

[物理化学 II] (全2題)

[問題 1]

一次元の拡散過程について次の問に答えよ。

- 問1 拡散現象は、[a]の輸送である[b]現象と同様に、熱力学第二法則に支配されて起こる典型的な不可逆過程である。この文章中の[a]、[b]に当たる専門用語を記せ。
- 問2 拡散現象において、位置座標を x 、時間を t とすれば、単位時間に単位面積を通過する溶質の流れ $J(x,t)$ (これを質量流束と呼ぶ) は濃度 $c(x,t)$ のこう配に比例すると考えられる。これはFickの第一法則と呼ばれる。 $J(x,t)$ を拡散係数 D を使って式で表せ。
- 問3 拡散現象はもう一つの重要な原理である「物質の保存法則」に従い、次の拡散方程式をもたらし。

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2} \quad (1)$$

この偏微分方程式の解として、 c_0 を定数とすれば、粒子を見出す確率密度関数 $p(x,t)$ は次のガウス関数となる。

$$p(x,t) = \frac{c(x,t)}{c_0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \quad (2)$$

この結果を利用して、粒子の平均2乗変位 $\overline{x^2}$ と拡散係数 D の関係は次のアインシュタインの式で与えられることを示せ。

$$D = \frac{\overline{x^2}}{2t} \quad (3)$$

ヒント：積分公式 $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$ を変形して利用すると便利。

- 問4 ある粒子の拡散係数として $D = 1.1 \times 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ が得られた。式(3)を使って、この成分粒子が平均距離2.0 cmを拡散するのに必要な時間(有効数字2桁)を求めよ。

(物理化学II・2枚中の2枚目)

[問題 2]

次の文章を読んで問に答えよ。

互いに相互作用する一個の電子と一個の原子核（プロトン；スピン1/2）が磁場中に置かれている場合を考える。このときのハミルトニアンは

$$H = g_e \mu_e B S_z - g_n \mu_n B I_z + a S_x I_x$$

で与えられるとする。ここで、 g は g -値、 μ はボーア磁子、 B は磁場（ z 軸方向）の強さ、 S は電子スピン演算子、 I は核スピン演算子、 a はカップリング定数である。添え字 e は電子を表し、添え字 n は核を表す。

問 $\alpha_e \alpha_n, \alpha_e \beta_n, \beta_e \alpha_n, \beta_e \beta_n$ （ここで α, β はスピン関数）を基底関数にした H の行列（要素）を求めよ。また、固有関数と固有値を示せ。