

[ 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

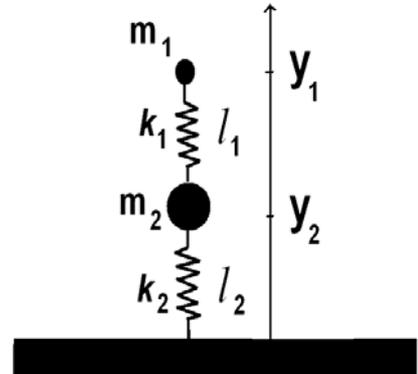
問 B 分配関数は  $Z = \sum_n g_n \exp[-E_n/k_B T]$  で表される。ここで  $T$  は温度、 $k_B$  はボルツマン定数、 $E_n$  は状態  $n$  に対するエネルギー、 $g_n$  は縮重度である。 $N=2$ 、 $3$  の場合について分配関数を示せ。

問 C  $N=3$  の場合についてヘルムホルツ自由エネルギー ( $F = -k_B T \ln Z$ )、エントロピー

( $S = -(\partial F / \partial T)$ )、内部エネルギー ( $U$ )、比熱 ( $C = (\partial U / \partial T)$ ) 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  $\omega^2$  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  $\omega^2$  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。