科　目　名	学年	番号	学 籍 番 号	氏　　　名
量子化学　第12回	3			

全問解答せよ。試験が近いので，提出しなくてよい。　　　　**授業時間外の学習時間：＿＿＿時間＿＿＿分**

[1] 「詳解　量子化学の基礎」の 18 章の 18.1 節〜18.4 節（279 頁〜294 頁）を読みなさい。

[2] 図 1 に示したような鎖状 $\boxed{\quad\text{(a)}\quad}$，もしくは**鎖状ポリエン**（さじょう）とよばれる物質群の π 電子系の統一的な取り扱いを説明する。

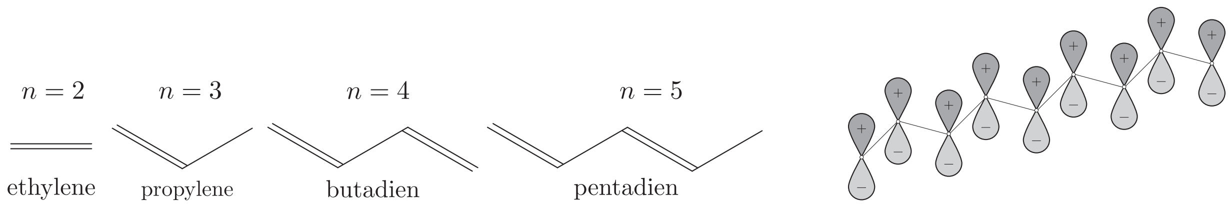


図 1: 鎖状ポリエンの構造式（左からエチレン $n=2$，プロピレン $n=3$，ブタジエン $n=4$，ペンタジエン $n=5$）。これらの πMO は各原子から 1 つずつ p 軌道を持ち寄り，LCAO によって作る。

ここでは n 個の原子からなる鎖状ポリエンの πMO について考える。図 1 に $n=2 \sim n=5$ の鎖状ポリエンの例を示した。各原子から 1 つずつ AO（p 軌道）を持ち寄り，これの LCAO から πMO を作る。

$$\varphi = \sum_{m=1}^{n} c_m \chi_m \tag{1}$$

係数 c_m は次式を解くことによって得られる。

$$\left.\begin{array}{llllll}
-\lambda c_1 & +c_2 & & & & = 0 \\
c_1 & -\boxed{\quad\text{(b)}\quad} & +c_3 & & & = 0 \\
 & \cdots\cdots & & & & \\
 & c_{m-1} & -\lambda c_m & +\boxed{\quad\text{(c)}\quad} & & = 0 \\
 & & & \cdots\cdots & & \\
 & & & c_{n-2} & -\lambda c_{n-1} \quad +c_n & = 0 \\
 & & & & c_{n-1} \quad -\lambda c_n & = 0
\end{array}\right\} \tag{2}$$

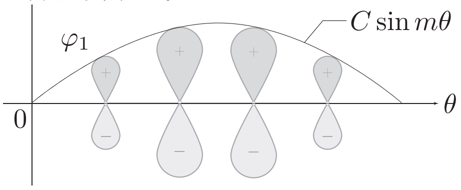
鎖状ポリエンの πMO φ は，1 次元鎖にとじ込められた定常波と考えることができるから，c_m は，

$$c_m = C \sin m\theta \tag{3}$$

とおくことができる[1]。(3) 式を (2) 式の第 2 式〜第 $n-1$ 式に代入すると，

$$c_{m-1} - \lambda c_m + c_{m+1} = 0 \qquad \text{ただし，} m = 2, 3, \cdots, n-1$$

[1] 下図を参照せよ。



$$
\begin{aligned}
\lambda &= \frac{\boxed{\quad(\mathrm{d})\quad} + c_{m+1}}{c_m} && \lambda \text{について整理した} \\
&= \frac{\sin(m-1)\theta + \sin(m+1)\theta}{\sin m\theta} && \text{(3) 式を代入した} \\
&= \frac{2\sin m\theta\cos\theta}{\sin m\theta} = 2\cos\theta \quad \text{ただし}, m = 2, 3, \cdots, n-1 && \sin A + \sin B = 2\sin\left(\frac{A+B}{2}\right)\cos\left(\frac{A-B}{2}\right) \text{より}
\end{aligned} \tag{4}
$$

を得る。この関係は次のように第 1 式でも成り立つ。

$$
\begin{aligned}
\lambda &= \frac{c_2}{c_1} = \frac{\sin 2\theta}{\sin\theta} \\
&= \frac{2\sin\theta\cos\theta}{\sin\theta} = 2\cos\theta && \sin 2A = 2\sin A\cos A \text{ より}
\end{aligned} \tag{5}
$$

鎖状ポリエンは対称であるから，c_1 末端で成り立つ関係は $\boxed{\quad(\mathrm{e})\quad}$ 末端でも成り立つはずである。(2) 式の第 n 式で同じ関係が成り立つには,

$$
\lambda = \frac{c_{n-1}}{c_n} = \frac{\sin(n-1)\theta}{\sin n\theta} = 2\cos\theta \xrightarrow{\text{書き直すと}} \sin(n-1)\theta = 2\sin n\theta\cos\theta \tag{6}
$$

を満たす必要がある。Euler の公式を用いると，上式は次のように書き換えられる。

$$
\begin{aligned}
&\frac{e^{i(n-1)\theta} - e^{-i(n-1)\theta}}{2i} = 2\left(\frac{e^{in\theta} - e^{-in\theta}}{2i}\right)\left(\frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}\right) \\
&\qquad = \frac{e^{i(n+1)\theta} + e^{i(n-1)\theta} - e^{-i(n-1)\theta} - \boxed{\quad(\mathrm{f})\quad}}{2i} && \text{展開した} \\
&e^{-i(n+1)\theta}\left(e^{i2(n+1)\theta} - 1\right) = 0 \xrightarrow{\text{ただちに}} e^{i2(n+1)\theta} - 1 = 0 && \text{整理した} \\
&\underbrace{\cos(2(n+1)\theta)}_{=1} + i\underbrace{\boxed{\quad(\mathrm{g})\quad}}_{=0} = 1 && \text{Euler の公式より} \\
&\xrightarrow{\text{これを満足するのは}} 2(n+1)\theta = 2\pi k \xrightarrow{\text{整理すると}} \theta = \frac{\pi k}{n+1} \quad \text{ただし}, k = 1, 2, \cdots, n
\end{aligned} \tag{7}
$$

以上で，$\theta = \pi k/(n+1)$ とおけば $\lambda = \boxed{\quad(\mathrm{h})\quad}$ と書けることがわかった。これでエネルギーは $E = \alpha + 2\cos\theta\beta$ と求まったから，次に MO の波動関数 φ を決めるために，係数 c_m を定める。これには，いつものように規格化条件を用いる。

$$
\int |\varphi|^2 \mathrm{d}v = \int \left|\sum_{m=1}^{n} (C\sin m\theta)\,\chi_m\right|^2 \mathrm{d}v \qquad \text{(1) 式と (3) 式を代入した} \tag{8}
$$

$$
= \sum_{m=1}^{n} C^2 \sin^2 m\theta = 1 \tag{9}
$$

ここで χ_m は規格化されていることを用い，重なり積分は無視した（Hückel 法）。この式は，Euler の公式を用いると次のように書き換えられる。

$$
\begin{aligned}
\sum_{m=1}^{n} C^2 \sin^2 m\theta &= C^2 \sum_{m=1}^{n} \left(\frac{e^{im\theta} - e^{-im\theta}}{2i}\right)^2 && \text{Euler の公式より} \\
&= -\frac{C^2}{4}\Bigl(\sum_{m=1}^{n} e^{i2m\theta} + \sum_{m=1}^{n} e^{-i2m\theta} - 2\underbrace{\sum_{m=1}^{n} 1}_{=n}\Bigr) && \text{展開した}
\end{aligned} \tag{10}
$$

右辺第 1 項について計算をすると，

$$\sum_{m=1}^{n} e^{i2m\theta} = -1 \tag{11}$$

という結果を得る（計算は，[4] でおこなう）。右辺第 2 項についてもまったく同じ結果を得るので，これらを (10) 式に代入すれば，

$$\sum_{m=1}^{n} C^2 \sin^2 m\theta \quad = \quad -\frac{C^2}{4}(-1-1-2n) = \frac{n+1}{2}\cdot C^2 = 1 \quad \xrightarrow{\text{これよりただちに}} \quad C = \sqrt{\frac{2}{n+1}} \tag{12}$$

を得る。以上で鎖状ポリエン MO の波動関数とエネルギーが求まった。

$$\varphi_k \quad = \quad \sqrt{\frac{2}{n+1}} \sum_{m=1}^{n} \sin\left(\frac{k\pi m}{n+1}\right)\chi_m \tag{13}$$

$$E_k \quad = \quad \alpha + 2\beta\cos\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) \qquad \text{ただし}, k = 1, 2, \cdots, n \tag{14}$$

$n = 2 \sim 5$ の鎖状ポリエンについてエネルギー準位を具体的に計算してみよう。

$$\text{エチレン} \quad (n=2) \quad E_k \quad = \quad \alpha + 2\beta\cos(k\pi/3) \qquad k = 1, 2 \tag{15}$$

$$\text{プロピレン} \quad (n=3) \quad E_k \quad = \quad \alpha + \boxed{\quad \text{(i)} \quad} \qquad k = 1, 2, 3 \tag{16}$$

$$\text{ブタジエン} \quad (n=4) \quad E_k \quad = \quad \alpha + 2\beta\cos(k\pi/5) \qquad k = 1, 2, 3, 4 \tag{17}$$

$$\text{ペンタジエン} \quad (n=5) \quad E_k \quad = \quad \alpha + 2\beta\cos(k\pi/6) \qquad k = 1, 2, 3, 4, 5 \tag{18}$$

(15) 式に $k = 1, 2$ を代入すれば $E_1 = \alpha + \beta$，$E_2 = \alpha - \beta$ となり宿題プリント第 12 回 [6] と一致する。また，$\cos(\pi/5) = -\cos(4\pi/5) = 0.809$，$\cos(2\pi/5) = -\cos(3\pi/5) = 0.309$ だから，(17) 式に $k = 1, 2, 3, 4$ を代入すれば $E_1 = \alpha + 1.618\beta$，$E_2 = \alpha + 0.618\beta$，$E_3 = \alpha - 0.618\beta$，$E_4 = \alpha - 1.618\beta$ となり，宿題プリント第 12 回 [7] と一致する。以上から，エチレンとブタジエンの計算結果が再現されていることを確認できた。

$n = 2 \sim 4$ の計算結果を図 2 に示した。α は π 電子が相互作用していない場合のエネルギー準位であるから，それより下の準位に対応する MO が $\boxed{\quad \text{(j)} \quad}$ 軌道で，高い準位に対応する MO が $\boxed{\quad \text{(k)} \quad}$ 軌道である。n が奇数の鎖状ポリエンには $E = \alpha$ に対応する軌道が存在する。これは $\boxed{\quad (\ell) \quad}$ 軌道となる。また，n が大きくなるにつれてエネルギー準位間隔が小さくなっていくことがわかる。$n \to \infty$ の極限を考えると，エネルギー準位間隔はなくなり，エネルギー準位が連続なバンドを形成するようになると想像できる。これをエネルギー $\boxed{\quad \text{(m)} \quad}$ という。この幅は $\boxed{\quad \text{(n)} \quad}$ となる。

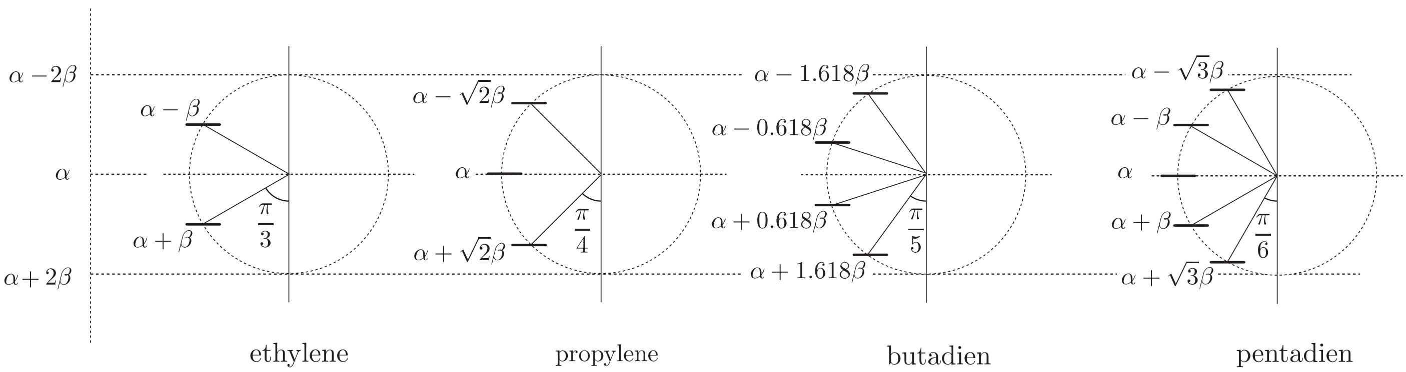


図 2: 鎖状ポリエンのエネルギー準位図：Hückel 近似の範囲では，すべての鎖状ポリエンが同じ α と β の値をとるから，エネルギー準位図は同じ半径 2β の円を使って作図できる。

[3] (8) 式から (9) 式への変形に関する問題である。$n = 3$ として $\int \left| \sum_{m=1}^{n} (C \sin m\theta)\, \chi_m \right|^2 \mathrm{d}v = \sum_{m=1}^{n} C^2 \sin^2 m\theta$ となることを具体的な計算で示せ。

[4] (11) 式を示せ。

[5] 環状構造を持つ不飽和炭化水素を扱う。図 3 に 5 種類の環状 $\boxed{\text{(o)}}$ の構造を示した。

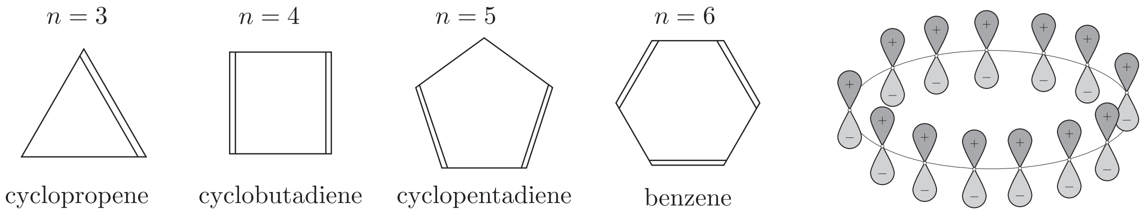


図 3: シクロプロペン $n=3$，シクロブタジエン $n=4$，シクロペンタジエン $n=5$，ベンゼン $n=6$

鎖状ポリエンでやったのと同じように，各原子から 1 つずつ AO を持ち寄り，LCAO により MO を構成する。

$$\varphi \;=\; \sum_{m=1}^{n} c_m \chi_m \tag{19}$$

係数 c_m は次式から決定する。分子が環状の構造をしている，すなわち $m=1$ の原子と $m=\boxed{\text{(p)}}$ の原子が結合しているから，第 1 式と第 n 式が鎖状ポリエンの場合と異なる。

$$\left.\begin{array}{lllllllll}
-\lambda c_1 & +c_2 & & & & & & +\boxed{\text{(q)}} & = 0 \\
c_1 & -\lambda c_2 & +c_3 & & & & & & = 0 \\
 & & \cdots\cdots & & & & & & \\
 & & & c_{m-1} & -\lambda c_m & +c_{m+1} & & & = 0 \\
 & & & & & \cdots\cdots & & & \\
 & & & & & & c_{n-2} \quad -\lambda c_{n-1} & +c_n & = 0 \\
\boxed{\text{(r)}} & & & & & & c_{n-1} & -\lambda c_n & = 0
\end{array}\right\} \tag{20}$$

こんどは係数を $c_m = Ce^{im\theta}$ と指数で書く。(20) 式の第 1 式から，

$$\begin{aligned}
\lambda &= \frac{c_2 + c_n}{c_1} \\
&= \frac{e^{i2\theta} + e^{in\theta}}{e^{i\theta}} = e^{i\theta} + e^{i(n-1)\theta} \qquad c_m = Ce^{im\theta}\text{を代入して整理した}
\end{aligned} \tag{21}$$

を得る。第 2 式 ∼ 第 $n-1$ 式からは，

$$\begin{aligned}
\lambda &= \frac{\boxed{\text{(s)}}}{c_m} \\
&= \frac{e^{i(m+1)\theta} + e^{i(m-1)\theta}}{e^{im\theta}} = e^{i\theta} + e^{-i\theta} \qquad c_m = Ce^{im\theta}\text{を代入して整理した}
\end{aligned} \tag{22}$$

を得る。いま考えている環状ポリエンでは，すべての原子が等価であり，どれか 1 つが特別ということはないから，m の値は形式的なものと考えてよい。すなわち，第 1 式で成り立つ関係はすべての式で成り立たなくてはならない。よって，この 2 式が同時に成り立つとすると，

$$\begin{aligned}
e^{i(n-1)\theta} &= e^{-i\theta} & &\text{(21) 式右辺} = \text{(22) 式右辺} \\
e^{in\theta} &= 1 & &\text{両辺を } e^{-i\theta}\text{で除した}
\end{aligned}$$

$$\underbrace{\cos(n\theta)}_{=1} + i\underbrace{\sin(n\theta)}_{=0} = 1 \qquad \text{Euler の公式より}$$

$$\xrightarrow{\text{これを満足するのは}} \quad n\theta = 2\pi k$$

$$\xrightarrow{\text{整理すると}} \quad \theta = \frac{2\pi k}{n} \quad \text{ただし,} \begin{cases} n \text{ が奇数：} k = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm \boxed{\text{(t)}} \\ n \text{ が偶数：} k = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm (n-2)/2, n/2 \end{cases} \tag{23}$$

でなくてはならない（k は n 個であることに注意）。このとき，(20) 式の第 n 式も同じ結果を与える。

$$\lambda = \frac{c_1 + c_{n-1}}{c_n} = \frac{e^{i\theta} + e^{i(n-1)\theta}}{e^{in\theta}} = e^{i\theta} + e^{in\theta} \cdot e^{-i\theta} = e^{i\theta} + e^{-i\theta} \tag{24}$$

式変形には $e^{in\theta} = 1$ ($\theta = 2\pi k/n$ だから）を用いた。また，λ の形をよくみれば，三角関数で表現できることがわかるから書き換えておこう。

$$\lambda = 2\cos\theta = 2\cos\left(\frac{2k\pi}{n}\right) \tag{25}$$

これで λ すなわち，エネルギー E が決まったから，次に MO の波動関数 φ を求めよう。これにはやはり規格化条件を用いる。

$$\int |\varphi|^2 \mathrm{d}v = \int \left| \sum_{m=1}^{n} \left(Ce^{im\theta}\right) \chi_m \right|^2 \mathrm{d}v = \boxed{\text{(u)}} = 1 \quad \xrightarrow{\text{これよりただちに}} \quad C = \sqrt{\frac{1}{n}} \tag{26}$$

以上で環状ポリエン MO の波動関数とエネルギーが求まった。

$$\varphi_k = \boxed{\qquad \text{(v)} \qquad} \tag{27}$$

$$E_k = \alpha + 2\beta\cos\left(\frac{2k\pi}{n}\right) \quad \text{ただし,} \begin{cases} n \text{ が奇数：} k = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm (n-1)/2 \\ n \text{ が偶数：} k = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm (n-2)/2, n/2 \end{cases} \tag{28}$$

エネルギー準位をいくつか具体的に計算してみよう。

$$\text{シクロプロペン} \quad (n=3) \quad E_k = \alpha + 2\beta\cos(2k\pi/3) \quad k = 0, \pm 1 \tag{29}$$

$$\text{シクロブタジエン} \quad (n=4) \quad E_k = \alpha + 2\beta\cos(2k\pi/4) \quad k = \boxed{\text{(w)}} \tag{30}$$

$$\text{シクロペンタジエン} \quad (n=5) \quad E_k = \alpha + 2\beta\cos(2k\pi/5) \quad k = 0, \pm 1, \pm 2 \tag{31}$$

$$\text{ベンゼン} \quad (n=6) \quad E_k = \alpha + 2\beta\cos(2k\pi/6) \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, 3 \tag{32}$$

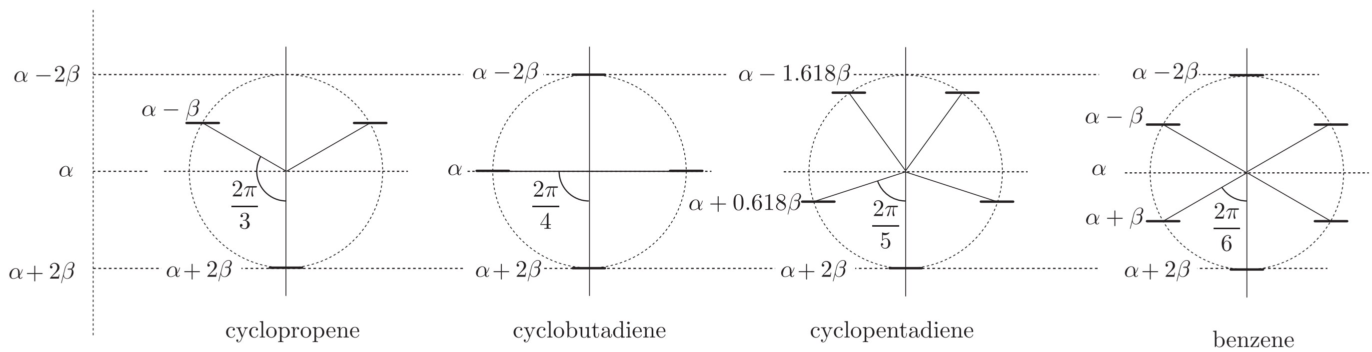


図 4: 環状ポリエンのエネルギー準位図：Hückel 近似の範囲では，すべての環状ポリエンが同じ α と β の値をとるから，エネルギー準位図は同じ半径 2β の円を使って作図できる。

(32) 式に $k=0,\pm1,\pm2,3$ を代入すれば，$E_0=\alpha+2\beta$，$E_{\pm1}=\alpha+\beta$，$E_{\pm2}=\alpha-\beta$，$E_3=\alpha-2\beta$ となり，宿題プリント第 12 回 [8] と一致する。すなわち，ベンゼンの計算結果が再現されている。なお，環状ポリエンのエネルギー準位は $k=0$ と $k=n/2$（n が偶数の場合）を除いて $\boxed{\text{(x)}}$ している。これは，環状ポリエンの大きな特徴であり，鎖状ポリエンは $\boxed{\text{(x) 再出}}$ をまったく示さない。

環状構造を持つ共役不飽和化合物を**アヌレン**とよび，炭素数を [ ] で括って示す。たとえば，シクロブタジエンは [4] アヌレン，シクロペンタジエンは [5] アヌレンと表記する。図 5 にはアヌレンのエネルギー準位と電子配置を示した。アヌレンの種類は炭素数で示した。電子数 n（原子数に等しい）とアヌレンの安定性は非常に密接にかかわっており，次のようにまとめることができる。

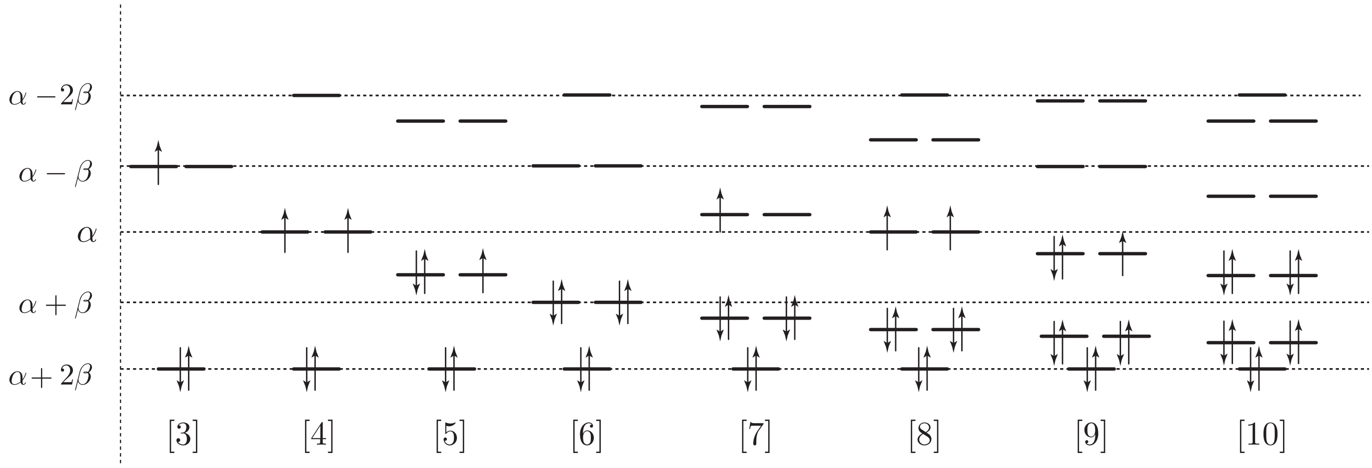


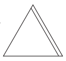
図 5: $n=3\sim10$ 環状ポリエンのエネルギー準位図：[ ] のなかの数値は炭素数を表す。

- $n=4m-1$ ($n=3,7,11,\cdots$)：反結合性軌道に電子が 1 つ入り，分子は $\boxed{\text{(y)}}$ となり，きわめて $\boxed{\text{(z) 安定 or 不安定}}$ である。

- $n=4m$ ($n=4,8,12,\cdots$)：不対電子が $\boxed{(\alpha)}$ 個存在し，非常に $\boxed{(\beta)\ \text{安定 or 不安定}}$。$n=4m$ の環状 π 電子化合物が示す性質を $\boxed{(\gamma)}$ 性という。シクロブタジエンやシクロオクタテトラエン C_8H_8 の場合，n 番目の電子と $n-1$ 番目の電子が $E=\alpha$ の準位に入り，不安定な $\boxed{(\delta)}$ となる。

- $n=4m+1$ ($n=5,9,13,\cdots$)：不対電子が 1 個存在し，$\boxed{(\epsilon)\ \text{安定 or 不安定}}$。

- $n=4m+2$ ($n=6,10,14,\cdots$)：閉殻構造をとり，きわめて $\boxed{(\zeta)\ \text{安定 or 不安定}}$。$n=4m+2$ の環状 π 電子化合物を $\boxed{(\eta)}$ 化合物という。π 電子数が $n=4m+2$ である環状化合物が $\boxed{(\zeta)\ \text{再出}}$ であることを $\boxed{(\theta)}$ 則という。何と言ってもベンゼンが代表的な物質である。

[6]　シクロプロペン  の πMO を求めよ。ただし，波動関数の係数は実数化せよ。

解答

[1]　なし

[2]　(a)：不飽和炭化水素　(b)：λc_2　(c)：c_{m+1}　(d)：c_{m-1}　(e)：c_n　(f)：$e^{-i(n+1)\theta}$
(g)：$\sin(2(n+1)\theta)$　(h)：$2\cos\theta$　(i)：$2\beta\cos(k\pi/4)$　(j)：結合性　(k)：反結合性
(ℓ)：非結合性　(m)：バンド　(n)：$4|\beta|$

[3]

$$\begin{aligned}
\int|\varphi|\mathrm{d}v &= \int|\sum_{m=1}^{3}(C\sin m\theta)\,\chi_m|^2\mathrm{d}v \\
&= \int\left(C\sin\theta\chi_1 + C\sin 2\theta\chi_2 + C\sin 3\theta\chi_3\right)^2\mathrm{d}v \qquad \textstyle\sum\text{を展開した}, \chi_m\text{を実関数とした} \\
&= C^2\sin^2\theta\underbrace{\int\chi_1^2\mathrm{d}v}_{=1\text{：規格化}} + C^2\sin\theta\sin 2\theta\underbrace{\int\chi_1\chi_2\mathrm{d}v}_{=0\text{：重なり積分}} + C^2\sin\theta\sin 3\theta\underbrace{\int\chi_1\chi_3\mathrm{d}v}_{=0\text{：重なり積分}} \\
&+ C^2\sin 2\theta\sin\theta\underbrace{\int\chi_2\chi_1\mathrm{d}v}_{=0\text{：重なり積分}} + C^2\sin^2 2\theta\underbrace{\int\chi_2^2\mathrm{d}v}_{=1\text{：規格化}} + C^2\sin 2\theta\sin 3\theta\underbrace{\int\chi_2\chi_3\mathrm{d}v}_{=0\text{：重なり積分}} \\
&+ C^2\sin 3\theta\sin\theta\underbrace{\int\chi_3\chi_1\mathrm{d}v}_{=0\text{：重なり積分}} + C^2\sin 3\theta\sin 2\theta\underbrace{\int\chi_3\chi_2\mathrm{d}v}_{=0\text{：重なり積分}} + C^2\sin^2 3\theta\underbrace{\int\chi_3^2\mathrm{d}v}_{=1\text{：規格化}} \\
&= C^2\sin^2\theta + C^2\sin^2 2\theta + C^2\sin^2 3\theta = \sum_{m=1}^{3}C^2\sin^2 m\theta
\end{aligned}$$

[4]

$$\begin{aligned}
\sum_{m=1}^{n}e^{i2m\theta} &= e^{i2\theta}+e^{i4\theta}+e^{i6\theta}+\cdots+e^{i2n\theta} && \text{展開したら初項 }e^{i2\theta}\text{，公比 }e^{i2\theta}\text{の等比数列の和だった} \\
&= \frac{e^{i2\theta}\left(1-e^{i2\theta n}\right)}{1-e^{i2\theta}} && S_n = a+ar+ar^2+\cdots = \frac{a(1-r^n)}{1-r}\text{より} \\
&= \frac{e^{i2\theta}-e^{i2\theta(n+1)}}{1-e^{i2\theta}} = \frac{e^{i2\theta}-e^{i2\pi k}}{1-e^{i2\theta}} && \text{展開した, (7) 式より} \\
&= \frac{e^{i2\theta}-1}{1-e^{i2\theta}} = -1 && e^{i2\pi k}=1\text{ を代入した}
\end{aligned}$$

[5]　(o)：ポリエン　(p)：n　(q)：c_n　(r)：c_1　(s)：$c_{m+1}+c_{m-1}$　(t)：$(n-1)/2$
(u)：nC^2　(v)：$\sqrt{\frac{1}{n}}\sum_{m=1}^{n}e^{i2k\pi m/n}\chi_m$　(w)：$0, \pm1, 2$　(x)：縮退　(y)：ラジカル
(z)：不安定　(α)：2　(β)：不安定　(γ)：反芳香族　(δ)：ジラジカル　(ϵ)：不安定
(ζ)：安定　(η)：芳香族　(θ)：Hückel

[6] (27) 式に $n=3$ を代入すると次式を得る。

$$\varphi_k = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(e^{2\pi ki/3}\chi_1 + e^{4\pi ki/3}\chi_2 + e^{6\pi ki/3}\chi_3\right) \qquad \text{ただし}, k=0\,,\pm1$$

$$\xrightarrow{k=0,\pm1\text{ を代入すると}}\begin{cases}
\varphi_0 = \dfrac{1}{\sqrt{3}}\left(\chi_1+\chi_2+\chi_3\right) \\
\varphi_{+1} = \dfrac{1}{\sqrt{3}}\left(e^{2\pi i/3}\chi_1 + e^{4\pi i/3}\chi_2 + \chi_3\right) \\
\varphi_{-1} = \dfrac{1}{\sqrt{3}}\left(e^{-2\pi i/3}\chi_1 + e^{-4\pi i/3}\chi_2 + \chi_3\right)
\end{cases}$$

ただし，$e^{2\pi i} = \cos 2\pi + i\sin 2\pi = 1$ を使った。φ_{+1} と φ_{-1} の係数が複素数であるから，これを実数化しなくては

ならない。φ_{+1} と φ_{-1} は縮退しているから，これらの線形結合をとり係数を実数化する。

$$\begin{aligned}
\varphi_+ &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{+1}+\varphi_{-1}) = \frac{1}{\sqrt{6}}\left[\underbrace{\left(e^{2\pi i/3}+e^{-2\pi i/3}\right)}_{=2\cos(2\pi/3)=-1}\chi_1 + \underbrace{\left(e^{4\pi i/3}+e^{-4\pi i/3}\right)}_{=2\cos(4\pi/3)=-1}\chi_2 + 2\chi_3\right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}}(-\chi_1-\chi_2+2\chi_3) \\
\varphi_- &:= \frac{1}{\sqrt{2}i}(\varphi_{+1}-\varphi_{-1}) = \frac{1}{\sqrt{6}i}\left[\underbrace{\left(e^{2\pi i/3}-e^{-2\pi i/3}\right)}_{=2i\sin(2\pi/3)=\sqrt{3}i}\chi_1 + \underbrace{\left(e^{4\pi i/3}-e^{-4\pi i/3}\right)}_{=2i\sin(4\pi/3)=-\sqrt{3}i}\chi_2\right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_1-\chi_2)
\end{aligned}$$

今日の講義でわからないことがあれば，お伝えください。また，講義に対する要望があればお書きください。感想などでも結構です。もちろん，成績等には一切関係ありません。

✎ 記述欄