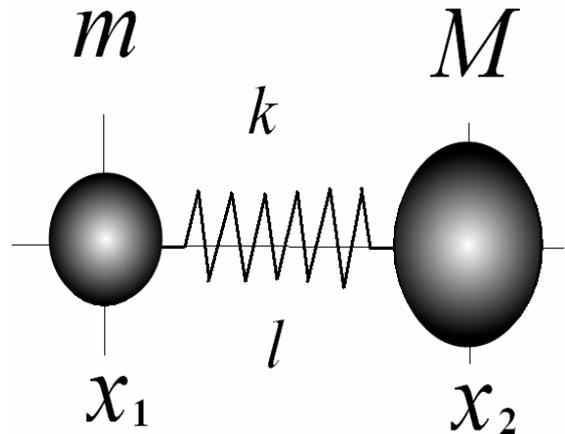


[化学物理 I(基礎)] (全2題)

[問題 1]

次の文章を読んで、以下の問いに答えよ。

質量がそれぞれ m , M をもつ原子から構成された 2 原子分子の分子内振動を考える。(回転運動は無視してよい)。原子間の力は調和振動子ポテンシャルで記述されるとし、その釣り合いの長さを l , バネ定数を k とする。座標軸は原子核間の方向に選び、それぞれの原子の位置を x_1 , x_2 で表す(右図参照)。また x_1 , x_2 にある粒子にはそれぞれ速度と質量に比例した摩擦力 $-2m\gamma dx_1/dt$, $-2M\gamma dx_2/dt$ が働くとする。ここで γ は摩擦係数である。



問 A それぞれの原子に対する運動方程式を x_1 , x_2 を使って表せ。

問 B 変数 $\delta x = x_2 - x_1 - l$ を用いて、問 A の運動方程式を x_1 , x_2 を消去した形で表せ。

この時 $\omega_0^2 = k/\bar{m}$ とおくとよい。ここで $\bar{m} = mM/(m+M)$ である。

問 C 問 B で導いた微分方程式を $\omega_0 > \gamma$ (減衰振動) の場合について解け。初期条件は任意とする。(解を $\delta x = Ce^{-at} \sin(bt + \delta)$ と仮定し、定数 a , b を定めることにより解いてもよい。ここで C , δ は初期値により決定される定数である)。

問 D この分子は電気双極子モーメント $q\delta x$ を持ち、レーザー場 $E \cos(\omega t)$ により分子座標 δx に関して $f(t) = qE \cos(\omega t)$ の力を受けて運動する。ここで q , E は定数である。この場合の運動方程式を \bar{m} を用いて書き下し、定常解 (t が十分経過し過渡的な運動が終わった後の解) を、 $\delta x = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t)$ とおいて、定数 A , B を定めることにより求めよ。

[問題 2]

次の文章を読んで、以下の問いに答えよ。

電極の表面に N 個の電気双極子 μ を持つ分子が付着している系を考える。簡単のために双極子は上下2方向しか配向しないと仮定する。図のように電極表面には下向きに静電場 E がかかっており、双極子が上を向いた時のエネルギーを $U_+ = \mu E$ 、下を向いた時のエネルギーを $U_- = -\mu E$ で表し、双極子間の相互作用はないと仮定する。また吸着した分子は移動しないとす。

問 A 双極子が上側に n_+ 個、下側に n_- 個向いた時のエネルギー U を表せ。

問 B 上同士、下同士の双極子の状態は区別できないものとして、双極子が上側に n_+ 個(下側に n_- 個)向いた時の状態数を $N = n_+ + n_-$ と、 $Q = (n_+ - n_-)/2$ を用いて示せ。

問 C この時のエントロピー S を計算し、結果を N 、 n_+ 、 n_- を用いて表せ。ここで n_+ 、 n_- は非常に大きくスターリングの公式 $\ln x! \approx x \ln x - x$ ($x \gg 1$) を用いてもよい。ボルツマン定数は k とする。

問 D 問 C で求めたエントロピー S は、問 A の結果よりエネルギーと結びついており ($S(U)$)、エントロピーをエネルギーで微分することにより、温度と関係づけられる。このことを用いて温度 T での n_+ と n_- の期待値を求めよ。ただし $n_- < n_+$ の場合については考えなくてよいものとする。

問 E 温度 T での双極子分子1個あたりの平均エネルギー \bar{U} を求めよ。

