

期末試験問題 (2016.7.20)

以下の 4 題より 3 題を選択して解答せよ。

1. H₂O 分子の振動モードの既約表現が A₁, A₁, B₂ になることを、C_{2v} 点群の指標表をもちいて説明せよ。

(Using the character table of C_{2v} point group, explain that the vibration modes of H₂O molecule are assigned to A₁, A₁, B₂ as irreducible representations.)

	E	C ₂	σ' _v (xz)	σ _v (yz)
A ₁	1	1	1	1
A ₂	1	1	-1	-1
B ₁	1	-1	1	-1
B ₂	1	-1	-1	1

2. 摂動論と二状態モデルにもとづき、光励起の確率が遷移双極子モーメントの二乗に比例する理由を説明せよ。

(Explain the reason why the probability of photoexcitation is proportional to the square of transition dipole moment, based on the perturbation theory and the two-state model.)

3. 二原子分子について、調和近似に基づき分子内振動の分配関数を導出せよ。また、それを多原子分子系に拡張した式も示せ。

(Based on the harmonic approximation, derive the partition function of intramolecular vibrations for a diatomic molecule. Also show a formula extended for a polyatomic molecule.)

4. 孤立系のエントロピーを S_{system} とする。A 個の孤立系からなるアンサンブルが平衡状態にあるとき、アンサンブルの全エントロピー S_{ensemble} が AS_{system} となることを示せ。Stirling の式をもちいてよい。

(S_{system} is the entropy of an isolated system. Show that the total entropy S_{ensemble} of the ensemble composed of A isolated systems equals AS_{system}, when the ensemble is equilibrated. You can use Stirling's formula.)