学生番号（　　　　　　　　　　　　　　）　氏名（　　　　　　　　　　　　　　　）

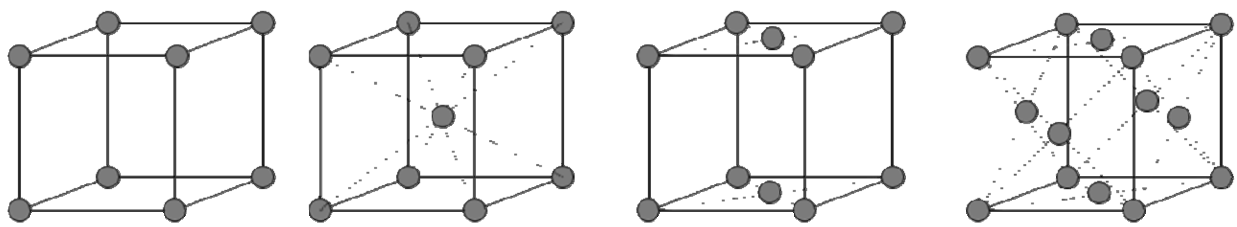
［4］次の文を読み，以下の(1)〜(3)に答えなさい．

結晶は規則的に繰り返す“構造の要素”からできていて，この構造の要素は原子であったり，分子であったりする．格子は，これらの図形の位置を表す点で構成される図形である．空間格子は点が三次元的に無限に配列したものであり，結晶の基本構造を決めている．単位胞は仮想的な平行六面体であって，［　①　］によって繰り返される図形の一単位を含む．単位胞は，（壁を構成するレンガのような）基本的な単位であって，これから［　①　］の変位だけによって結晶全体が形成されるものと考えることができる．単位胞は，ふつう隣り合う格子点を直線で結んでつくる．このような単位胞を単純単位胞という．場合によっては，中心または二つの相対する面上にも格子点がある．無限個の異なる単位胞によって同じ格子を示すことができるが，ふつうは辺が最も短く，また辺同士が互いにできるだけ垂直に近くなるものを選ぶ．単位胞の辺の長さを a，b，c で表し，それらの間の角度を α，β，γ で表す．単位胞は，それが持っている［　②　］対称要素に注目して，［　③　］個の結晶系に分類される．三次元では，異なる空間格子は［　④　］個しかなく，［　⑤　］格子という．

(1) 文中の［ ① ］〜［ ⑤ ］に当てはまる語句または数字を記せ．

①［　　　　　］，②［　　　　　］，③［　　　　　］，④［　　　　　］，⑤［　　　　　］

(2) 単位胞には，単純単位胞を含めて４種類ある．単純単位胞の例にならって，次の単位胞の名称を［　］内に記入せよ．括弧内のアルファベットは単位胞の略号である



例：[単純] 単位胞（P）［　　　　］単位胞（I）［　　　　］単位胞（C）［　　　　］単位胞（F）

(3) 正方晶系では，$a=b\neq c$, $\alpha=\beta=\gamma=90°$ であり，［　⑤　］格子の中には４種類の単位胞のうちＰ単位胞とＩ単位胞がある．正方Ｆ単位胞が［　⑤　］格子の中に含まれない理由を，図を描いて説明せよ．

［５］下の(1)式で表される古典力学の一般的な１次元の波動の式に、ド・ブロイの物質波の概念を持ち込んで量子力学的波動方程式である時間に依存しないシュレディンガー方程式を導け．全エネルギーEは次の(2)式で，またド・ブロイの関係式は下の(3)式で与えられる．ここで，λは波長，vは速度，pは運動量，mは質量，hはプランク定数である．

古典力学の一般的な波動の式

$$\Psi(x,t) = A\sin\left\{\frac{2\pi}{\lambda}\left(x - vt\right)\right\} \tag{1}$$

全エネルギーE

$$E = \frac{p^2}{2m} + V\left(x\right) \tag{2}$$

ド・ブロイの関係式

$$\lambda = \frac{h}{p} \tag{3}$$

［６］選択問題　［６Ａ］または［６Ｂ］のどちらか一方だけを解答せよ.

［６Ａ］次の文を読み，下の(1)および(2)に答えよ.

エネルギーEをもって一次元で運動している質量mの粒子に対する，時間に依存しないシュレディンガー方程式は，次式(1)で表される.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\Psi=E\Psi \qquad (1)$$

ここで，第１項は運動エネルギー，第２項はポテンシャルエネルギーを表している．$V(x)$は点xにおける粒子のポテンシャルエネルギーである. (1)式はハミルトニアン$\mathcal{H}$を用いて, $\mathcal{H}\Psi=E\Psi$という形に書くことができる.

図５のようなポテンシャル Vにしたがう質量mの粒子の運動を考えよう．これは，１次元の限られた領域を運動する粒子の「箱の中の粒子」の問題と呼ばれている.

$x=0$ と $x=L$に，無限の高さを持つ壁があり，この粒子はこれらの壁の間に閉じ込められているとする. ポテンシャルエネルギーVは次のように表わされる.

$$\begin{cases} x<0,\quad x>L & \text{で}\quad V=\infty, \\ 0\le x\le L & \text{で}\quad V=0 \end{cases}$$

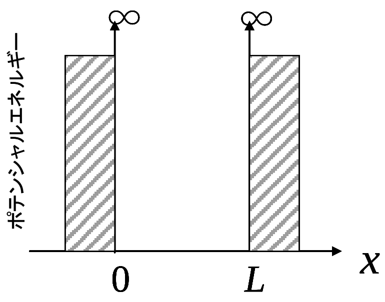


図５．１次元の領域$0\le x\le L$に閉じ込められた粒子のポテンシャルエネルギー

粒子は壁の間に閉じ込められているので，波動関数 Ψ は, $x<0$，$x>L$の領域では$\Psi=0$である.

⑴ １次元の領域$0\le x\le L$に閉じ込められた粒子の，領域$0\le x\le L$におけるハミルトニアン（ハミルトン演算子）$\mathcal{H}$を書け.

⑵ １次元の領域$0\le x\le L$に閉じ込められた粒子のシュレディンガー方程式を解くと，この粒子の波動関数 Ψは次式⑵で与えられる．この粒子のエネルギーEを計算せよ．答えだけ書いてあっても零点である．波動関数 Ψから計算する過程の式を全部示しなさい.

$$\Psi_n(x)=\left(\frac{2}{L}\right)^{1/2}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right),\qquad n=1,2,\cdots \qquad (2)$$

［6］選択問題　［6A］または［6B］のどちらか一方だけを解答せよ.

［6B］配位化合物の異性体は，大きく分けると，(1)構造異性体と(2)立体異性体の２種類に分けることができる．次の(1)および(2)に答えよ.

(1)立体異性体の中のシス-トランス異性体の例としては，正八面体６配位錯体である ML_3X_3 にみられる fac 異性体と mer 異性体がある．ここで，M は中心遷移金属，L と X は配位子を表している．この２つの異性体の立体構造式を描いて，fac 異性体と mer 異性体について説明せよ.

⑵ 立体異性体の中の光学異性体の例としては，$[Co(en)(NH_3)_2(H_2O)Cl]^{2+}$がある．ここで，en はエチレンジアミン $NH_2(CH_2)_2NH_2$ を表している．下の例にならって，この２つの光学異性体の立体構造式を描いて，光学異性体とはどのようなものか説明せよ．ただし，下の例は光学異性体ではないことに注意せよ.