［化学物理Ｉ（基礎）］（全２題）

［問題１］

基底状態のエネルギーが$-h\nu/2$、励起状態のエネルギーが$h\nu/2$で表される N 個の２準位分子からなる系がある。

問 A　N=１の場合の表を参考に N=２、３の場合に対し、系の取りうるエネルギーとそれに対応する状態数を表にせよ。

N=1 でのエネルギーと状態数

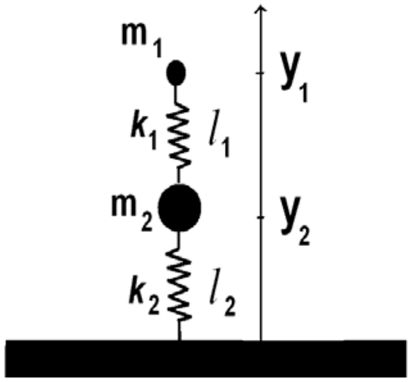
エネルギー	状態数
$\frac{h\nu}{2}$	1
$-\frac{h\nu}{2}$	1

問 B　分配関数は$Z=\sum_n g_n \exp\left[-E_n/k_BT\right]$で表される。ここで$T$は温度、$k_B$はボルツマン定数、$E_n$は状態$n$に対するエネルギー、$g_n$は縮重度である。$N$=2、3 の場合について分配関数を示せ。

問 C　N=3 の場合についてヘルムホルツ自由エネルギー（$F=-k_BT\ln Z$）、エントロピー（$S=-\left(\partial F/\partial T\right)$）、内部エネルギー（$U$）、比熱($C=\left(\partial U/\partial T\right)$)を求めよ。

[問題 2]

固体表面に吸着した２原子分子の垂直（y 軸）方向の運動を、固定端よりバネで結び付けられた２質点のモデルを用いて解析する。それぞれの原子の位置を y_1、y_2、質量を m_1、m_2、それぞれのバネのつりあいの位置での長さを l_1、l_2、バネ定数を k_1、k_2 とする（右図参照）。



問 A　原子位置 y_1、y_2 に対する運動方程式を書け。

問 B　問 A の運動方程式を $\delta y_1 = y_1 - l_1 - l_2$、$\delta y_2 = y_2 - l_2$ と変数変換して書き直せ。

問 C　解を $\delta y_1 = A_1 \cos(\omega t)$、$\delta y_2 = A_2 \cos(\omega t)$ と置いて代入し、問 B の結果を A_1、A_2 を列ベクトルの要素とする行列形式で表せ。

問 D　$A_1 = 0$ 及び $A_2 = 0$ の自明な解以外の解を得るための条件式（永年方程式）を書き ω^2 について解け。

問Ｅ　$m_1 = M$、$m_2 = 2M$、$k_1 = k_2 = K$ について永年方程式を解くことにより固有振動数の２乗 ω^2 と、その振動数に対する A_1 と A_2 の関係を求め、A_2 を正の単位ベクトルに選び $t = 0$ でのそれぞれの振動数に対する運動の方向（振動モード）を図示せよ。