

以下の 4 題より 3 題を選択して解答せよ。レポートは Word 等のソフトウェアで作成し、PDF に変換して ITC-LMS に提出すること(数式の作成などに困難がある場合は手書きをスキャンしたものでも可)。

(Select 3 problems out of the following 4. The report, preferably made with software like Word and converted to PDF, should be submitted through ITC-LMS. The scanned copy of the handwrite is also accepted if you have difficulty in making the formula.)

1. 多原子分子の形状をその慣性主値にもとづいて分類し、量子化された回転運動エネルギーとの関係をわかりやすく説明せよ。全角運動量量子数  $J = 2$  とする。

(Classify the shape of polyatomic molecules based on their principal values of inertia, and clearly explain the relation to their rotational kinetic energies. Assume that the total angular momentum quantum number  $J = 2$ .)

2. 質量換算 Hessian 法によって基準振動モードを解析する手順について、 $\text{CO}_2$  の分子軸方向の原子変位を例にとって説明せよ。C, O の質量の逆数を  $\mu_C, \mu_O$ 、C=O 結合の力の定数を  $k$  とし、2 個の基準振動モードのモード質量とモード剛性を明示せよ。

(Explain the procedure of normal mode vibration analysis in the framework of the mass-weighted Hessian method, taking atomic displacement along the molecular axis as an example. Assuming the reciprocal mass  $\mu_C$  and  $\mu_O$  for C and O atoms, and the force constant  $k$  for the C=O bond, specify the modal mass and modal stiffness for the two normal-mode vibrations.)

3.  $\text{H}_2\text{O}$  分子の三種の分子内振動モードは、それぞれどの向きの偏光によって励起されるか。遷移双極子モーメントの考え方に基づいて説明せよ。三原子の  $x, y, z$  変位からなる可約表現を  $C_{2v}$  点群における既約表現に簡約する過程も示すこと。

(In what orientation can a polarized light excite the three distinct intramolecular vibration modes? Explain the reason based on the idea of the transition dipole moment. Also show the process of reducing the reducible representation comprising  $x, y, z$  displacement of the three atoms to the irreducible representations in  $C_{2v}$  point group.)

4. 単原子分子を例にとり、並進運動の分配関数から出発してエネルギー表式を求め、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 partition function of translational motion converted to the energy representation.)