基礎機能化学 I 2018 年 担当:北條

## 期末試験問題(2018.7.18)

以下の4題より3題を選択して解答せよ。

(Select 3 problems out of the following 4.)

1. 量子化された剛体回転子について、その形状(球対称、扁平対称、扁長対称)とエネルギーの関係をわかりやすく説明せよ。全角運動量量子数 J=2 としてよい。

(For quantized rigid rotors, clearly explain the relation between their shapes (spherical, flat, prolate symmetries) and energy. Assume that the total angular momentum quantum number J = 2.)

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. 質量換算 Hessian 法によって規準振動 (基準振動) モードを解析する手順について、CO<sub>2</sub> の分子軸方向の原子変位を例にとって明快に説明せよ。

(Give a clear explanation for the procedure of normal mode vibration analysis in the framework of the mass-weighted Hessian method, with taking atomic displacement along the molecular axis as an example.)

4. 単原子分子を例にとり、並進運動のエネルギー表式から出発して理想気体の状態方程式を導出せよ。

(Taking a monoatomic molecule as an example, derive the state equation of ideal gas, starting from the energy representation of translational motion.)