

レポート課題(提出〆切 2021.7.28)

以下の 4 題より 3 題を選択して解答せよ。レポートは Word 等のソフトウェアで作成し、PDF に変換して ITC-LMS に提出すること(数式の作成などに困難がある場合は手書きをスキャンしたものでも可)。

(Select 3 problems out of the following 4. The report, preferably made with software like Word and converted to PDF, should be submitted through ITC-LMS. The scanned copy of the hand-write is also accepted if you have difficulty in making the formula.)

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、 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. H_2O 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 can a polarized light 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.)