

化学統計熱力学(II) 試験

(自筆の「まとめ」持ち込み可)

1 N 個の原子からできている1分子の3次元空間内での運動について考える。

1) 次の文章の(a)～(i)に、適当な語句、文字式または数字を入れなさい。

分子の運動の形態は、エネルギーの小さい順に並べると(a)、回転、(b)に分けることができる。(a)の自由度は(c)、回転の自由度は直線分子の場合、(d)、非直線分子の場合、(e)である。 N 個の原子全体の3次元空間での運動の自由度は(f)であるから、(b)の自由度は直線分子の場合(g)、非直線分子の場合(h)となる。従って、 N 分子には(i)個の異なる(b)モードが予想される。

2) 回転の自由度が直線分子と非直線分子で異なるのは何故か説明しなさい。

2 理想気体とみなせる2種の気体a(分子数 N_a)と気体b(分子数 N_b)が体積 V_a 、 V_b の2つの容器に入っている。

1) 2種の気体の温度・圧力は等しい。容器の仕切りを取った場合、混合のエントロピーは

$$\Delta S = -k_B(N_a \log c_a + N_b \log c_b) \quad (1)$$

となることを証明しなさい。

ただし、 $N=N_a+N_b$ 、 $c_a=N_a/N$ 、 $c_b=N_b/N$ である。体積 V 、粒子数 N 、温度 T の気体のHelmholtzの自由エネルギー F は以下のように与えられる。

$$F = -Nk_B T \left\{ \frac{3}{2} \log \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right) + \log \left(\frac{V}{N} \right) + 1 \right\}$$

2) c_a を c と表すことにする。混合のエントロピー ΔS が最大になる c を求めよ。

(ヒント: _____, (1)式の極値問題)

3 解読不可能。