

レポート課題(提出〆切 2020.7.22)

以下の 4 題より 3 題を選択して解答せよ。

(Select 3 problems out of the following 4.)

1. 量子化された剛体回転子について、その形状(球対称、扁平対称、扁長対称)とエネルギーの関係をわかりやすく説明せよ。全角運動量量子数  $J = 2$  としてよい。

(For quantized rigid rotors, clearly explain the relation between their shapes (spherical, flat, prolate symmetries) and energy. Assume that the total angular momentum quantum number  $J = 2$ .)

2. 質量換算 Hessian 法によって基準振動モードを解析する手順について、 $\text{CO}_2$  の分子軸方向の原子変位を例にとりて明快に説明せよ。

(Give a clear explanation for the procedure of normal mode vibration analysis in the framework of the mass-weighted Hessian method, with taking atomic displacement along the molecular axis as an example.)

3.  $\text{H}_2\text{O}$  分子の三種の分子内振動モードは、それぞれどの向きの偏光によって励起されるか。 $C_{2v}$  点群における既約表現と遷移双極子モーメントの考え方に基づいて説明せよ。

(In what orientation a polarized light can excite the three distinct intramolecular vibration modes. Explain the reason based on the irreducible representations in  $C_{2v}$  point group and the idea of transition dipole moment.)

4. 単原子分子を例にとり、並進運動のエネルギー表式から出発して理想気体の状態方程式を導出せよ。

(Taking a monoatomic molecule as an example, derive the state equation of ideal gas, starting from the energy representation of translational motion.)