

分子分光学 (20260525) M: 以下は宮本のコメント

- 23S2011:** 変位ベクトルを基底に選ぶことで、対称操作を行列として表せるようになるのはなぜですか？
M: 微妙に誤解している予感. // 変位ベクトルを基底に選ばなくても対称操作を行列として表すことができるのは、講義で示した通り. もちろん変位ベクトルを基底に選んでも表現行列を作ることはできる.
- 23S2052:** 表現行列を作る手順では基底関数をどう選ぶかが重要だと感じましたが、良い基底とはどのような基準で決まるのでしょうか？ **M:** “良い基底”とは、どういうものですか？ // 普通は調べたいものを基底に選ぶ. 表現行列を作るのが目的ではなく、議論の対象となるモノの対称性を知ることが目的なので、それがどんな既約表現に属するかが重要となるので.
- 24S2002:** 簡約表現を考える際、元の状態の分子を構成する原子もしくは要素に対する番号だ付けはルールなどなく自由に付けて良いですか **M:** “良い”とは、どうなることですか？ // 自分で色々番号付けを変えてやってみればいいのでは？
- 24S2009:** 既約表現の指標が直交しているから簡約できると習いましたが、もし直交していない基底で考えた場合でも同じように分解はできるのですか？ **M:** 微妙に誤解している予感. // “直交しているから簡約できる”のではなく、“直交していることを利用して簡約する”. // 斜方座標系だとすれば可能か？ でもその時は、内積の定義をどうする??
- 24S2036:** 直交性定理はどんなふうにして導かれるのだろうか。また、ある可約な表現行列を適切な正規行列 S により相似変換してブロック対角化する際、その S は試行錯誤によって導かれるのか。それとも、煩雑だが系統的な方法があるのか。 **M:** 直交性定理の証明は、講義では省略しました. 参考書を参照してください. // ブロック対角化するための行列 S は、射影演算子を利用すれば、ある程度は系統的に求めることができます. でも私たちが知りたい分子の性質のためには、指標がわかれば充分.
- 24S2054:** 表現行列を作る際に、変換行列を考えるとありますが、変換行列は各対称操作によって決まった形の行列があるのでしょうか？ **M:** 講義で作って見せたように、選んだ基底が異なれば、同じ点群の同じ対称操作に対して異なる表現行列になることは明らかだと思うのだが？ // つまり“決まった形”にならないことは自明では？ あ、恒等操作については単位行列になると決まっているか... でも次元は基底に依存するか.