

分子分光学 (20200608) **M:** 以下は宮本のコメント

- 16s2008:** 可約表現 (Γ) を用いて $\Gamma = n_1 n_2 n_3$ のように記載されているがこれに順番は存在するのか。// また、既約表現についても、適当な記号を用いて $A_1 = 1\ 1\ 1$ のように記載してもよいのか。 **M:** その数字の並び $n_1 n_2 n_3$ の意味は？ // 既約表現なら “ A_1 ” などと名前を言えば、どういう対称性の表現なのかは自明。
- 16s2019:** 異値な表現を、高次元の表現行列を簡約することで次数を合わすことができれば同値な表現になりうるのか。 **M:** 意味不明。 “次数を合わす” とは何のことか？ 次数が合ったからと言って同値なわけではない。 // “異値な表現” とか “同値な表現” の意味を理解していないのでは？
- 16s2043:** 直積を行った ($n \times m$ 次元) を基底としたときの例の 2 粒子系とは具体的にどのようなものなのか。 **M:** 行列の次元については一般的な例ではあったが、2 粒子系ということであれば、われわれの興味があるものは分子であって、分子は多電子系である。つまり複数の粒子が様々な対称性を持つ (既約表現に属す) MO を占有している系。
- 18s2018:** 指標表での既約表現が多いときどう考えれば良いか。 **M:** “既約表現が多い” とは、どういう意味か？ 多い点群では多い、いくつあるかは点群によって異なるとしか言いようがない。
- 18s2045:** 指標表の右にある xy や x,xz などの記号はどのように用いるのですか。 $C1, Cs, Ci$ 群の指標表についての解釈を与えると、どのようになりますか。 **M:** それらの関数が、その既約表現の基底になっている。詳細 (というか使い方) は後日説明します。// 後半の意味が分からない。 “ $○○$ 群の指標表についての解釈” とは、いったい何のことか？
- 18s2051:** 今までの講義内であまり金属を含む化合物を話題に出していないし、教科書 1 3 章を見てみてもあまり金属が話題に上がっていないような気がします。金属を含む化合物は赤外線吸収を用いた測定には向いていないのでしょうか？ **M:** 気のせいでは？