

科目名 (Subject)
物質科学 I Materials Science I

問題 1 ※以下は解答の一例である

問 1	$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ において計算すると, $\Delta \left( \frac{1}{r} \right) = 0$
問 2	(i) $\frac{d^2y}{dx^2} + 3\frac{dy}{dx} + 2y = 0$ の一般解は $y = c_1 e^{-x} + c_2 e^{-2x}$ となる。 (ii) 特解は $e^x/6$ となり、求める一般解は $y = c_1 e^{-x} + c_2 e^{-2x} + \frac{1}{6}e^x$ ( $C_1, C_2$ は任意定数) となる。
問 3	$\int_0^a dx \int_0^x xy(x-y) dy = \int_0^a dx \left( \frac{1}{2}x^4 - \frac{1}{3}x^4 \right) = \frac{a^5}{30}$

科目名 (Subject)
物質科学 I Materials Science I

問題 1 ※以下は解答の一例である

問 4	行列 $A$ の固有値は 1 と 2 となり、それに対応する固有ベクトルから、 $P = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ をつくると、 $B = P^{-1}AP = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ と対角化される。
問 5	(i) $A \times B = (10, 3, 11)$ (ii) $(A \cdot B)^2 + (A \times B)^2 = (-8)^2 + 230 = 294$
問 6	(i) $B = (E - A)(E + A)^{-1}$ より、 $B(E + A) = E - A$ 両辺に $E + A$ を加えて整理すると、 $(E + B)(E + A)/2 = E$ となり $E + B$ は正則。 (ii) $B(E + A) = E - A$ より、 $(E + B)A = E - B$ となり、 $A = (E + B)^{-1}(E - B)$ となる。

科目名 (Subject)
物質科学 I Materials Science I

問題 2 ※下記は解答の一例である

問 1	(1)	$[H^+] = [OH^-] + [Cl^-]$		
	(2)	計算 $[H^+] = 0.1 \text{ mol L}^{-1}$ , $\alpha^{H^+} = 0.1 = 10^{-1}$	答 pH 1	
	(3)	計算 $HCl \rightarrow H^+ + Cl^-$ は完全に進むと見なしてよいため, $[Cl^-] = 1 \times 10^{-10} \text{ mol L}^{-1}$ 。 $K_w = [H^+][OH^-]$ を用いて電荷バランスの式から $[OH^-]$ を消去すると $[H^+]^2 + [Cl^-] \times [H^+] - K_w = 0$ となる。 これを解いて $[H^+] = -\{\{[Cl^-] \pm ([Cl^-]^2 + 4K_w)^{1/2}\}/2 = 10^{-7}$ ( $[Cl^-]^2 \ll 4K_w$ , $[Cl^-] \ll 2K_w^{1/2}$ から $[H^+] = (K_w)^{1/2}$ だけが残る)		
		答 pH 7		
	(4)	CO <sub>2</sub> の混入による pH 低下。 pH メータを使うなら、特に液絡からの汚染。 など		

科目名 (Subject)
物質科学 I Materials Science I

問題 2 ※下記は解答の一例である

問 2		
(1)		
(2)	液化	
(3)		<p>説明</p> <p>温度上昇に伴い、 グラフ全体が上に上がり、液化に伴う圧力不变の部分 (<math>P_{BC}</math>) の領域が小さくな って理想気体と同様の曲線になる。</p>

科目名 (Subject)
物質科学 I Materials Science I

問題 2 ※下記は解答の一例である

問 3	(1)	(R)-1-chloro-1-phenylethane			
	(2)	(E)-2-pentene			
	(3)	diethyl ether			
	(4)		(5)		
問 4	(1)				
	(2)	$sp^2$ 混成軌道			
	(3)	計算 $S_N1$ 過程の割合を $x$ , $S_N2$ 過程の割合を $y$ とおくと $x + y = 1$ となる。 化合物の生成比 $B:C=0.5x : 0.5x + y$ より, $x = 0.87$ (87%)		答 87 %	
	(4)	もしも $S_N2$ 反応が主だとしたら、塩素原子(塩化物イオン)の脱離より先に水酸化物イオンが反応点の炭素を攻撃することになるが、フェニル基の様な嵩高い置換基があるため攻撃しづらく、塩化物イオンの脱離が先になるため。			

科目名 (Subject)
物質科学 I Materials Science I

問題 3 ※下記は解答の一例である

問 1	(1)	$m \frac{d^2x(t)}{dt^2} = mg - \kappa \frac{dx(t)}{dt}$
	(2)	$x(t) = C_1 e^{-\frac{\kappa}{m}t}$ ( $C_1$ は定数)
	(3)	$x(t) = \frac{mg}{\kappa} t$ 微分すると, $\frac{dx(t)}{dt} = \frac{mg}{\kappa}$ もう一度微分すると, $\frac{d^2x(t)}{dt^2} = 0$ これらを (1) の運動方程式に代入して, (左辺) = (右辺) = 0 となる。 したがって, 与式は (1) の運動方程式の解である。
	(4)	$\frac{mg}{\kappa} \left( 1 - e^{-\frac{\kappa}{m}t} \right)$
	(5)	$\frac{mg}{\kappa}$

科目名 (Subject)
物質科学 I Materials Science I

問題 3 ※下記は解答の一例である

問 2	
(1)	$\frac{q}{4\pi r^2 \varepsilon_0}$
(2)	$-\frac{1}{4\pi \varepsilon_0} \cdot \frac{q \cdot q'}{r^2}$
(3)	$-\int_{\infty}^R \frac{1}{4\pi \varepsilon_0} \cdot \frac{q \cdot q'}{r^2} dr = \frac{q \cdot q'}{4\pi \varepsilon_0} \int_{\infty}^R \frac{-1}{r^2} dr = \frac{q \cdot q'}{4\pi \varepsilon_0} \left[ \frac{1}{r} \right]_{\infty}^R = \frac{q \cdot q'}{4\pi \varepsilon_0} \cdot \frac{1}{R}$
(4)	<p>0 &lt; r &lt; R の場合</p> $\frac{q}{4\pi r^2 \varepsilon_0}$ <p>r &gt; R の場合</p> $\frac{q - q'}{4\pi r^2 \varepsilon_0}$
(5)	<p>r &gt; R の場合</p> $\phi(r) = \frac{q - q'}{4\pi \varepsilon_0} \cdot \frac{1}{r}$ <p>0 &lt; r &lt; R の場合</p> $\phi(r) = \frac{1}{4\pi \varepsilon_0} \cdot \left( \frac{q}{r} - \frac{q'}{R} \right)$

科目名 (Subject)
物質科学II Materials Science II

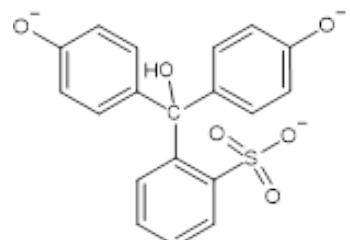
問題 1 ※下記は解答の一例である

問 1	(1)	① 線形結合 ③ 反結合性	② 結合性 ④ フントの規則
	(2)	0	
	(3)	仮想的な $\text{He}_2$ 分子を考えた時、結合性、反結合性軌道の両方とも電子で満たされることになり、分子になることのエネルギー的な利得がない。	
	(4)	<p>The diagram illustrates the formation of molecular orbitals (MOs) from two oxygen atoms (<math>\text{O}_2</math>). It shows the atomic orbitals (AOs) of each oxygen atom, which consist of two 1s, two 2s, and three 2p subshells. The 1s, 2s, and the three 2p subshells (2p<sub>x</sub>, 2p<sub>y</sub>, 2p<sub>z</sub>) are shown with arrows indicating electron spin. Dotted lines represent the overlap of AOs between the two atoms. The resulting MOs are formed by the combination of these overlaps. There are bonding MOs (filled with arrows) and antibonding MOs (empty or partially filled with dashed arrows). The bonding MOs are lower in energy than the original AOs, while the antibonding MOs are higher.</p>	
	(5)	酸素分子は $\pi^*$ 軌道に存在する不対電子の有する平行スピンにより常磁性を示し、強力な磁場の中では磁化され磁石に引き寄せられる。一方、窒素分子では全ての電子が対をなすため磁性を持たない。	

科目名 (Subject)
物質科学Ⅱ Materials Science II

## 問題 1 ※下記は解答の一例である

問 2	(1) [A] を任意の時間での A の濃度, 時間を $t$ , 速度定数 $k$ , $t=0$ における $[A]$ を $[A]_0$ として, $\ln[A] = \ln[A]_0 - kt$ あるいは $d[A]/dt = -k [A]$
	(2) 実験方法 色素の退色反応中, 一定時間ごとに反応溶液を一部取り出し光学測定用セルに入れ, 一定温度を保って分光光度計を用いて吸収スペクトルを測定する。測定色素の光吸収帯の吸光度からそれぞれの時間での色素濃度を求め, 色素濃度の時間変化を追跡する。  解析方法 濃度または吸光度の自然対数を時間に対してプロットすると直線に乗る。この直線の傾きから速度定数を求める。
	(3) 速度論: NaOH が薄い場合, 反応が遅いことから, 本来は $[\text{OH}^-]$ にも依存する 2 次以上の反応次数を持つと考えられるが, 色素濃度に比べて $[\text{OH}^-]$ が圧倒的に高いため, 擬一次となった。 分子構造: 電子吸引基 (酸素, スルホ基, ハロゲン) がベンゼン環に付いているため中心の C 原子の電子密度が低く, そこに $\text{OH}^-$ イオンが求核的に付加反応を起こすことが考えられる。これは, 電子吸引基の数が多い B の方が速度定数が大きいことからも支持される。
	(4) 序列 A < C < D < B  理由 電気陰性度が高い置換基 → 中心 C 原子の電子密度がより下がる → 反応速度が上がる。
	(5) 図は色素 A の反応生成物の予想構造である。 中心 C 原子には OH 基が付加し, $\sigma$ 結合だけの状態になる。これにより, この C 原子の $\pi$ 共役系が切断されて短くなり, 吸収波長は短波長側にシフトし, おそらくは紫外領域まで吸収波長が短波長化したために可視域での色を失ったものと考えられる。



科目名 (Subject)
物質科学Ⅱ Materials Science II

問題 1 ※下記は解答の一例である

問 3	(1) $K_a = [H^+][E^-]/[E-H]$
	<p>波長 <math>\lambda</math> における <math>E-H</math> と <math>E^-</math> の吸光係数をそれぞれ <math>\varepsilon_{EH}(\lambda)</math> と <math>\varepsilon_E(\lambda)</math> とすると、この波長での吸光度 <math>A(\lambda)</math> は <math>A(\lambda) = l \times \{\varepsilon_{EH}(\lambda)[E-H] + \varepsilon_E(\lambda)[E^-]\}</math> と書ける。</p> <p>このとき <math>\varepsilon_{EH}(\lambda) = \varepsilon_E(\lambda)</math> となる波長が存在すれば、そのときの吸光係数を <math>\varepsilon_i</math> として、<math>A = l\varepsilon_i([E-H] + [E^-])</math> となる。</p> <p><math>[E-H] + [E^-]</math> は色素の全濃度を意味し、これが一定であれば <math>E-H</math> と <math>E^-</math> の存在割合に関わらず <math>A</math> は一定になる。これが等吸収点の生ずる理由である。</p>
	<p><math>\lambda = 600 \text{ nm}</math> 付近では酸性下では吸収がないため、この波長での吸光度は <math>l \times \varepsilon_E(600 \text{ nm})[E^-]</math> とみなせる。</p> <p>十分に pH が高いとき、<math>E-H</math> は完全解離して全て <math>E^-</math> になっているとみなせる。</p> <p>従って、<math>pH = pK_a</math> のとき、波長 <math>600 \text{ nm}</math> での吸光度は pH 9.4 の場合の <math>1/2</math> になるはずであり、図から 0.65 程度と予測される。これはグラフ上 pH 6.0 と pH 6.6 の間 (6.6 に近い方) に位置することから、半整数では 6.5 と予想できる。</p>

科目名 (Subject)
物質科学Ⅱ Materials Science II

問題 1 ※下記は解答の一例である

問 4	<p>(1) 液体と気体のエントロピー差は、乱雑さの違いを反映している。気体状態でのエントロピーは、同圧(同じ分子数密度)では並進自由度が支配的であり、分子種による大きな差はほぼない。一方、液体状態では弱い分子間力で集まっており、分子の乱雑さも分子種によらず同程度と考えられる。これらのような場合には<math>\Delta_vS</math> が同程度になると考えられる。</p>
	<p>(2) 水やメタノールの<math>\Delta_vS</math> が大きいのは、液体状態のエントロピーが低いためと考えられる。これらの分子では、液体状態では分子間に働く強い水素結合によって運動自由度が制約を受けることになり、その分エントロピーが低下すると考えられる。一方、酢酸のように<math>\Delta_vS</math> が小さい場合は、気体状態でも分子が多量体を形成し、気体状態でのエントロピーが低下しているためと考えられる。</p>

科目名 (Subject)
物質科学 II Materials Science II

問題2 ※下記は解答の一例である

問 1	(1)	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) = E\varphi(x)$
		$C_1 = 0$
	(2)	$C_2 = \sqrt{2/L}$ $a = n\pi/L$ $\varphi(x) = \sqrt{2/L} \sin \frac{n\pi}{L} x$
	(3)	$\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{L} \right)^2$
	(4)	<p>縦軸:エネルギー</p> <p>縦軸:波動関数の振幅</p>
	(5)	ポテンシャルが∞の場合はポテンシャル中の振幅はゼロであるが、有限の場合は波動関数が境界を超えて染み出す（トンネル効果）。

科目名 (Subject)
物質科学 II Materials Science II

問題2 ※下記は解答の一例である

問 2	(1)	
	(2)	
	(3)	$d = 0.21 \text{ nm}$
	(4)	(111)面上のベクトル $\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$ および $\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3$ と、 $\mathbf{G}_{111} = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3$ との内積を考える。 $(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{G}_{111} = \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{b}_1 - \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{b}_2 = 2\pi - 2\pi = 0$ , 同様に、 $(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3) \cdot \mathbf{G}_{111} = 0$ 。以上より、(111)面と $\mathbf{G}_{111}$ は直交していると言うことが出来る。
	(5)	$(0, 0, 0) \quad (a, 0, 0) \quad (0, a, 0) \quad (0, 0, a)$ $(a, a, 0) \quad (a, 0, a) \quad (0, a, a) \quad (a, a, a)$ $(0, a/2, a/2) \quad (a/2, 0, a/2) \quad (a/2, a/2, 0) \quad (a, a/2, a/2)$ $(a/2, a, a/2) \quad (a/2, a/2, a)$

科目名 (Subject)
物質科学 II Materials Science II

問題2 ※下記は解答の一例である

問 2	$S_G = f[ 1 + \exp(-i\pi(h+k)) + \exp(-i\pi(k+l)) + \exp(-i\pi(l+h)) ]$
(6)	$S_G = f \left\{ 1 + \frac{1}{2} e^{-i\frac{2\pi}{a}(0 \cdot h + \frac{a}{2} \cdot k + \frac{a}{2} \cdot l)} + \frac{1}{2} e^{-i\frac{2\pi}{a}(\frac{a}{2} \cdot h + 0 \cdot k + \frac{a}{2} \cdot l)} + \frac{1}{2} e^{-i\frac{2\pi}{a}(\frac{a}{2} \cdot h + \frac{a}{2} \cdot k + 0 \cdot l)} \right. \\ \left. + \frac{1}{2} e^{-i\frac{2\pi}{a}(a \cdot h + \frac{a}{2} \cdot k + \frac{a}{2} \cdot l)} + \frac{1}{2} e^{-i\frac{2\pi}{a}(\frac{a}{2} \cdot h + a \cdot k + \frac{a}{2} \cdot l)} + \frac{1}{2} e^{-i\frac{2\pi}{a}(\frac{a}{2} \cdot h + \frac{a}{2} \cdot k + a \cdot l)} \right\}$
(7)	$S_G = 0$ , ミラー指数: $h, k, l$ に偶数と奇数が混在している時。
(8)	$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} = \frac{2\pi}{a} (-\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}})$ $\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} = \frac{2\pi}{a} (\hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}})$ $\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} = \frac{2\pi}{a} (\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{z}})$
(9)	fcc 格子の逆格子は bcc 格子の配置となる。