

2023年10月, 2024年4月入学 (October 2023 and April 2024 Admissions)
広島大学大学院先進理工系科学研究科博士課程前期 (一般選抜) 専門科目入学試験問題
Graduate School of Advanced Science and Engineering (Master's Course), Hiroshima University
Entrance Examination Booklet (General Selection)

(2023年8月24日実施 / August 24, 2023)

試験科目 Subject	応用化学 (専門科目I) Applied Chemistry I	プログラム Program	応用化学 (Applied Chemistry) スマートイノベーション (Smart Innovation)	受験番号 Examinee's Number	M
-----------------	-------------------------------------	------------------	--	---------------------------	---

試験時間 : 9時00分~12時00分 (Examination Time : From 9:00 to 12:00)

受験上の注意事項

- (1) 問題用紙兼解答用紙が表紙を含み8枚あります。
- (2) この表紙を含むすべての問題用紙兼解答用紙に、受験番号を記入してください。
- (3) これは問題用紙と解答用紙が合冊されたものです。解答は指定された箇所に記入してください。
- (4) 解答が書ききれないときは、同じ用紙の裏面を利用しても構いません。ただし、その場合は「裏に続く」などと裏面に記載したことが分かるようにしておくこと。
- (5) 全問に解答しなさい。
- (6) 貸与された計算機 (電卓) を使用しても差し支えない。
- (7) 質問あるいは不明な点がある場合は手を挙げてください。

Notices

- (1) There are 8 question and answer sheets including a front sheet.
- (2) Fill in your examinee's number in the specified positions in this cover and each question and answer sheet.
- (3) This examination booklet consists of question sheets and answer sheets. Answer the questions in the specified position.
- (4) If the space is exhausted, use the reverse side of the sheet and write down "to be continued" on the last line of the sheet.
- (5) Answer all the questions.
- (6) You may use the provided calculator if you need.
- (7) Raise your hand if you have any questions.

2023 年 10 月, 2024 年 4 月入学 (October 2023 and April 2024 Admissions)
 広島大学大学院先進理工系科学研究科博士課程前期 (一般選抜) 専門科目入学試験問題
 Graduate School of Advanced Science and Engineering (Master's Course), Hiroshima University
 Entrance Examination Booklet (General Selection)

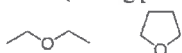
(2023 年 8 月 24 日実施 / August 24, 2023)

試験科目 Subject	応用化学 (専門科目 I) Applied Chemistry I	プログラム Program	応用化学 (Applied Chemistry) スマートイノベーション (Smart Innovation)	受験番号 Examinee's Number	M
-----------------	--------------------------------------	------------------	--	---------------------------	---

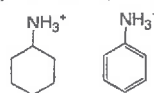
問題 1 (Problem 1) 問題用紙は 3 枚あります (three sheets for Problem 1)

1. 次の化合物または化学種の組み合わせで, 以下の性質に対しどのような違いがあるかを説明せよ。必要に応じて, 図を用いてもよい。(Explain how the compounds or chemical species in each pair are different with respect to the following properties. Figures may be added, if necessary.)

1) 沸点 (boiling point)



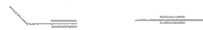
2) 酸性度 (acidity)



5) ラジカル安定性 (radical stability)



6) 安定性 (stability)



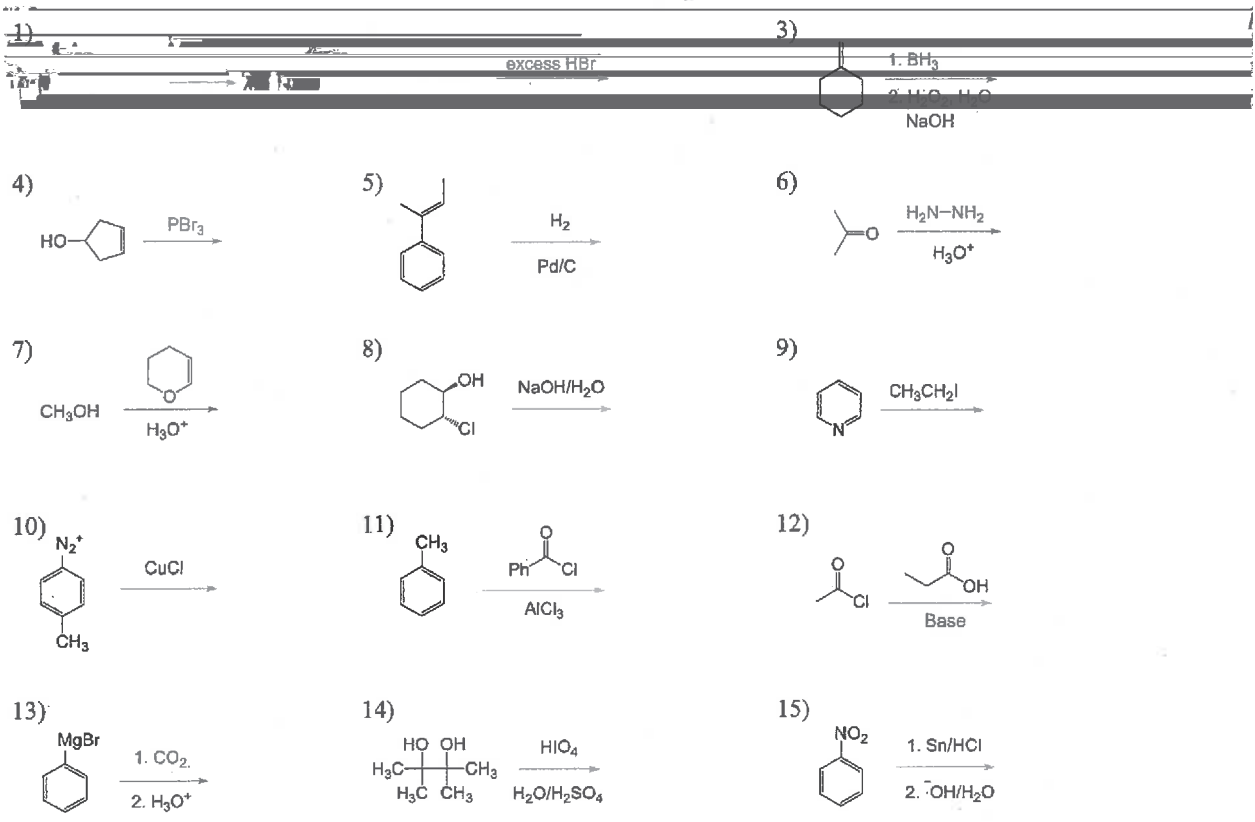
2. 1,3-ジクロロシクロヘキサンに関する以下の問いに答えよ。(Answer the following questions concerning 1,3-dichlorocyclohexane.)

1) キラルな異性体のエナンチオマーのうち, 一つの構造を描き, 不斉炭素の絶対配置を *R* または *S* で示せ。(Draw the structural formula of an enantiomer of the chiral isomers and assign the absolute configuration of asymmetric carbons as *R* or *S*.)

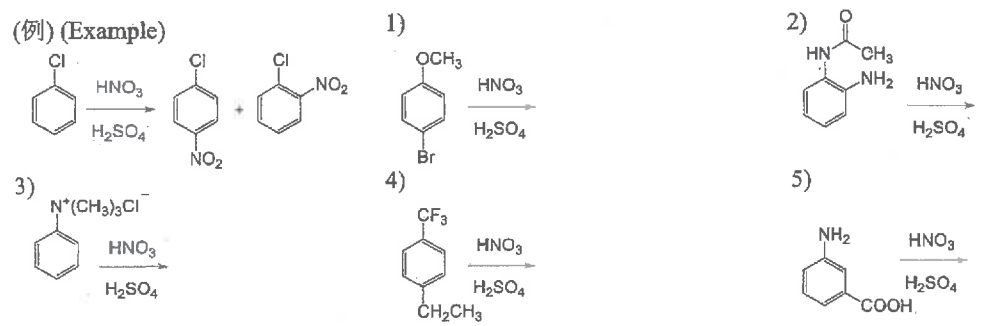
2) アキラルな異性体の最も安定な椅子型構造を描け。(Draw the most stable chair-conformation of the achiral isomer.)

3. 立体保持で進行し環状化合物を生成するアルケンの付加反応の例を一つ挙げ, 反応機構を描き, 反応が保持で進行する理由を説明せよ。(Give an example of addition reactions of alkenes that proceed with retention of configuration leading to cyclic products. Draw the reaction mechanism and explain the reason for that the reaction proceeds with retention of configuration.)

4. 次のそれぞれの反応における有機の主生成物を構造式で描け。必要に応じて、立体化学が分かるようにすること。エナンチオマーが生成する場合は一方のみを描くこと。(Draw the structural formula of the major organic product in each



5. 次のそれぞれの化合物から得られる、主たるモノニトロ化生成物を構造式で描け。(Draw the structural formula of the major mono-nitration product(s) from each compound.)



2023 年 10 月, 2024 年 4 月入学 (October 2023 and April 2024 Admissions)
 広島大学大学院先進理工系科学研究科博士課程前期 (一般選抜) 専門科目入学試験問題
 Graduate School of Advanced Science and Engineering (Master's Course), Hiroshima University
 Entrance Examination Booklet (General Selection)

(2023 年 8 月 24 日実施 / August 24, 2023)

試験科目 Subject	応用化学 (専門科目I) Applied Chemistry I	プログラム Program	応用化学 (Applied Chemistry) スマートイノベーション (Smart Innovation)	受験番号 Examinee's Number	M
-----------------	-------------------------------------	------------------	--	---------------------------	---

問題 1 (Problem 1) 続き (Continued)

6. 縮合重合に関する以下の問いに答えよ。(Answer the following questions on condensation polymerization.)

1) テレフタル酸と組み合わせて直鎖状高分子が得られる化合物は、エチレングリコール、エチレングリコールモノメチルエーテル、グリセリンのいずれであるか答えよ。また、高分子合成の化学反応式を描け。(Among ethylene glycol, ethylene glycol monomethyl ether and glycerin, which compound gives a linear polymer combined with terephthalic acid? Also, draw the chemical reaction formula of the polymer synthesis.)

化合物 (compound)	化学反応式 (chemical reaction formula)
-------------------	--------------------------------------

2) 1) において高分子量体を得るために留意すべき点を二つ、箇条書きで記せ。(Itemize two important points to obtain a high molecular-weight polymer in 1).)

1. _____ 2. _____

3) 1) において数平均分子量 (M_n) 2.00×10^4 の高分子が得られた。この高分子の数平均重合度 (x_n) と重量平均分子量 (M_w) を有効数字二桁で求めよ。(A polymer with a number average molecular weight of 2.00×10^4 was obtained in 1). Obtain the

モノマー

2023年10月, 2024年4月入学 (October 2023 and April 2024 Admissions)
 広島大学大学院先進理工系科学研究科博士課程前期 (一般選抜) 専門科目入学試験問題
 Graduate School of Advanced Science and Engineering (Master's Course), Hiroshima University
 Entrance Examination Booklet (General Selection)

(2023年8月24日実施 / August 24, 2023)

試験科目 Subject	応用化学 (専門科目 I) Applied Chemistry I	プログラム Program	応用化学 (Applied Chemistry) スマートイノベーション (Smart Innovation)	受験番号 Examinee's Number	M
-----------------	--------------------------------------	------------------	--	---------------------------	---

問題 2 (Problem 2) 問題用紙は 2 枚あります (two sheets for Problem 2)

1. 次の熱力学に関する語句を簡潔に説明せよ。(Explain briefly the following terms related to thermodynamics.)
 1) ファンデルワールス方程式 (van der Waals equation) 2) 熱力学第三法則 (third law of thermodynamics)

- 3) クラペイロンの式 (Clapeyron equation) 4) 共沸混合物 (azeotrope)

2. 気体の運動論にもとづき, 300 K におけるメタン分子の根平均二乗速さを有効数字 3 桁で求めよ。ただし, メタンの分子量を 16.0 g mol^{-1} , 気体定数 $R=8.31 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ とする。(According to the kinetic theory of gases, calculate the root-mean-square speed of methane molecules in gas phase at 300 K to three significant figures. Use the molecular weight of methane 16.0 g mol^{-1} and the gas constant $R=8.31 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$, if needed.)

3. モル定圧熱容量 $C_{p,m}=7R/2$ の二原子分子の完全気体を 3.00 mol とし, 298 K , $2.00 \times 10^2 \text{ kPa}$ から 420 K , $8.00 \times 10^2 \text{ kPa}$ へと状態変化させたときの (系の) エントロピー変化 ΔS を求めよ。ただし, 気体定数 $R=8.31 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ とする。(Calculate the change in entropy ΔS (for the system) when the state of 3.00 mol diatomic perfect gas molecules, for which a constant-pressure molar heat capacity $C_{p,m}=7R/2$, is changed from 298 K and $2.00 \times 10^2 \text{ kPa}$ to 420 K and $8.00 \times 10^2 \text{ kPa}$. Use the gas constant $R=8.31 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$, if needed.)

解答欄 (Answers)

①

②

③

素

答 (Answer) 理由 (Reason)

Graduate School of Advanced Science and Engineering (Master's Course), Hiroshima University
Entrance Examination Booklet (General Selection)

(2023年8月24日実施 / August 24, 2023)

試験科目 Subject	応用化学 (専門科目 I) Applied Chemistry I	プログラム Program	応用化学 (Applied Chemistry) スタートバージョン	受験番号 Examinee's Number	M12	13
-----------------	--------------------------------------	------------------	--	---------------------------	-----	----

問題 3 (Problem 3) 問題用紙は 2 枚あります (two sheets for Problem 2)

1. 次の括弧内の化学種の組み合わせのなかから, 問いで求めるものを選び解答欄に記せ。また, ①, ②, ③については理由を述べよ。(Answer the questions by selecting the correct chemical species from the combinations given in parentheses. The correct chemical species should be given in the answer column. Answer the reasons for ①, ②, and ③.)

- ① (Si, TiO₂, TiN) 粉末が白色である物質 (Which is white in powder form?)
- ② (MgF₂, MgBr₂) 融点の低い物質 (Which has lower melting point?)
- ③ (H₂S, CO₂) 結合角の小さい化学種 (Which has smaller bond angle?)
- ④ (He, Ne, Ar) 第一イオン化エネルギーの最も大きい元 (Which has the largest first ionization energy?)
- ⑤ (Li, Na, K) 電子親和力の最も小さい元素 (Which has the lowest electron affinity?)
- ⑥ (Na⁺, Mo²⁺, Al³⁺) 八面体配位において最もイオン半

3)

(Reason)

2023 年 10 月, 2024 年 4 月入学 (October 2023 and April 2024 Admissions)
 広島大学大学院先進理工系科学研究科博士課程前期 (一般選抜) 専門科目入学試験問題
 Graduate School of Advanced Science and Engineering (Master's Course), Hiroshima University
 Entrance Examination Booklet (General Selection)

(2023 年 8 月 24 日実施 / August 24, 2023)

試験科目 Subject	応用化学 (専門科目 I) Applied Chemistry I	プログラム Program	応用化学 (Applied Chemistry) スマートイノベーション (Smart Innovation)	受験番号 Examinee's Number	M
-----------------	--------------------------------------	------------------	--	---------------------------	---

問題 3 (Problem 3) 続き (Continued)

3. ジルコニア (ZrO_2) に関して, 以下の問いに答えよ。
 (Answer the following questions related to zirconia (ZrO_2)).

1) ジルコニアの格子定数はイットリアを固溶させると下表に示すように変化した。固溶前後の結晶系の名前をそれぞれ答えよ。(The lattice constant of zirconia was changed as

shown in the table below when yttrium was doped in zirconia. Answer the name of each crystal system before and after doping.)

	a / nm	b / nm	c / nm	$\alpha / ^\circ$	$\beta / ^\circ$	$\gamma / ^\circ$
Pristine ZrO_2	0.514	0.521	0.531	90.0	99.2	90.0
Y-doped ZrO_2	0.515	0.515	0.515	90.0	90.0	90.0

2) Zr の 20 mol% を Y で置換したジルコニア-イットリア固溶体の組成式 $Zr_xY_zO_2$ にあてはまる x, y, z をそれぞれ答えよ。(Answer x, y, and z that apply to the compositional formula $Zr_xY_zO_2$ of zirconia-yttria solid-solution with 20 mol% Zr substituted by Y.)

3) ジルコニア-イットリア固溶体は電気伝導性を示す。こ

5. NH_4OH と NH_4Cl をともに 100 mmol dm^{-3} の濃度で含む水溶液が 100 mL ある。以下の問いに答えよ。ただし, 溶液はすべて標準状態 (25°C , 1 気圧) にあるとし, NH_4OH の塩基解離定数 pK_b は 4.74 とする。(Answer the following questions for 100 mL of an aqueous solution containing NH_4OH

and NH_4Cl both at a concentration of 100 mmol dm^{-3} . Assume that all solutions are under standard conditions (25°C , 1 atm). The base dissociation constant, pK_b , for NH_4OH is 4.74.)

1) この水溶液の pH を求めよ。(Answer pH of this aqueous solution.)

2) この水溶液に 1.00 mol dm^{-3} HCl 水溶液を 1.00 mL 添加した後の pH を求めよ。(Answer pH after addition of 1.00 mL of 1.00 mol dm^{-3} HCl solution to this aqueous solution.)

3) この水溶液に 1.00 mol dm^{-3} NaOH 水溶液を 2.00 mL 添加した後の pH を求めよ。(Answer pH after addition of 2.00 mL of 1.00 mol dm^{-3} NaOH solution to this aqueous solution.)

solution is an electrical conductor. Answer the charge carrier in this material.)

6. 2価の金属イオン M^{2+} が満杯の格子と 1:1 の結晶 MO の

2023年10月, 2024年4月入学 (October 2023 and April 2024 Admissions)
 広島大学大学院先進理工系科学研究科博士課程前期 (一般選抜) 専門科目入学試験問題
 Graduate School of Advanced Science and Engineering (Master's Course), Hiroshima University
 Entrance Examination Booklet (General Selection)

(2023年8月24日実施 / August 24, 2023)

試験科目 Subject	応用化学 (専門科目II) Applied Chemistry II	プログラム Program	応用化学 (Applied Chemistry) スマートイノベーション (Smart Innovation)	受験番号 Examinee's Number	M
-----------------	---------------------------------------	------------------	--	---------------------------	---

試験時間 : 13時30分~15時00分 (Examination Time : From 13:30 to 15:00)

受験上の注意事項

- (1) 問題用紙兼解答用紙が表紙を含み10枚あります。
- (2) この表紙を含むすべての問題用紙兼解答用紙に, 受験番号を記入してください。
- (3) これは問題用紙と解答用紙が合冊されたものです。解答は指定された箇所に記入してください。
- (4) 解答が書ききれないときは, 同じ用紙の裏面を利用しても構いません。ただし, その場合は「裏に続く」などと裏面に記載したことが分かるようにしておくこと。
- (5) 3問中から1問選択し解答しなさい。なお, 選択した問題は, 下欄の表に○印を付して表示すること。
- (6) 貸与された計算機 (電卓) を使用しても差し支えない。
- (7) 質問あるいは不明な点がある場合は手を挙げてください。

Notices

- (1) There are 10 question and answer sheets including a front sheet.
- (2) Fill in your examinee's number in the specified positions in this cover and each question and answer sheet.
- (3) This examination booklet consists of question sheets and answer sheets. Answer the questions in the specified position.
- (4) If you cannot write the answer on the front side of the sheet, you may write it on the back side of the sheet.

(5)	
(6)	
(7)	

問題番号 Problem Number	問題1 Problem 1	問題2 Problem 2	問題3 Problem 3
選択 Selection			

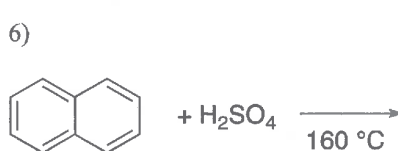
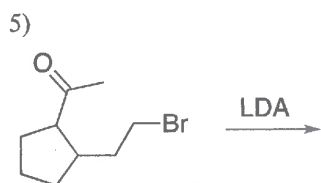
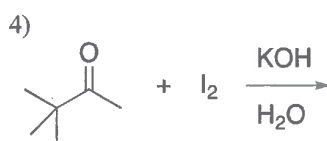
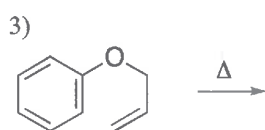
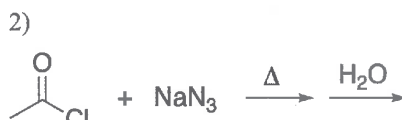
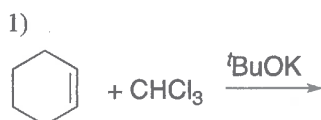
2023 年 10 月, 2024 年 4 月入学 (October 2023 and April 2024 Admissions)
 広島大学大学院先進理工系科学研究科博士課程前期 (一般選抜) 専門科目入学試験問題
 Graduate School of Advanced Science and Engineering (Master's Course), Hiroshima University
 Entrance Examination Booklet (General Selection)

(2023 年 8 月 24 日実施 / August 24, 2023)

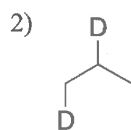
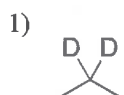
試験科目 Subject	応用化学 (専門科目 II) Applied Chemistry II	プログラム Program	応用化学 (Applied Chemistry) スマートイノベーション (Smart Innovation)	受験番号 Examinee's Number	M
-----------------	--	------------------	--	---------------------------	---

問題 1 (Problem 1) 問題用紙は 3 枚あります (three sheets for Problem 1)

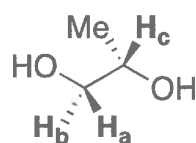
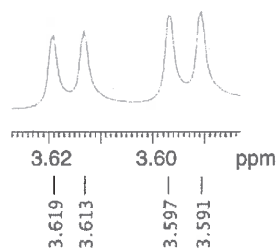
1. 次のそれぞれの反応における有機の主生成物を構造式で描け。(Draw the structural formula of the major organic product in each reaction.)



2. イソプロピルアルコールを出発物質とし, 無機の試薬のみを用いて, 以下の化合物をそれぞれ合成する方法を反応式で描け。(Draw a synthetic scheme for each of the following compounds, using isopropyl alcohol as a starting material and inorganic compounds.)



3. 以下の図に示した $^1\text{H NMR}$ スペクトル(500 MHz)のシグナルは, プロピレングリコールの H_a のプロトンに帰属される。 H_a と H_b ($J_{\text{H}_a\text{H}_b}$) および H_a と H_c ($J_{\text{H}_a\text{H}_c}$) とのカップリング定数をそれぞれ求めよ。計算過程も記せ。(The signal in the following $^1\text{H NMR}$ spectrum (500 MHz) can be assigned to H_a in propylene glycol. Provide coupling constants of H_a with H_b ($J_{\text{H}_a\text{H}_b}$) and H_a with H_c ($J_{\text{H}_a\text{H}_c}$), respectively, with the calculation process.)



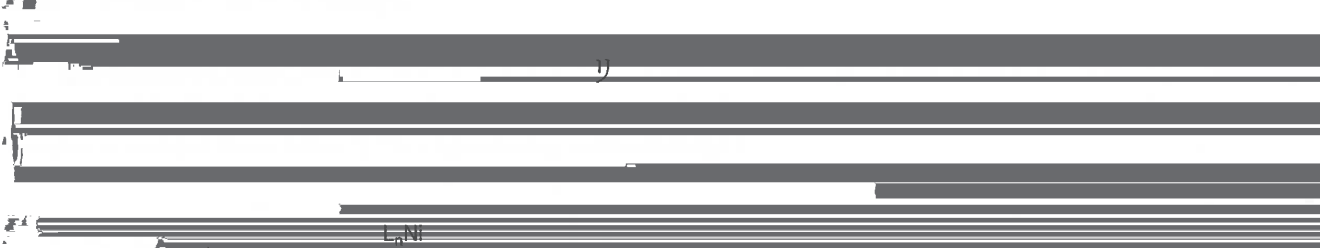
$J_{\text{H}_a\text{H}_b}$	
$J_{\text{H}_a\text{H}_c}$	

2023年10月、2024年4月入学 (October 2023 and April 2024 Admissions)
 広島大学大学院先進理工系科学研究科博士課程前期 (一般選抜) 専門科目入学試験問題
 Graduate School of Advanced Science and Engineering (Master's Course), Hiroshima University
 Entrance Examination Booklet (General Selection)

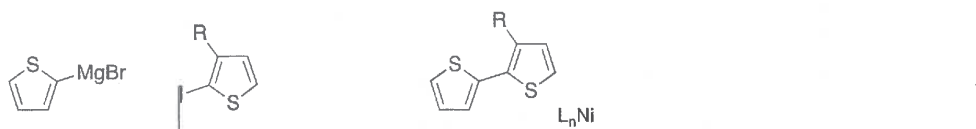
(2023年8月24日実施 / August 24, 2023)

試験科目 Subject	応用化学 (専門科目Ⅱ) Applied Chemistry II	プログラム Program	応用化学 (Applied Chemistry) スマートイノベーション (Smart Innovation)	受験番号 Examinee's Number	M
-----------------	--------------------------------------	------------------	--	---------------------------	---

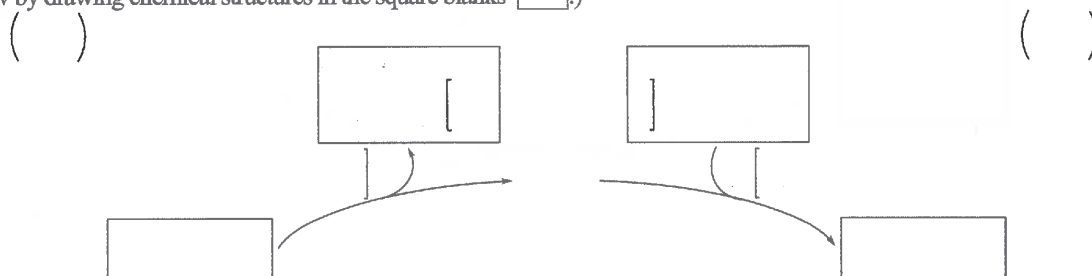
問題1 (Problem 1) 続き (Continued)



4. 遷移金属錯体を触媒に用いた下記のクロスカップリング反応について、以下の問いに答えよ。なお、「L」は形式電荷をもたない配位子とする。(Answer the following questions regarding the cross-coupling reaction in the presence of a transition metal complex as a catalyst shown below. "L" is a ligand having no formal charge.)



1) □内に最も適切な構造式を記入し、以下の触媒サイクルを完成させよ。(Complete the catalytic cycle of the reaction shown below by drawing chemical structures in the square blanks □.)



2) 上記触媒サイクル中、()内にニッケルの形式酸化数を書け。(Give the formal oxidation states of Ni in the parentheses ().)

3) 上記触媒サイクル中、[]内に各素反応の名称を書け。(Give the name of elementary reaction in the square brackets [].)

4) 置換基 R がアシル基であった場合、R がアルキル基の場合に比べて、生成物の収率は向上するか低下するか、理由とともに答えよ。(Answer if the yield of the product would increase or decrease when R is an acyl group compared to when R is an alkyl group. Also, explain the reason.)

5) R がアシル基の生成物が収率良く得られる反応式を描け。(Draw a new chemical reaction formula that can increase the yield of this product with an acyl group as R.)

2023年10月, 2024年4月入学 (October 2023 and April 2024 Admissions)
 広島大学大学院先進理工系科学研究科博士課程前期 (一般選抜) 専門科目入学試験問題
 Graduate School of Advanced Science and Engineering (Master's Course), Hiroshima University
 Entrance Examination Booklet (General Selection)

(2023年8月24日実施 / August 24, 2023)

試験科目 Subject	応用化学 (専門科目II) Applied Chemistry II	プログラム Program	応用化学 (Applied Chemistry) スマートイノベーション (Smart Innovation)	受験番号 Examinee's Number	M
-----------------	---------------------------------------	------------------	--	---------------------------	---

問題1 (Problem 1) 続き (Continued)

5 酢酸ビニルのラジカル重合について以下の問いに答えよ (Answer the following questions on the radical polymerization of

vinyl acetate.)

1) ラジカル開始剤を一つ挙げ, 開始反応と成長反応を化学反応式で示せ。 (Give one initiator for radical polymerization and draw the initiation and propagation reactions by chemical reaction formula.)

開始反応 (initiation reaction)

成長反応 (propagation reaction)

4) アクリル酸メチルのラジカル重合によって得られるポリアクリル酸メチルにも頭-頭結合が含まれるが, その頭-頭結合の含有率はポリ酢酸ビニルの場合よりも多いか, 少ないか。理由とともに答えよ。 (Poly(methyl acrylate) obtained by radical

2023年10月, 2024年4月入学 (October 2023 and April 2024 Admissions)
広島大学大学院先進理工系科学研究科博士課程前期 (一般選抜) 専門科目入学試験問題
Graduate School of Advanced Science and Engineering (Master's Course), Hiroshima University
Entrance Examination Problem (General Selection)

2. ある物質の分解反応が下表の速度定数 k を各温度 (T) でもつことが観測された。この分解反応の活性化エネルギーと頻度因子を求めよ。ただし、気体定数 $R = 8.31 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ とする。(A decomposition reaction was observed to have the following rate constants at the indicated temperatures. Estimate the activation energy and the frequency factor of the decomposition reaction. Use the gas constant $R = 8.31 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$, if needed.)

T/K	300	400	500
$k/\text{dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$	2.07×10^{-3}	4.46×10^{-2}	2.83×10^{-1}

2023年10月, 2024年4月入学 (October 2023 and April 2024 Admissions)
 広島大学大学院先進理工系科学研究科博士課程前期 (一般選抜) 専門科目入学試験問題
 Graduate School of Advanced Science and Engineering (Master's Course), Hiroshima University
 Entrance Examination Booklet (General Selection)

(2023年8月24日実施 / August 24, 2023)

試験科目 Subject	応用化学 (専門科目Ⅱ) Applied Chemistry II	プログラム Program	応用化学 (Applied Chemistry) スマートイノベーション (Smart Innovation)	受験番号 Examinee's Number	M
-----------------	--------------------------------------	------------------	--	---------------------------	---

問題2 (Problem 2) 続き (Continued)

3. 以下の式 (Z : 原子番号, a_0 : ボーア半径 ($5.292 \times 10^{-11} \text{ m}$); r : 原子核から電子までの距離) で表される水素類似原子 (水素原子) の n 軌道の波動関数 (ψ_{nlm}) に関する以下の問題に有効数字 3 桁で答えよ。 (The wave function (ψ_{nlm}) of the n orbital of a hydrogen-like atom (hydrogen atom) is given by the following equation (Z : atomic number, a_0 : Bohr radius ($5.292 \times 10^{-11} \text{ m}$); r : distance from the nucleus to the electron). Answer the following questions with 3 significant figures.)

$$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-Zr/2a_0}$$

2) N^{6+} の $2s$ 軌道の動径節の位置 (原子核からの距離) を計算せよ。 (Calculate the position (distance from the nucleus) of the radial node in the $2s$ orbital of N^{6+} .)

3) O^{7+} の $2s$ 軌道の動径分布関数が最大値をもつ半径を計算せよ。 (Calculate the radius at which the radial distribution function of a $2s$ orbital of O^{7+} has a maximum value.)

2023年10月, 2024年4月入学 (October 2023 and April 2024 Admissions)
 広島大学大学院先進理工系科学研究科博士課程前期 (一般選抜) 専門科目入学試験問題
 Graduate School of Advanced Science and Engineering (Master's Course), Hiroshima University
 Entrance Examination Booklet (General Selection)

(2023年8月24日実施 / August 24, 2023)

試験科目 Subject	応用化学 (専門科目Ⅱ) Applied Chemistry II	プログラム Program	応用化学 (Applied Chemistry) スマートイノベーション (Smart Innovation)	受験番号 Examinee's Number	M
-----------------	--------------------------------------	------------------	--	---------------------------	---

問題2 (Problem 2) 続き, (Continued)

4. ヒュッケル法を用いるとエチレンの永年方程式は次式で表される。ここで ε は軌道エネルギーである。以下の問いに簡潔に答えよ。(The secular determinant of ethylene is written as follows using Hückel method. The ε is the orbital energy. Answer the following questions briefly.)

$$\begin{vmatrix} \alpha - \varepsilon & \beta \\ \beta & \alpha - \varepsilon \end{vmatrix} = 0$$

1) 永年方程式に含まれる α と β がそれぞれ何積分か答えよ。(Answer the names of α and β terms in the secular determinant.)

2) 永年方程式を解き, エチレンの軌道エネルギーおよび全 π 電子結合エネルギーを求めよ。(Calculate the orbital energies (ε) and total π -electron binding energy of ethylene by solving the secular determinant.)

3) エチレンの分子軌道 (φ_1, φ_2) は炭素原子の $2p_z$ 軌道 (χ_1, χ_2) の線形結合として以下で表される。(The molecular orbitals (φ_1 and φ_2) of ethylene are written as follows using the linear combination of $2p_z$ orbital of carbon atoms (χ_1 and χ_2)).

$$\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_2, \quad \varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_2$$

φ_1 と φ_2 が直交していることを示せ。ただし, χ_1 および χ_2 は規格化され, 互いに直交しているものとする。(Show the orthogonality of φ_1 and φ_2 . The χ_1 and χ_2 are normalized and orthogonal to each other.)

4) 1,3-ブタジエンの全 π 電子結合エネルギーは, $4\alpha + 4.48\beta$ で表される。1,3-ブタジエンの π 結合生成エネルギーおよび非局在化エネルギーを求めよ。(The total π -electron binding energy of 1,3-butadiene is given by $4\alpha + 4.48\beta$. Calculate the π -bond formation energy and delocalization energy of 1,3-butadiene.)

2) Na 金属の密度を計算せよ。Na の原子量は 23.0 g mol^{-1} とする。(Calculate the density of Na metal. Atomic weight of Na is 23.0 g mol^{-1} .)

3) Cu $K\alpha$ (波長 $\lambda = 0.154 \text{ nm}$) を用いてこの結晶の粉末 X 線回折を測定するとき, 次の問いに答えよ。(X-ray powder diffraction pattern of Na is measured by using Cu $K\alpha$ radiation (wavelength $\lambda = 0.154 \text{ nm}$). Answer the following questions.)

a) 回折条件を示すブラッグ式を記せ。(Describe Bragg's equation, which expresses the conditions of diffractions.)

b) 立方晶の結晶面の間隔 d をミラー指数 h, k, l および 格子定数 a で表せ。(Give the expression of distance d between lattice planes for cubic crystals using Miller indices h, k, l , and the lattice constant a .)

c) 最も低角に現れる回折の指数を答えよ。また, この回折のブラッグ角 θ を計算せよ。(Answer the Miller index of the diffraction appearing at the lowest Bragg angle. Calculate the Bragg angle θ of this diffraction.)

2. X 線を用いて固体材料の化学組成を分析する方法を一つあげ, その原理と特徴を簡潔に説明せよ。(Answer an analytical method to determine chemical compositions of solid materials by using X-ray. Explain briefly its principles and characteristics.)

次の

F

Graduate School of Advanced Science and Engineering (Master's Course), Hiroshima University
Entrance Examination Booklet (General Selection)

(2023年8月24日実施 / August 24, 2023)

試験科目 Subject	応用化学 (専門科目Ⅱ) Applied Chemistry II	プログラム Program	応用化学 (Applied Chemistry) スマートイノベーション (Smart Innovation)	受験番号 Examinee's Number	M
-----------------	--------------------------------------	------------------	--	---------------------------	---

問題3 (Problem 3) 続き (Continued)

2. 亜硫酸亜鉄(Ⅱ)の甘味増進のふるま。空白がより大きい二つについてオクタート印を満ちせよ。それぞれのルイス構

例

--	--

Fe(phen)₃²⁺ conc. / 10⁻⁵ mol dm⁻³ 0 3.0 6.0 9.0 15

Entrance Examination Booklet (General Selection)

(2023年8月24日実施 / August 24, 2023)

試験科目 応用化学 (専門科目 II)
 Subject Applied Chemistry II

プログラム Program	応用化学 (Applied Chemistry) スマートイノベーション (Smart Innovation)	受験番号 Examinee's Number	M
------------------	--	---------------------------	---

問題3 (Problem 3) 続き (Continued)

7. 1,10-フェナントロリン(phen)は水中でFe²⁺と安定な錯イオンを形成し、吸収スペクトルにおいて波長 510 nm に強い吸収をもつため、その光吸収を利用してFe²⁺の定量分析に用いられる。以下の問いに答えよ。(1,10-Phenanthroline (phen)
網脇, 沢村,