

期末試験問題 (2017.7.19)

以下の 4 題より 3 題を選択して解答せよ。

1. H_2O 分子の振動モードの既約表現が A_1, A_1, B_2 になることを、 C_{2v} 点群の指標表をもちいて説明せよ。

(Using the character table of C_{2v} point group, explain that the vibration modes of H_2O molecule are assigned to A_1, A_1, B_2 as irreducible representations.)

	E	C_2	$\sigma'_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1

2. 摂動論と二状態モデルにもとづき、光励起の確率が遷移双極子モーメントの二乗に比例する理由を説明せよ。

(Explain the reason why the probability of photoexcitation is proportional to the square of transition dipole moment, based on the perturbation theory and the two-state model.)

3. 質量換算 Hessian 法によって規準振動 (基準振動) モードを解析する手順について、適当な例を示しつつ明快に説明せよ。

(Give a clear explanation for the procedure of normal mode vibration analysis, with showing some appropriate examples.)

4. 異核二原子分子を例にとり、剛体回転子近似、高温近似のもとで、分子の回転運動がどのようにしてその熱容量に寄与するか説明せよ。

(Taking a hetero-diatom molecule as an example, explain how the molecular rotation contributes to its heat capacity, under rigid rotor approximation and high-temperature approximation.)