1}AZ$ で証明されます。

2)「類は友を呼ぶ」という諺がありますね。$\{C_3, {C_3}^2\}$ は回転関係，$\{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$ は鏡映関係という括りで見るとまさに諺通りかとうなずきかねませんが，ここに落とし穴があります。残念ながら“ 似た者同士 ”は必ずしも共役の判定条件にはなりません。共役関係は群全体の構造の中で決まるのです。どういうことか具体的に見ていきましょう。群 $\boldsymbol{C}_{3v}$ の部分群 $\boldsymbol{C}_3 = \{E, C_3, {C_3}^2\}$ の類を考えます。$\boldsymbol{C}_{3v}$ では C_3 と ${C_3}^2$ は同じ類に属していました。このことから $\boldsymbol{C}_3$ の類は $\{C_3, {C_3}^2\}$ だと考えると失敗します。表 1.4 をご覧ください。部分群 $\boldsymbol{C}_3$ には元として要の σ_v が含まれていないので $\sigma_v^{-1}C_3\sigma_v = {C_3}^2$ が成立しません。幾何学的にみれば（図 1.1 参照）σ_v が C_3 と ${C_3}^2$ を結び付けていることがわかりますが，肝心の σ_v が存在しないのでダメですね。//

$(\boldsymbol{C}_3)\ G$	E	C_3	${C_3}^2$
$G^{-1}\,C_3\,G$	C_3	C_3	C_3
$G^{-1}\,{C_3}^2\,G$	${C_3}^2$	${C_3}^2$	${C_3}^2$

$\longrightarrow C_3$ と ${C_3}^2$ は類ではない。

(ex.1-1) $\boldsymbol{C_{2v}}$ **のすべての類を求めよ**

(ans.) $\boldsymbol{C}_{2v}$ の類は $\{E\}, \{C_2\}, \{\sigma_v\}, \{\sigma_v'\}$ の 4 個。

G	E	C_2	σ_v	σ_v'
$G^{-1}EG$	E	E	E	E
$G^{-1}C_2G$	C_2	C_2	C_2	C_2
$G^{-1}\sigma_vG$	σ_v	σ_v	σ_v	σ_v
$G^{-1}\sigma_v'G$	σ_v'	σ_v'	σ_v'	σ_v'

表 1.6: $\boldsymbol{C}_{2v}$ の共役関係

1.3　剰余類というグループ

本稿では知らなくてもとくに差支えないですが，ついでなので「剰余類」（residue class）について簡単に触れておきます。さて，剰余類とはなに？ということですが,「剰余」という言葉からして“ 割り算の余り ”というニアンスが感じられますね。算数用語集・3 年上の「剰余類」という項に次のような記事が掲載されていました[8]。

『どんな整数でも 3 でわると，余りは 0, 1, 2 のいずれかになります。一般に，ある整数を整数 m でわると，余りは $0, 1, 2, \cdots, m-1$ のいずれかになります。このとき，余りが同じ整数どうしを同じ仲間と考えて１つの集合に含めると，すべての整数はそれぞれは共通部分を持たない m 個の集合に分けることができます。この m 個の集合を m でわったときの「剰余類」といいます。』（下線筆者）

[8]https://www.shinko-keirin.co.jp/keirinkan/sansu/WebHelp/

小学校 3 年生の算数ででこんな難しいことを学んでいるのかどうかは知りませんが，この記事を一読すれば「剰余類」というもののイメージがつかめますね。次はブリタニカ国際大百科事典小項目事典から引用した数学的な定義です。

『$\boldsymbol{H}$ を群 $\boldsymbol{G}$ の 1 つの部分群，a を $\boldsymbol{G}$ の任意の元とするとき，$\boldsymbol{H}$ の任意の元 h と a の積 ha のすべてから成る集合 $\{ha \mid h \in H\}$ を a による右剰余類といい，$\boldsymbol{H}a$ で表わす。また積 ah から成る集合を左剰余類といい，$a\boldsymbol{H}$ で表わす。単位元 e は $\boldsymbol{H}$ に含まれているから，$a = ae = ea$ となり，a は $\boldsymbol{H}a$ にも $a\boldsymbol{H}$ にも含まれる。それゆえ $\boldsymbol{G}$ のどのような元 a をとっても，それを含む右剰余類もあれば，左剰余類もある。』

一見とっつきにくい数学的定義も上で紹介した算数用語の「剰余類」という考えを発展させたものだということが分かります。

余談はこれくらいにして本論に入りましょう。$\boldsymbol{C}_{3v}$ は 4 つの真部分群から構成されていました。それらを次の記号で表すことにします。

$$\boldsymbol{C}_{3v} \quad \begin{cases} \boldsymbol{H}_c \equiv \boldsymbol{C}_3 = \{E,\, C_3,\, {C_3}^2\} \\ \boldsymbol{H}_\sigma = \{E,\, \sigma_v\}, \quad \boldsymbol{H}_{\sigma'} = \{E,\, \sigma'_v\} \quad \boldsymbol{H}_{\sigma''} = \{E,\, \sigma''_v\} \end{cases} \tag{1.8}$$

部分群 $\boldsymbol{H}_c$ に属さない $\boldsymbol{C}_{3v}$ の元の一つ σ_v を $\boldsymbol{H}_c$ の左から掛けたものを $\sigma_v\boldsymbol{H}_c$，同様に σ'_v, σ''_v を掛けたものを $\sigma'_v\boldsymbol{H}_c$, $\sigma''_v\boldsymbol{H}_c$ とすると，表 1.2 を参照すれば

$$\left.\begin{aligned} \sigma_v\boldsymbol{H}_c &= \{\sigma_v E,\, \sigma_v C_3,\, \sigma_v {C_3}^2\} = \{\sigma_v,\, \sigma'_v,\, \sigma''_v\} \\ \sigma'_v\boldsymbol{H}_c &= \{\sigma'_v E,\, \sigma'_v C_3,\, \sigma'_v {C_3}^2\} = \{\sigma'_v,\, \sigma''_v,\, \sigma_v\} \\ \sigma''_v\boldsymbol{H}_c &= \{\sigma''_v E,\, \sigma''_v C_3,\, \sigma''_v {C_3}^2\} = \{\sigma''_v,\, \sigma_v,\, \sigma'_v\} \end{aligned}\right\} \quad \therefore \quad \sigma_v\boldsymbol{H}_C = \sigma'_v\boldsymbol{H}_C = \sigma''\boldsymbol{H}_c \tag{1.9}$$

となってこの 3 つの集合は同じものになります。したがって，群 $\boldsymbol{C}_{3v}$ は

$$\boldsymbol{C}_{3v} = \boldsymbol{H}_c + \sigma_v\boldsymbol{H}_c \tag{1.10}$$

と和集合の形で表すことができます。$\sigma_v\boldsymbol{H}_c$ のような形の集合を「剰余類」と呼んでいます。これは算数用語集の「剰余類」のところの“ 余りが同じ整数同士の仲間の集合 ”に相当していますね。

次に $\boldsymbol{C}_{3v}$ の部分群として $\boldsymbol{H}_\sigma$ をとり，$\boldsymbol{H}_\sigma$ に属さない $\boldsymbol{C}_{3v}$ の元，$C_3, {C_3}^2, \sigma'_v, \sigma''_v$ について同様の計算をすると

$$\left.\begin{aligned} C_3\boldsymbol{H}_\sigma &= \{C_3 E,\, C_3\sigma_v\} = \{C_3,\, \sigma''_v\} \\ {C_3}^2\boldsymbol{H}_\sigma &= \{{C_3}^2 E,\, {C_3}^2\sigma_v\} = \{{C_3}^2,\, \sigma'_v\} \\ \sigma'_v\boldsymbol{H}_\sigma &= \{\sigma'_v E,\, \sigma'_v\sigma_v\} = \{\sigma'_v,\, {C_3}^2\} \\ \sigma''_v\boldsymbol{H}_\sigma &= \{\sigma''_v E,\, \sigma''_v\sigma_v\} = \{\sigma''_v,\, C_3\} \end{aligned}\right\} \quad \therefore \quad \begin{aligned} C_3\boldsymbol{H}_\sigma &= \sigma''_v\boldsymbol{H}_\sigma \\ {C_3}^2\boldsymbol{H}_\sigma &= \sigma'_v\boldsymbol{H}\sigma \end{aligned} \tag{1.11}$$

となります。(1.11) で $\boldsymbol{H}_\sigma$ の代わりに $\boldsymbol{H}_{\sigma'}$, $\boldsymbol{H}_{\sigma''}$ をとっても事情は同じになります。部分群 $\boldsymbol{H}_\sigma$ を使うと

$$\boldsymbol{C}_{3v} = \boldsymbol{H}_\sigma + C_3\boldsymbol{H}_\sigma + {C_3}^2\boldsymbol{H}_\sigma = \{E,\, C_3, \sigma''_v,\, {C_3}^2,\, \sigma'_v\} \tag{1.12}$$

$$\boldsymbol{C}_{3v} = \boldsymbol{H}_\sigma + \sigma'_v\boldsymbol{H}_\sigma + \sigma''_v\boldsymbol{H}_\sigma = \{E,\, \sigma'_v,\, {C_3}^2,\, \sigma''_v,\, C_3\} \tag{1.13}$$

とも書けます。群 $\boldsymbol{C}_{3v}$ をこのように剰余類の集合に分解することを $\boldsymbol{C}_{3v}$ の「剰余類分解」といいます[9]。なお，上の議論からも分かるように,“ 異なる剰余類は共通の元を含まない ”ことに注意してください。つまり，$\boldsymbol{C}_{3v}$ の元を剰余類というグループに類別しています。

1.4　群と群から群を作る直積

位数が g の群 $\boldsymbol{A} = \{A_1{=}E,\, A_2, \cdots, A_g\}$ と位数が ℓ の群 $\boldsymbol{B}_\ell = \{B_1{=}E,\, B_2, \cdots, B_\ell\}$ があり，$\boldsymbol{A}$ の一つの元 A_i と $\boldsymbol{B}$ の一つの元 B_j から組 A_iB_j をつくると全部で $g \times \ell$ 個の組がつくれます。このような $g \times \ell$ 個の組からなる集合を $\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B}$ と書きます。そして $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ の元が可換 $A_iB_j = B_jA_i$ なら新しい集合 $\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B}$ は群となります（証明は略)。この群を群 $\boldsymbol{A}$ と群 $\boldsymbol{B}$ の「直積群」(direct product of group）といいます。

具体的な例で見ていきましょう。図 1.2 をご覧ください。三角柱の上面，下面の区別はないものとします。xy 平面を水平面とすると正三角柱は対称要素として水平鏡映面 σ_h をもちます。σ_h により正三

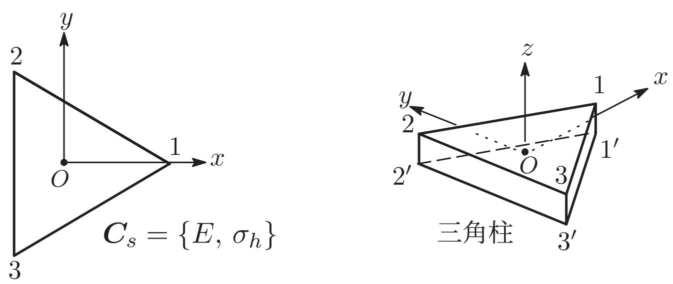

図 1.2: xy 平面：鏡映面 σ_h

角形の上面 (1, 2, 3) と下面 (1′, 2′, 3′) が入れ替わり，$\sigma_h^2 = E$ なので $\sigma_h^{-1} = \sigma_h$ で $\{E,\, \sigma_h\}$ は群を形成します。この群を $\boldsymbol{C}_{1h}$ と名付けます[10]。$\boldsymbol{C}_{3v}$ と $\boldsymbol{C}_{1h}$ の直積から何ができるか見ていきます。$\boldsymbol{C}_{3v}$ の元

$\boldsymbol{C}_{1h}$	E	σ_h
E	E	σ_h
σ_h	σ_h	E

表 1.7: $\boldsymbol{C}_{1h}$ の積表

はいずれも $\boldsymbol{C}_{1h}$ の元と可換なので 2 つの群の直積 $\boldsymbol{C}_{3v} \times \boldsymbol{C}_{1h}$ は定義により直積群となります。

$$\boldsymbol{C}_{3v} \times \boldsymbol{C}_{1h} = \{E,\, C_3,\, {C_3}^2,\, \sigma_v.\, \sigma_v',\, \sigma_v'',\, \sigma_h,\, C_3\sigma_h,\, {C_3}^2\sigma_h,\, \sigma_v\sigma_h,\, \sigma_v'\sigma_h,\, \sigma_v''\sigma_h\} \tag{1.14}$$

$C_3\sigma_h, \cdots$ 等，連続操作を表している元を詳しく見ていきます。z 軸まわりの回転操作 C_n に引き続き鏡映操作 σ_h を行う連続操作を回映操作[11]といい，S_n という記号[12]で表すと $S_n = \sigma_hC_n = C_n\sigma_h$ と書けま

[9] 正確には「左剰余類分解」といいます。
[10] $\boldsymbol{C}_s$ とも書かれる。
[11] ある軸についての回転操作とその軸に垂直な平面についての鏡映操作の積。回転軸を回映軸という。
[12] S は Spiegel の S。ドイツ語で「鏡」を意味します。

す。この回映操作を m 回繰り返す操作を ${S_n}^m$ という記号で表すと，S_3 では

$$\begin{cases} S_3 = \sigma_h C_3 = C_3 \sigma_h \\ {S_3}^2 = S_3 S_3 = C_3 \sigma_h C_3 \sigma_h = C_3 \sigma_h \sigma_h C_3 = C_3 C_3 = {C_3}^2 \\ {S_3}^3 = {S_3}^2 S_3 = {C_3}^2 C_3 \sigma_h = {C_3}^3 \sigma_h = E \sigma_h = \sigma_h \\ {S_3}^4 = {S_3}^3 S_3 = \sigma_h \sigma_h C_3 = E C_3 = C_3 \\ {S_3}^5 = {S_3}^4 S_3 = C_3 C_3 \sigma_h = {C_3}^2 \sigma_h = \sigma_h {C_3}^2 \\ {S_3}^6 = {S_3}^3 {S_3}^3 = \sigma_h \sigma_h = E \end{cases} \tag{1.15}$$

となります（図 1.2 を参照しながら確認してください）。ということで，直積群の元 $C_3\sigma_h$, ${C_3}^2\sigma_h$ はそれぞれ S_3, ${S_3}^5$ の回映操作に当たることが分かります。

次に 3 つの元 $\sigma_v\sigma_h$, $\sigma'_v\sigma_h$, $\sigma''_v\sigma_h$ を調べます。三角形の重心 O から各頂点 1, 2, 3 に向けた軸のまわりの 2 回回転軸をそれぞれ C_2, C'_2, C''_2 とすると

$$\begin{cases} \sigma_v = C_2 \sigma_h = \sigma_h C_2 \\ \sigma'_v = C'_2 \sigma_h = \sigma_h C'_2 \\ \sigma''_v = C''_2 \sigma_h = \sigma_h C''_2 \end{cases}$$

と表せるので，右から σ_h を掛けると，$\sigma_h^2 = E$ なので

$$\begin{cases} \sigma_v \sigma_h = C_2 \\ \sigma'_v \sigma_h = C'_2 \\ \sigma''_v \sigma_h = C''_2 \end{cases} \tag{1.16}$$

が得られます。

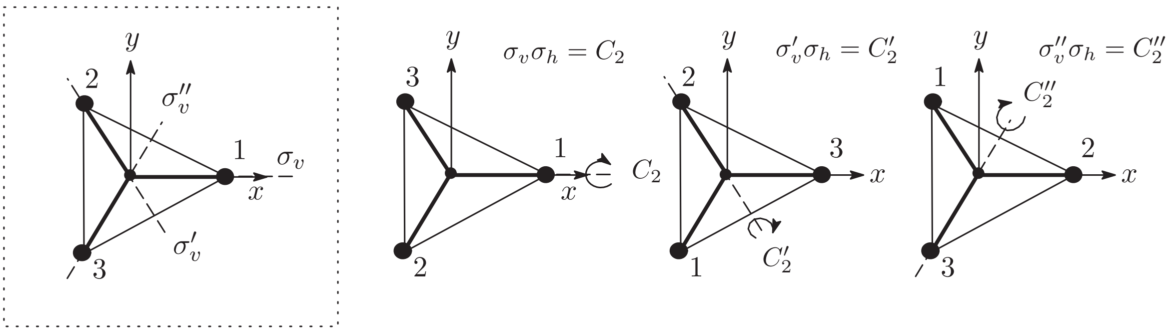

図 1.3: 鏡映と回転の関係

以上のことから直積群 $\boldsymbol{C}_{3v} \times \boldsymbol{C}_{1h}$ の元は

$$\boldsymbol{C}_{3v} \times \boldsymbol{C}_{1h} = \{E,\, C_3,\, {C_3}^2,\, \sigma_v,\, \sigma'_v,\, \sigma''_v,\, \sigma_h,\, S_3,\, {S_3}^5,\, C_2,\, C'_2,\, C''_2\} \tag{1.17}$$

となります。この直積群の元は次の 6 つの類

$$\{E\},\, \{C_3,\, {C_3}^2\},\, \{C_2,\, C'_2,\, C''_2\},\, \{\sigma_h\},\, \{S_3,\, {S_3}^5\},\, \{\sigma_v,\, \sigma'_v,\, \sigma''_v\} \tag{1.18}$$

に分類することができます。そこで各類を代表する元とその類に属する元の数を併せて

$$\{E\} \to \{E\}, \quad \{C_3,\, {C_3}^2\} \to \{2C_3\}, \quad \{C_2, C_2'', C_2''\} \to \{3C_2\}$$
$$\{\sigma_h\} \to \{\sigma_h\}, \quad \{S_3, {S_3}^5\} \to \{2S_3\}, \quad \{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\} \to \{3\sigma_v\}$$

と表すと[13]，直積群 $\boldsymbol{C}_{3v} \times \boldsymbol{C}_{1h}$ は

$$\boldsymbol{C}_{3v} \times \boldsymbol{C}_{1h} = \{E,\, 2C_3,\, 3C_2,\, \sigma_h,\, 2S_3,\, 3\sigma_v\} \tag{1.19}$$

と書けます。この群は点群 $\boldsymbol{D}_{3h}$ と呼ばれる群に当たります。群 $\boldsymbol{D}_{3h}$ は $\boldsymbol{C}_{3v}$ と $\boldsymbol{C}_{1h}$ の直積で得られる群ということになります。

$$\boldsymbol{D}_{3h} = \boldsymbol{C}_{3v} \times \boldsymbol{C}_{1h} \tag{1.20}$$

群 $\boldsymbol{D}_{3h}$ の対称性を有する代表的な分子としては三フッ化ホウ素 BF_3 や五塩化リン PCl_5 などがあります。

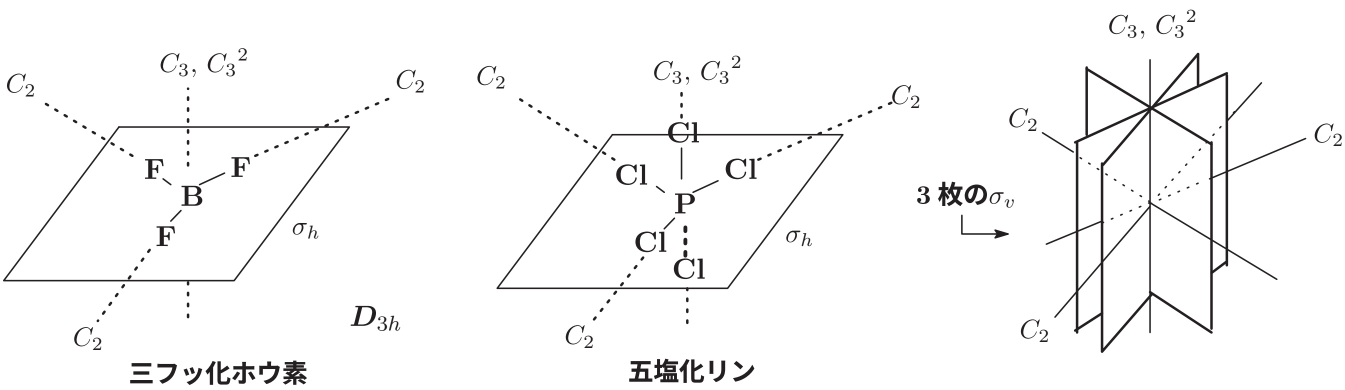

図 1.4: BF_3, PCl_5

直積群の例としては他にいろいろありますが，ここではこれ以上立ち入らないことにします。

$\boldsymbol{D}_{3h}$	E	C_3	${C_3}^2$	C_2	C_2'	C_2''	σ_h	S_3	${S_3}^5$	σ_v	σ_v'	σ_v''
E	E	C_3	${C_3}^2$	C_2	C_2'	C_2''	σ_h	S_3	${S_3}^5$	σ_v	σ_v'	σ_v''
C_3	C_3	${C_3}^2$	E	C_2''	C_2	C_2'	S_3	${S_3}^5$	σ_h	σ_v''	σ_v	σ_v'
${C_3}^2$	${C_3}^2$	E	C_3	C_2'	C_2''	C_2	${S_3}^5$	σ_h	S_3	σ_v'	σ_v''	σ_v
C_2	C_2	C_2'	C_2''	E	C_3	${C_3}^2$	σ_v	σ_v'	σ_v''	σ_h	S_3	${S_3}^5$
C_2'	C_2'	C_2''	C_2	${C_3}^2$	E	C_3	${\sigma_v}'$	${\sigma_v}''$	σ_v	${S_3}^5$	σ_h	S_3
C_2''	C_2''	C_2	C_2'	C_3	${C_3}^2$	E	${\sigma_v}''$	σ_v	${\sigma_v}'$	S_3	${S_3}^5$	σ_h
σ_h	σ_h	S_3	${S_3}^5$	σ_v	${\sigma_v}'$	${\sigma_v}''$	E	C_3	${C_3}^2$	C_2	C_2'	C_2''
S_3	S_3	${S_3}^5$	σ_h	${\sigma_v}''$	σ_v	${\sigma_v}'$	C_3	${C_3}^2$	E	C_2''	C_2	C_2'
${S_3}^5$	${S_3}^5$	σ_h	S_3	${\sigma_v}'$	${\sigma_v}''$	σ_v	${C_3}^2$	E	C_3	C_2'	C_2''	C_2
σ_v	σ_v	${\sigma_v}'$	${\sigma_v}''$	σ_h	S_3	${S_3}^5$	C_2	C_2'	C_2''	E	C_3	${C_3}^2$
${\sigma_v}'$	${\sigma_v}'$	${\sigma_v}''$	σ_v	${S_3}^5$	σ_h	S_3	C_2'	C_2''	C_2	${C_3}^2$	E	C_3
${\sigma_v}''$	${\sigma_v}''$	σ_v	${\sigma_v}'$	S_3	${S_3}^5$	σ_h	C_2''	C_2	C_2'	C_3	${C_3}^2$	E

表 1.8: $\boldsymbol{D}_{3h}$ の積表

[13] このような表し方はこれからもしばしば出てきますので覚えておけばいいでしょう。