

## 基礎機能化学 レポート課題 (2012年度 北條)

下記の各課題につき、それぞれ A4 紙 1 ページ程度にまとめよ。手書きでもワープロでもよいが、手書きが望ましい。2012 年 7 月 26 日 (金) 17:00 までに化生系事務室か北條宛に提出すること。

(1) 二酸化炭素 (CO<sub>2</sub>) の振動スペクトルについて、調和振動子近似に基づいて解析せよ。具体的には、C=O 結合の力の定数を  $K$  として対称伸縮と反対称伸縮の固有振動数がそれぞれ  $\sqrt{\mu_0 K}$ ,  $\sqrt{(\mu_0 + 2\mu_c)K}$  となることを示し、実験値  $1333\text{ cm}^{-1}$ ,  $2349\text{ cm}^{-1}$  と比較せよ。 $\mu_0$ ,  $\mu_c$  はそれぞれ酸素原子、炭素原子の質量の逆数である。

(2) 角運動量の量子力学的な演算子は、

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}$$

と書くことができる。球面調和関数  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  が  $\hat{L}^2$  の固有関数であることを示し、固有値を求めよ。 $Y_l^m(\theta, \varphi)$  の一般式について証明してもよいし、いくつかの具体的な関数について計算してもよい。

(3) 水分子の三つの慣性主軸に関して、温度  $T = 300\text{ K}$  における、0 ~ 10 番目の回転準位にある分子の割合をそれぞれ求めよ。分配関数は高温極限近似を用いよ。