

分子分光学 (20260518) M: 以下は宮本のコメント

- 22S2015:** 指標表の直交の計算がわからなかった M: そうですね. しかしこれは, 質問になっていません. // 線形代数の基本を復習する必要があるのでは?
- 23S2011:** 表現行列がブロック対角できると、なぜその表現は可約だと言えるんですか? M: それが定義だから. // 講義中でも説明した通りです. 簡約 (reduction) して次数の低い表現行列を得ることができるようなものを可約表現 (reducible representation) といいます. 専門用語の日本語の方は聞きなれない言葉かもしれませんが, 英語の方は“行列の次数を減らすことができる”という事実を素直に述べていて、名は体を表しているだけです. // もうちょっと言葉の意味に注意を払っても良いのでは?
- 23S2022:** 有機化学において群論の視点から分析するのは可能でしょうか M: 他の分野の知識を利用するにはイケナイ, 利用できない, 等の制限はあるのでしょうか? // 有機分子の性質を群論的に考えることはできないのでしょうか? 群論の視点から分析することができる分子の種類には制限があるのでしょうか?
- 23S2052:** 表現を既約表現へ分解できることから、群の本質的な性質は既約表現に現れているように感じましたが、なぜ既約表現が基本単位として特別に重要なのでしょうか? M: たとえば, “物質は分子や原子を基本単位としてできているので, 原子は重要です.” との文にギモンを感じますか? // 西洋発祥の現代の科学は, その中心的な思想の一つとして“要素還元主義”があると思われれます. 科学史を勉強すればいいのでは?
- 24S2002:** 既約表現の字数が同じ行列は可約表現の時点で似た形しか取りませんか M: “字数”は“次数”の誤りだと思われれますが..... // 意味がよくわかりません. “似た形”とは, 具体的に何のことでしょうか?
- 24S2009:** 表現行列は適切な基底を取るとブロック対角化ができると習ったのですが、既約表現に分解できる基底ってどうやって見つけることができるのですか? M: “表現行列は適切な基底を取るとブロック対角化ができる”と, どこで習ったのでしょうか? 少なくとも私は講義で説明していません. // 事実としては間違っていないのですが..... // 今回の場合で言えば, その点群の既約表現の基底になっているようなものを選べば, そして同じ既約表現に属する関数の線形結合を基底を選べば, 表現行列は既約表現ごとにブロック対角化されています.
- 24S2036:** 点群 C_{2v} の積表を見てみると、一方の対称操作 A ともう一方の対称操作 B について $AB=BA$ が成り立っていることがわかる。一方で、 C_{3v} の積表では、 $AB=BA$ は成り立っていないが、AB と BA の対称操作の種類は同じになっている。確認した限りでは点群 S_4 、 C_{3h} の積表は前者のパターンであり、 C_{4v} では後者のパターンであった。そこで、ある点群の対称操作の積表は、必ず上の 2 種類のパターンのいずれかに当てはまっているのではないか。 M: 全ての点群について調べたことは無いので, 私は知りません. // 群の定義 (要件) に, 二つの要素を結合させる演算に対して可換であることは必要とされていない. 事実, 点群では可換なものとは非可換なものがある. // 後者のパターンで言うところの“AB と BA の対称操作の種類は同じ”の種類とは何か?
- 24S2040:** 指標表の A_1, A_2 の A と B_1, B_2 の A と B の違いはなんですか M: 教科書 pp. 500-501 を読めばいいのでは? 参考書を読むのもいいし.....
- 24S2054:** ある群の i 番目における既約表現の次数 l_i は、群における 3 番目の既約表現ならば $l_i = 3$ という考えであっていますか? M: いいえ. “既約表現の次数”とは, 表現行列の次数のことです. そのように講義で説明したつもりなのだが, 伝わってなくて残念. // “i 番目における既

約表現” という言い方に違和感があり, 意味がよく分からない.