

平成 22 年度
大学院工学研究科修士課程
材料工学専攻入学資格試験 問題冊子

材料基礎学 A

120 点満点

9 : 30 ~ 11 : 30

注 意 事 項

1. 問題冊子および解答冊子は係員の指示があるまで開かないこと。
2. 問題冊子は表紙と白紙 1 枚のほかに 8 ページである。
3. 問題冊子は持ち帰ってもよいが、解答冊子は持ち帰ってはならない。
4. 試験開始の合図の後、まず落丁・乱丁のないことをチェックすること。

材料基礎学 A

[問題 1]

X線や電子線, 中性子線などを物質に対し照射し, その散乱を見ることで結晶などの物質内部の構造を知ることができる。以下の問題を解くことで, X線などの散乱によってどのように物質の構造を知ることができるかを見ていこう。ただし, 簡単のため, この問題では物質はすべて1種類の原子で構成されているものとする。

問1 以下の文章<A>を読み, (a)および(b)に答えなさい。

文章<A>

結晶中の原子の並びには並進対称性があり, 単位格子が周期的に並んだものとして表すことができる。まず, 結晶からのX線などの散乱を一般的に考える。このとき, 散乱振幅 $W(\vec{q})$ (\vec{q} は散乱ベクトル) は,

$$W(\vec{q}) = F(\vec{q}) \sum_{n_1=1}^{N_1} \sum_{n_2=1}^{N_2} \sum_{n_3=1}^{N_3} \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}_{n_1, n_2, n_3}) \quad (1)$$

と書くことができる。ここで, $\vec{r}_{n_1, n_2, n_3} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ は結晶中の単位格子の位置を表すベクトルであり, $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ は結晶の軸ベクトルである。 n_1, n_2, n_3 は整数であり, 結晶が単位格子が周期的に並んだ構造をもつことを表している。また, N_1, N_2, N_3 は各軸ベクトル $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ に沿った方向の単位格子の数である。 $F(\vec{q})$ は構造因子とよばれる。結晶が非常に多くの原子で構成されている (N_1, N_2, N_3 が非常に大きい) 場合, 式(1)は,

$$W(\vec{q}) = \begin{cases} NF(\vec{g}_{hkl}) & \vec{q} = \vec{g}_{hkl} \\ 0 & \vec{q} \neq \vec{g}_{hkl} \end{cases} \quad (2)$$

となる。ここで, $N = N_1N_2N_3$ は結晶中の単位格子の数である。 $\vec{g}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ (h, k, l は整数) は逆格子ベクトルとよばれ, $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ は逆格子の軸ベクトルである。

構造因子 $F(\vec{q})$ は, ある単位格子を選んだとき,

$$F(\vec{q}) = \sum_{j=1}^n f \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{t}_j) \quad (3)$$

と書かれる。 $\vec{t}_j = u_j\vec{a}_1 + v_j\vec{a}_2 + w_j\vec{a}_3$ は, 単位格子中の j 番目の原子の位置を単位格子の端を原点として表したベクトルであり, n は単位格子中に含まれる原子の数である。

- (a) 逆格子の軸ベクトル $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ を, 結晶の軸ベクトル $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ を用いて書き表しなさい。
- (b) 構造因子 $F(\vec{q})$ を, $\vec{q} = \vec{g}_{hkl}$ の場合について, $f, j, n, u_j, v_j, w_j, h, k, l$ を用いて書き表しなさい。

材料基礎学 A

問2 以下の文章および<C>を読み, (a)~(d)に答えなさい。

文章

図1は, 立方晶系に属する3つのブラベー格子である単純立方格子, 体心立方格子, 面心立方格子を示している。立方格子の軸ベクトルは, 直交座標を用いて,

$$\vec{a}_1 = (a, 0, 0), \quad \vec{a}_2 = (0, a, 0), \quad \vec{a}_3 = (0, 0, a) \quad (4)$$

と表せる。 a は立方格子の格子定数である。単純立方格子のように, 単位格子内に1つの原子しか含まない場合, 構造因子 $F(\vec{q})$ は, $F(\vec{q}) = f$ となる。

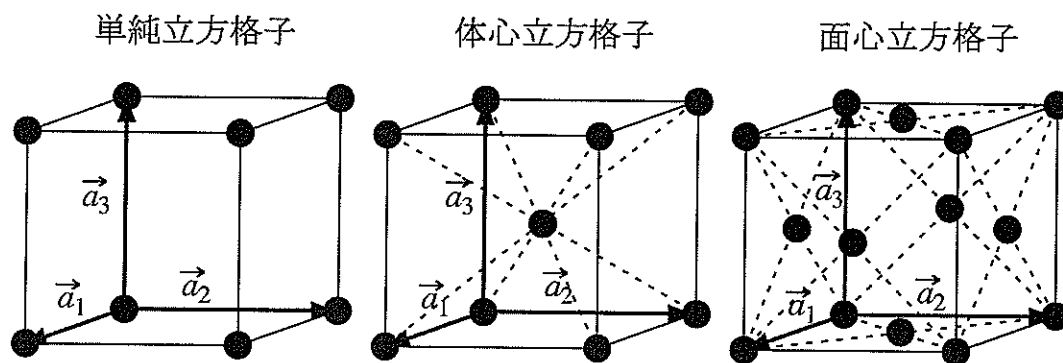


図1. 単純立方格子, 体心立方格子, 面心立方格子の単位格子

- (a) 体心立方格子および面心立方格子の構造因子, $F_{\text{bcc}}(\vec{q})$, $F_{\text{fcc}}(\vec{q})$ を散乱の起こる必要条件 ($\vec{q} = \vec{g}_{hkl}$) の下で求めなさい。また, 求めた構造因子が hkl の組み合わせによって異なる場合は, hkl によって分類しなさい。

文章<C>

体心立方格子や面心立方格子では, 単位格子中に複数の原子が含まれている。しかし, これらの格子でも, 単位格子中の原子の数が1つになるように結晶の軸ベクトルをとることができる。そのような結晶の軸ベクトル $\vec{A}_1, \vec{A}_2, \vec{A}_3$ を基本並進ベクトルとよび, 基本並進ベクトルで構成される単位格子を基本単位格子とよぶ。また, 単位格子を基本単位格子にとったときの逆格子の軸ベクトル $\vec{B}_1, \vec{B}_2, \vec{B}_3$ は, 逆格子の基本並進ベクトルである。結晶が同じであれば, 単位格子を基本単位格子にとっても, 複数の原子を含むより大きな格子にとっても, 結果的には散乱振幅は同じになるはずである。それを, 体心立方格子を例に見ていこう。体心立方格子の基本並進ベクトルは, 原点から体心の位置に引いたベクトルであり, 図1に示した立方格子の軸ベクトル $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ を使って, 次ページの式(5)のように書き表せる。

材料基礎学 A

$$\vec{A}_1 = \frac{1}{2}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2 - \vec{a}_3), \quad \vec{A}_2 = \frac{1}{2}(-\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3), \quad \vec{A}_3 = \frac{1}{2}(\vec{a}_1 - \vec{a}_2 + \vec{a}_3) \quad (5)$$

- (b) 体心立方格子の逆格子の基本並進ベクトル $\vec{B}_1, \vec{B}_2, \vec{B}_3$ を、単位格子を図1のような立方格子にとった場合の逆格子の軸ベクトル $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ を用いて書き表しなさい。
- (c) 体心立方格子の基本単位格子の構造因子 $F_{\text{bcc}}(\vec{q})$ を、散乱の起こる必要条件 ($\vec{q} = \vec{G}_{\text{HKL}}$) の下で求めなさい。ただし、この場合の逆格子ベクトル \vec{G}_{HKL} は、 $\vec{G}_{\text{HKL}} = H\vec{B}_1 + K\vec{B}_2 + L\vec{B}_3$ (H, K, L は整数) である。
- (d) 体心立方格子の単位格子を図1のような立方格子にとった場合でも、式(5)で表される基本単位格子にとった場合でも、散乱の起こる条件は同じであることを示しなさい。また、両単位格子の大きさの違いに注意して、散乱振幅 $W(\vec{q})$ が同じになることを示しなさい。

問3 以下の文章<D>を読み、(a)~(c)に答えなさい。

文章<D>

固体の構造の中で、変調構造とよばれるものがある。これは、基本となる格子が何らかの理由で、その基本格子とは異なる周期(変調周期)で変調されたものである。このような変調構造をもつ結晶によってX線などがどのように散乱されるかを考えよう。

図2の左側は、図1に示した単純立方格子の \vec{a}_1 方向からの投影図である。単純立方格子では、単位格子内に1つの原子だけを含むので $F(\vec{q}) = f$ であり、式(1)は、

$$W(\vec{q}) = f \sum_{n_1=1}^{N_1} \sum_{n_2=1}^{N_2} \sum_{n_3=1}^{N_3} \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}_{n_1, n_2, n_3}) \quad (6)$$

となる。 $\vec{r}_{n_1, n_2, n_3} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ は本来は単位格子の位置を表すベクトルであるが、単純立方格子では結晶中の原子位置を表すベクトルとみなすことができる。この場合、 N_1, N_2, N_3 は各軸方向の原子の数である。

この結晶を基にして、図2の右側のように、原子が \vec{a}_3 方向にわずかに変位し、その変位が \vec{b}_3 方向に平行な波数ベクトル $\vec{Q} = Q_0\vec{b}_3$ で sin 関数で振動した変調構造を考える。すなわち、元の単純立方格子で $\vec{r}_{n_1, n_2, n_3} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ の位置にあった原子は、変調構造をもつ結晶中では、 $\Delta \sin(\vec{Q} \cdot \vec{r}_{n_1, n_2, n_3})\vec{a}_3$ だけ元の位置からずれている。ここで、 Δ は(格子定数 a を単位とした)変位の大きさの最大値である。ただし、図2の右側では変位の大きさを誇張して描いてあるが、変位は格子定数に比べて十分に小さい ($\Delta \ll 1$) とする。

材料基礎学 A

- (a) 変調構造をもつ結晶中の原子の位置 $\vec{r}_{n_1, n_2, n_3}^{(d)}$ を, $\vec{r}_{n_1, n_2, n_3}, \Delta, \vec{Q}, \vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ のうち必要なものを用いて書き表しなさい.
- (b) 変調構造をもつ結晶からの散乱振幅 $W^{(d)}(\vec{q})$ を, $\Delta, \vec{Q}, \vec{q}, \vec{r}_{n_1, n_2, n_3}, f, q_1, q_2, q_3, n_1, n_2, n_3, N_1, N_2, N_3$ のうち必要なものを用いて書き表しなさい. ただし, q_1, q_2, q_3 は散乱ベクトル $\vec{q} = q_1\vec{b}_1 + q_2\vec{b}_2 + q_3\vec{b}_3$ の $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ 方向の成分であり, q_3 はあまり大きくなく, $q_3\Delta \ll 1$ の条件を満たしているとする.
- (c) (b) で求めた $W^{(d)}(\vec{q})$ を, N_1, N_2, N_3 が十分大きい場合について成り立つ以下の式 (7) を用いて計算し, 変調構造をもつ結晶からの散乱が起こる条件を求めなさい. さらに, 解答用紙に描いてある散乱ベクトルの $(0, q_2, q_3)$ 面上に, 散乱の起こる点を描き入れなさい.

$$\sum_{n_1=1}^{N_1} \sum_{n_2=1}^{N_2} \sum_{n_3=1}^{N_3} \exp(-i\vec{p} \cdot \vec{r}_{n_1, n_2, n_3}) = \begin{cases} N & \vec{p} = \vec{g}_{hkl} \\ 0 & \vec{p} \neq \vec{g}_{hkl} \end{cases} \quad (N = N_1 N_2 N_3) \quad (7)$$

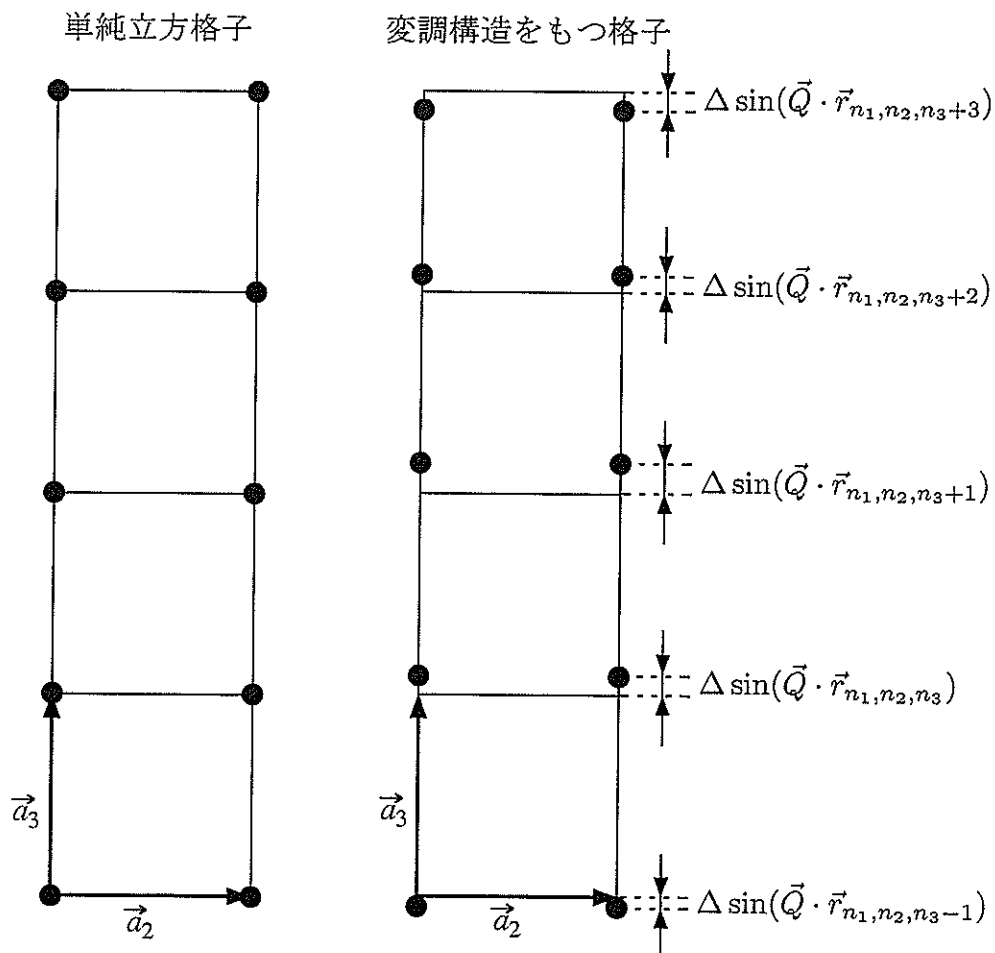


図 2. 単純立方格子および変調構造をもつ格子 (\vec{a}_1 方向からの投影図)

材料基礎学 A

〔問題2〕

多相平衡に関する以下の設問に答えよ。ただし各設問において、標準生成ギブズエネルギーは化合物 1 mol あたりの量とする。各設問中の組成はすべてモル分率で表されている。また、元素 A および元素 B に関しては、その温度で最も安定な純物質を標準状態とする。酸素ガスは理想気体として取り扱い、考察する温度での 1 気圧の理想気体を標準状態とする。解答に際して必要ならば、気体定数 R を $8.31 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$ 、ファラデー定数 F を $9.65 \times 10^4 \text{ C}\cdot\text{mol}^{-1}$ とするとともに、以下の偏微分の公式を用いよ。

《偏微分の公式》

$\phi = \phi(a, b)$ が全微分可能であり、さらに $a = a(x, y)$ および $b = b(x, y)$ がともに偏微分可能ならば、合成関数 $\phi = \phi(a(x, y), b(x, y))$ も微分可能であり、次式が成り立つ。

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial a}\right)_b = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial x}{\partial a}\right)_b + \left(\frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial y}{\partial a}\right)_b$$

- 問1 (a) ^{だめ}熱溜および圧力溜と平衡している系において、複数の相が平衡しているとき、それぞれの相の間ではいくつかの熱力学変数が互いに等しくなる。この熱力学変数を以下の選択肢からすべて選べ。

[選択肢] 内部エネルギー, 温度, エントロピー, エンタルピー, 化学ポテンシャル, 圧力, 体積

- (b) 元素 A および元素 B からなる A-B 2 元系において、系のギブズエネルギーを G 、元素 A および元素 B の物質質量 (単位 mol) を N_A ならびに N_B 、系の全物質質量を N とするとき、系の構成成分 1 mol あたりのギブズエネルギー g は、

$$g = \frac{G}{N_A + N_B} = \frac{G}{N} \quad (1)$$

で与えられる。また、元素 A の化学ポテンシャル μ_A は、系の温度を T 、圧力を P とすれば、系のギブズエネルギー G との間に次の関係がある。

$$\mu_A = \left(\frac{\partial G}{\partial N_A}\right)_{T, P, N_B} \quad (2)$$

ここで Δg を次のように定義する。

$$\Delta g \equiv g - x_A \mu_A^\circ - x_B \mu_B^\circ \quad (3)$$

材料基礎学 A

ただし、 μ_A° および μ_B° は元素 A および元素 B の標準状態における化学ポテンシャルである。いま、 $\Delta\mu_A$ を

$$\Delta\mu_A \equiv \mu_A - \mu_A^\circ \quad (4)$$

と定義するとき、 $\Delta\mu_A$ を Δg , T , P , N , ならびに元素 B のモル分率 x_B を使って表せ。

- (c) いま、ある温度 T において A-B 2 元系の固相が正則溶体モデルで近似できるとき、 Δg は以下の式で表される。

$$\Delta g = RT(x_A \ln x_A + x_B \ln x_B) + x_A x_B \Omega \quad (5)$$

ただし、 Ω は相互作用パラメータであり、記号 \ln は自然対数を表す。このとき、 $\Delta\mu_A$ を R , T , x_B , ならびに Ω を使って表せ。

- 問2 元素 A と元素 B からなる 2 元系状態図は、1 つの共晶反応を含む状態図であり、その共晶温度は 1000 K よりも高いものとする。状態図にあらわれる固相 α_1 は純粋な A の相と、固相 α_2 は純粋な B の相と、それぞれ組成が連続しているものとする。また、温度 1000 K において、固相 α_1 および固相 α_2 は同じ相互作用パラメータをもつ正則溶体とする。温度を 1000 K として、以下の (a)~(c) に答えよ。

- (a) 正則溶体の性質から、固相 α_1 ならびに固相 α_2 への互いの元素の溶解度は等しい。モル分率で表された溶解度が 0.15 であるとき、この系の相互作用パラメータ Ω として最も適当なものを以下の (あ) ~ (か) から選べ。

- (あ) $478 R$ (い) $978 R$ (う) $1478 R$
 (え) $2000 R$ (お) $2478 R$ (か) $2978 R$

ただし、 R は気体定数である。解答にあたって必要ならば、図 1 (問題 2 の末尾に記載) を参考にしてもよい。

- (b) 組成 $x_B = 0.5$ における $\Delta\mu_A$ ならびに $\Delta\mu_B$ の値を答えよ。
 (c) 化合物 AB が温度 1000 K で安定に存在するものとするれば、この化合物 AB の標準生成ギブズエネルギーはある値より小さくなければならない。この値を答えよ。

- 問3 酸化物の標準生成ギブズエネルギーの実験的な求め方には、直接的な熱量測定による方法に加え、標準生成ギブズエネルギーが既知である他相との平衡を利用して決定する方法がある。いま、元素 A および元素 B に酸素を加えた 3 元系について考察する。この 3 元系の温度 1000 K での状態図を図 2 (問題 2 の末尾に記載) に示す。ここで固

材料基礎学 A

相 α_1 ならびに固相 α_2 への酸素の溶解度は無視できるほど小さく、これらの相は問 2 の場合と同じ相互作用パラメータをもつ正則溶体である。また、すべての酸化物において、標準生成ギブズエネルギーにかかわる計算では元素の不定比性を無視できるものとする。以下の (a)~(d) に答えよ。

(a) 化合物 AO と単体 B を等モル比で混合し、温度 1000 K において平衡状態に達したときに現れる相をすべて答えよ。

(b) 温度 1000 K における化合物 B_2O_3 の標準生成エンタルピーおよび標準生成エントロピーを求めよ。計算の際、必要ならば以下の熱力学データを用いよ。

・化合物 B_2O_3 の標準生成エンタルピー (温度 298 K)

$$\Delta H_{B_2O_3, 298K}^\circ = -310 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

・化合物 B_2O_3 の標準生成エントロピー (温度 298 K)

$$\Delta S_{B_2O_3, 298K}^\circ = -300 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$$

・定圧比熱 (温度範囲 298~1000 K, 単位 $\text{J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$)

$$\text{化合物 } B_2O_3 \quad C_{P, B_2O_3} = 95 + (5.0 \times 10^{-3}) T$$

$$\text{単体 B} \quad C_{P, B} = 20 + (2.0 \times 10^{-3}) T$$

$$\text{気体酸素 } O_2 \quad C_{P, O_2} = 30 + (4.0 \times 10^{-3}) T$$

(c) 酸化物イオン O^{2-} の輸率が 1 である酸化物イオン伝導体を用い、以下の電池式で表される電池を作製し、温度 1000 K において起電力測定を行った。

(-) Pt, 組成 1 の混合物 | 酸化物イオン伝導体 | Pt, 純酸素 (圧力 1 気圧) (+)

ただし、電池式左辺の組成 1 とは、図 2 の状態図上に「組成 1」として示された組成である。このとき測定された電池の起電力は +148 mV であった。温度 1000 K における化合物 A_2O の標準生成ギブズエネルギーを相互作用パラメータ Ω の関数として表せ。

(d) 温度 1000 K における化合物 ABO_2 の標準生成ギブズエネルギーを相互作用パラメータ Ω の関数として表せ。

材料基礎学 A

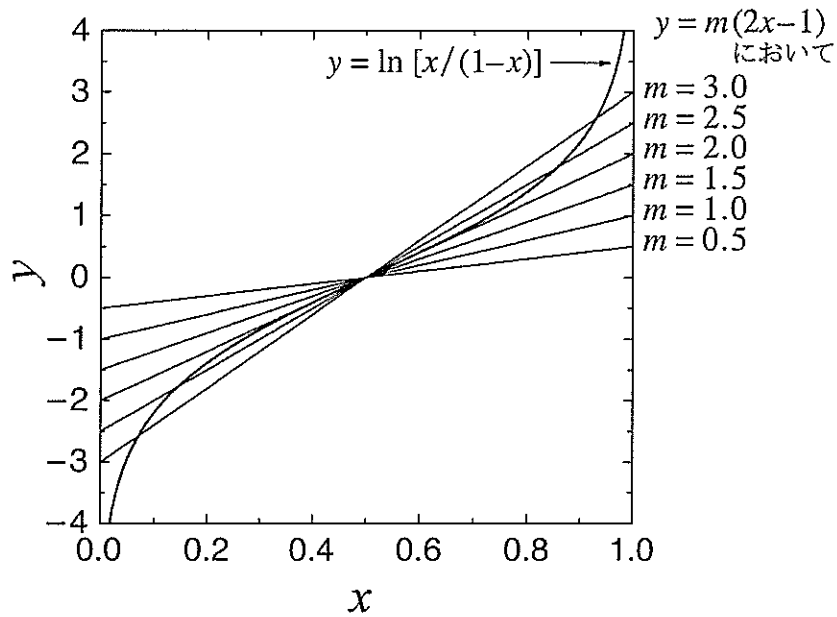


図1. 関数 $y = \ln \left[\frac{x}{1-x} \right]$ ならびに $y = m(2x-1)$ のプロット

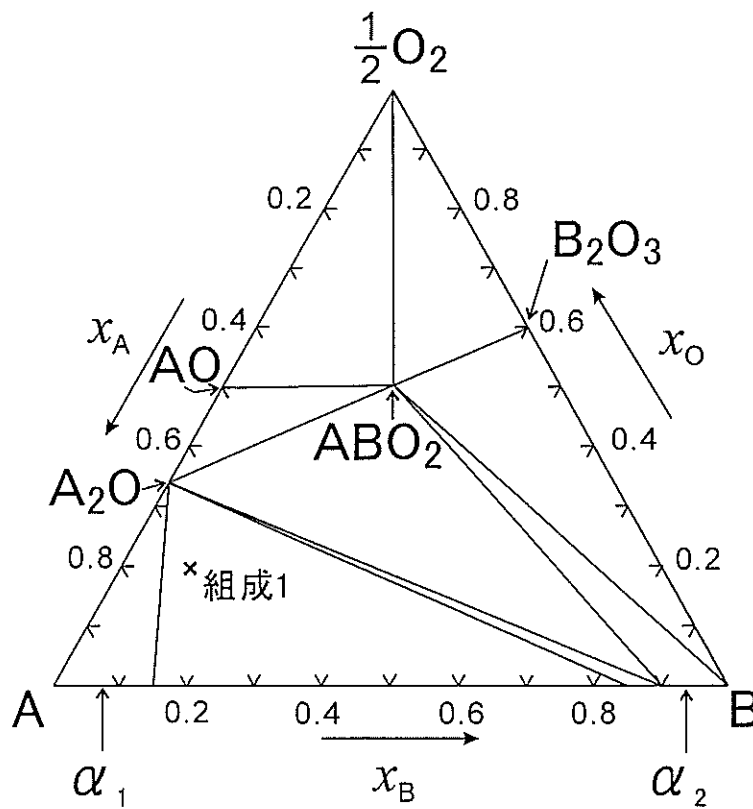


図2. A-B-O₂系の状態図 (温度 1000 K)

平成 22 年度

大学院工学研究科修士課程

材料工学専攻入学資格試験 問題冊子

材料基礎学 B

180 点満点

13 : 00 ~ 16 : 00

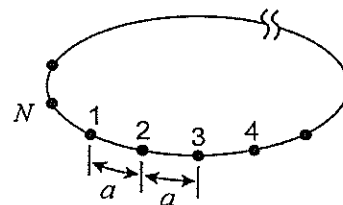
注 意 事 項

1. 問題冊子および解答冊子は係員の指示があるまで開かないこと。
2. 問題冊子は表紙と白紙 1 枚のほかに 1 3 ページである。
3. 問題冊子は持ち帰ってもよいが、解答冊子は持ち帰ってはならない。
4. 試験開始の合図の後、まず落丁・乱丁のないことをチェックすること。

材料基礎学 B

[問題 1]

一次元結晶中の電子状態を一電子近似で考える。この結晶は、1番目の原子位置を座標原点とし、等しい間隔 a で環状に並んだ N 個の同種原子からなる。次の文章<A>~<C>を読み、各問に答えなさい。



文章<A>

電子の感じるポテンシャル $V(r)$ は結晶格子と同じ周期性をもつため、任意の並進 $R = na$ (n は整数) に対し、 $V(r) = V(r + na)$ が成り立つ。一方で、電子の波動関数 $\psi(r)$ は a だけ並進させたとき

$$\psi(r + a) = \lambda \psi(r) \quad (\lambda \text{ は定数})$$

のように書ける。 Na だけ並進したときは、

$$\psi(r + Na) = \boxed{\text{(ア)}} \psi(r)$$

となる。環状の一次元結晶では、

$$\psi(r + Na) = \psi(r)$$

が成り立つため、定数 λ について次の関係式が得られる。

$$\boxed{\text{(イ)}}$$

これを満たす λ は、虚数単位 i と N 、任意の整数 ℓ を用いて

$$\lambda = \exp(2\pi i \boxed{\text{(ウ)}})$$

となり、任意の並進 $R = na$ による $\psi(r + na)$ は次式で与えられる。

$$\psi(r + na) = \exp(inka) \psi(r)$$

ここで、波数ベクトル k は

$$k = \boxed{\text{(エ)}} \ell$$

である。この $\psi(r)$ についての関係式は、結晶中の電子の波動関数が満たすべき条件として知られる $\boxed{\text{(オ)}}$ であり、これが成り立つ関数 $\psi(r)$ を $\boxed{\text{(カ)}}$ とよぶ。またこのとき $\psi(r)$ は、結晶格子と同じ周期性をもつ関数 $u(r)$ を用いて

材料基礎学 B

$$\psi(r) = u(r) \exp(ikr)$$

と表現することもできる。 $u(r)$ は、逆格子ベクトル $g_i = \boxed{\text{(キ)}} t$ (t は整数) を用いて

$$u(r) = \sum_{t=-\infty}^{+\infty} U_t \exp(ig_i r) \quad (U_t \text{ は定数})$$

とフーリエ級数に展開できるので、 $\psi(r)$ は次式で与えられる。

$$\psi(r) = \sum_{t=-\infty}^{+\infty} U_t \exp[i(k + g_i)r]$$

上式右辺の $k + g_i$ は、 g_i のすべての範囲で与えられるが、適当な逆格子ベクトルを用いて第1ブリルアンゾーン内部の波数ベクトルに還元することができる。慣例的に、第1ブリルアンゾーンは $k = 0$ を中心とするため、一次元結晶の場合、波数ベクトル k の範囲として

$$\boxed{\text{(ク)}} \leq k < \boxed{\text{(ケ)}}$$

を考えればよい。したがって N が有限数であるとき、第1ブリルアンゾーン内で k のとりうる個数は $\boxed{\text{(コ)}}$ 個である。

問1 空欄 (ア) ~ (コ) を適する式もしくは用語で埋めなさい。

文章

上に示した波動関数 $\psi(r)$ の一電子エネルギー E は、次の固有方程式 (シュレディンガー方程式) から求めることができる。

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) \right) \psi(r) = E\psi(r) \quad (1)$$

ここで、 $\hbar = h/2\pi$ で h はプランク定数、 m は電子の質量である。いま、結晶のポテンシャルが $V(r) = 0$ と近似できる極限を考える。 $\psi(r)$ の g_i を用いたフーリエ級数展開式において、ある1つの g_i 項のみに着目し、

$$\psi(r) = U_t \exp[i(k + g_i)r]$$

と仮定すると、エネルギー E は次式になる。

材料基礎学 B

$$E = \boxed{\text{(サ)}}$$

考えられるすべての g_i に対し、エネルギー E と波数ベクトル k の関係を図示することで、一次元結晶における自由電子のエネルギーバンド構造が得られる。

問2 空欄 (サ) に適する式を示しなさい。

問3 第1ブリルアンゾーン内のエネルギーバンド構造を、還元ゾーン形式で解答用紙のグラフに図示しなさい。このとき、各波数ベクトル k に対し、低エネルギー側から3つ目のバンドまでを描画すること。また縦軸のエネルギーは $(\hbar^2/2m) \cdot (2\pi/a)^2$ を1とする単位とし、横軸も第1ブリルアンゾーンの k の範囲が分かるように示すこと。

問4 一次元環状結晶に $4N$ 個の電子が存在する場合を考える。電子スピンを考慮して、基底状態で電子のとり最高エネルギー（フェルミエネルギー）を求めなさい。

文章<C>

結晶ポテンシャルがゼロでないときの、波動関数 $\psi(r)$ のエネルギー E について考える。結晶格子と同じ周期性をもつポテンシャル $V(r)$ は、逆格子ベクトル g_i を用いて

$$V(r) = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} V_i \exp(ig_i r) \quad (V_i \text{ は定数})$$

のようにフーリエ級数に展開できる。結晶ポテンシャルが弱い場合、 $V(r)$ はいくつかの g_i のみを用いて近似できる。ここでは簡単のため、 V_1 と V_{-1} のフーリエ成分のみを用い、さらに $V_1 = V_{-1} = V$ として、次式で表すことにする。

$$V(r) = V[\exp(ig_{-1}r) + \exp(ig_1r)]$$

一方、 $\psi(r)$ も、 g_i の2成分 ($t=0, 1$) のみを考慮した

$$\psi(r) = U_0 \exp(ikr) + U_1 \exp[i(k + g_1)r]$$

で与えられると近似する。

エネルギー E を求めるため、まず、これらの $V(r)$ と $\psi(r)$ を式(1)に代入する。その後、両辺に $\exp(-ikr)$ を掛け、さらに $0 \leq r \leq Na$ の範囲で r について積分すると次式が得られる。

材料基礎学 B

$$\left(\boxed{\text{(シ)}} \right) U_0 + \left(\boxed{\text{(ス)}} \right) U_1 = 0 \quad (2)$$

同様に、両辺に $\exp[-i(k+g_1)r]$ を掛け、さらに r について積分すると、

$$\left(\boxed{\text{(ズ)}} \right) U_0 + \left(\boxed{\text{(セ)}} \right) U_1 = 0 \quad (3)$$

となる。 U_0 と U_1 に関する式(2)と式(3)の連立方程式が、 U_0 と U_1 が同時にゼロにならない解をもつ条件から E が求まる。

ブリルアンゾーン境界 $k = -\pi/a$ での解として、2つのエネルギー E_1 と E_2 が得られ、

$$E_1 = \boxed{\text{(ソ)}} , \quad E_2 = \boxed{\text{(タ)}}$$

となる。ここでは $V < 0$ と考えて、 $E_1 < E_2$ とする。2つのエネルギーの差 $E_2 - E_1 = \boxed{\text{(チ)}}$ は、ポテンシャル $V(r)$ の存在によりブリルアンゾーン境界で生じるバンドギャップの大きさに相当する。

問5 空欄 (シ) ~ (チ) を適する式で埋めなさい。ここで必要であれば、次の関係式を用いてもよい。

$$\begin{aligned} \frac{1}{Na} \int_0^{Na} \exp(ig_l r) dr &= 1 \quad (g_l = 0) \\ &= 0 \quad (g_l \neq 0) \end{aligned}$$

材料基礎学 B

[問題 2]

面心立方結晶（格子定数： a ）における完全転位の部分転位への分解および不動転位に関する以下の間に答えよ。簡単のため、結晶は等方弾性体であるとし、剛性率を μ 、ポアソン比を ν とする。ベクトル \vec{A} の大きさは A とする。解答の際には、平方根の開平はしなくて良い。

問1 面心立方結晶のすべりは $\{111\}$ 面上の完全転位（バーガースベクトル： $\vec{b} = a/2\langle 01\bar{1}\rangle$ ）の運動により起こるが、この完全転位は一般に面欠陥を介した2本の部分転位に分解する。今、すべり面が (111) 面、完全転位のバーガースベクトルが $\vec{b} = a/2[01\bar{1}]$ である場合について、2本の部分転位のバーガースベクトルを答え、その部分転位の名称および部分転位間に存在する面欠陥の名称を答えよ。

問2 問1で考えた部分転位の間隔を求める。以下の文章<A>中の枠(ア)～(イ)を埋めよ。

文章<A>

面欠陥を介した部分転位の間隔を求めるには、面欠陥の表面張力と部分転位間の反発相互作用力との釣り合いを考えれば良い。

まず2本の平行な転位間の相互作用について考える。正規直交座標系 (x, y, z) において、2本の転位のラインベクトルは z 軸の正の方向に平行とする。すべり面を zx 面とする転位1は z 軸上にあり、そのバーガースベクトル \vec{b}_1 がラインベクトルとなす角度を φ とする。このときバーガースベクトルは、らせん成分 \vec{b}_s と刃状成分 \vec{b}_e に分解することができ、 b_s と φ を用いて以下のように表すことができる。

$$b_s = \boxed{\text{(ア)}}, \quad b_e = \boxed{\text{(イ)}}$$

このとき転位1の周囲の応力場 σ_{ij} ($i, j = x, y, z$) は以下のように表すことができる。

$$\sigma_{ij} = \frac{\mu}{2\pi r} \boxed{\text{(ア)}} \tilde{\sigma}_{ij}^s + \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)r} \boxed{\text{(イ)}} \tilde{\sigma}_{ij}^e$$

ここで、 $\tilde{\sigma}_{ij}^s$ および $\tilde{\sigma}_{ij}^e$ は、それぞれ以下に示すらせん転位および刃状転位の周囲の応力成分における角度 θ に依存する成分で、次式中の[]内に対応する。ただし、次式中の r および θ は、位置 (x, y) と $x = r \cos \theta$, $y = r \sin \theta$ の関係式で結びつけられる。

<らせん転位（バーガースベクトル： \vec{b}_s ，ラインベクトル // z 軸の正の方向）>

$$\sigma_{xx} = -\frac{\mu b_s}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2} = \frac{\mu b_s}{2\pi r} [-\sin \theta],$$

$$\sigma_{yy} = \frac{\mu b_s}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2} = \frac{\mu b_s}{2\pi r} [\cos \theta], \quad \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \sigma_{xy} = 0$$

材料基礎学 B

<刃状転位 (バーガースベクトル: \vec{b}_e , ラインベクトル // z 軸の正の方向) >

$$\sigma_{xx}^e = -\frac{\mu b_e}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} = \frac{\mu b_e}{2\pi(1-\nu)r} [-\sin\theta(2 + \cos 2\theta)],$$

$$\sigma_{yy}^e = \frac{\mu b_e}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} = \frac{\mu b_e}{2\pi(1-\nu)r} [\sin\theta \cos 2\theta],$$

$$\sigma_{xy}^e = \frac{\mu b_e}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} = \frac{\mu b_e}{2\pi(1-\nu)r} [\cos\theta \cos 2\theta],$$

$$\sigma_{zz}^e = \nu(\sigma_{xx}^e + \sigma_{yy}^e), \quad \sigma_{yz}^e = \sigma_{zx}^e = 0$$

今, 2 本目の転位 2 と転位 1 が, 図 1 に示す位置関係にある場合を考える.

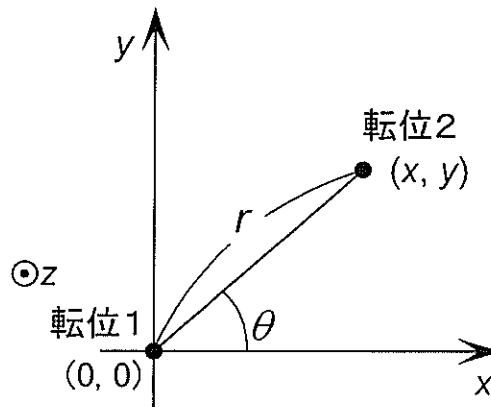


図 1. (転位線は z 軸に平行なため, z 成分は表示していない)

転位 2 のバーガースベクトル \vec{b}_2 と x 軸, y 軸, z 軸との方向余弦を (l, m, n) とすると, 転位 2 が転位 1 から受ける単位長さあたりの力 $f_{2(1)} = (f_{2(1)x}, f_{2(1)y}, f_{2(1)z})$ は, 以下のように求められる. (方向余弦については問題 2 末尾の注釈 1 を参照せよ.)

$$f_{2(1)x} = \boxed{\text{(ウ)}} \quad (1)$$

$$f_{2(1)y} = \frac{\mu b_1 b_2}{2\pi r} \left[\frac{1}{1-\nu} \{ l \sin\theta(1 + 2\cos^2\theta) - m \cos\theta \cos 2\theta \} \sin\varphi + n \sin\theta \cos\varphi \right] \quad (2)$$

$$f_{2(1)z} = \boxed{\text{(エ)}} \quad (3)$$

((ウ), (エ)の解答には $\mu, \nu, b_1, b_2, r, \theta, \varphi, l, m, n$ のうち必要なものを用いること.)

さて, 問 1 で考えた完全転位の分解反応が zx 面 ($y=0$) 上で起こるとすると, 面欠陥の表面張力と部分転位間の反発相互作用力の釣り合いを考えるには, x 方向の力の釣り合いを考えれば良い. 分解前の完全転位のラインベクトルとバーガースベクトル

材料基礎学 B

のなす角度を λ とすると、式(1)～式(3)中の転位 1, 転位 2 のバーガスベクトルの大きさ b_1, b_2 , ラインベクトルと転位 1 のバーガスベクトルのなす角度 φ , 転位 2 のバーガスベクトルの方向余弦 (l, m, n) はそれぞれ次の値となる。

$$b_1 = b_2 = \boxed{\text{(オ)}}, \quad \varphi = \boxed{\text{(カ)}}, \quad (l, m, n) = (\boxed{\text{(キ)}})$$

((オ)～(キ)の解答には a, λ のうち必要なものを用いること。)

単位面積当たりの面欠陥のエネルギーを γ とすれば、部分転位の間隔 r_1 は、 $\cos 2\lambda$ の関数として次式で与えられる。必要であれば問題 2 末尾の注釈 2 を参照せよ。

$$r_1 = \boxed{\text{(ク)}} \quad (4)$$

((ク)の解答には $\mu, \nu, a, \lambda, \gamma$ のうち必要なものを用いること。)

問 3 問 1 で考えたものと同じ(111)面上の完全転位 (バーガスベクトル: $\vec{b} = a/2[0\bar{1}\bar{1}]$) と($\bar{1}\bar{1}1$)面上の完全転位 (バーガスベクトル: $\vec{b} = a/2[10\bar{1}]$) がそれぞれ面欠陥を介して 2 本の部分転位に分解している。2つのすべり面の交線に沿って、この2つのすべり面上の部分転位が反応することにより転位が形成される場合を考える。ここで部分転位間の反応により形成される転位のバーガスベクトルが、分解前の2本の完全転位同士の反応により形成される不動転位のバーガスベクトルと平行である場合を考え、この場合の反応式、反応により形成される不動転位の名称、さらに不動転位とよばれる理由について答えよ。

問 4 問 3 で考えた不動転位の安定配置を求める。以下の文章中の枠(ケ)～(コ)を埋めよ。

文章

不動転位を構成している3本の部分転位は平行、すなわちすべて同じラインベクトルを有しているとする。これらの部分転位間の安定配置を求めるには、問 2 と同様に面欠陥の表面張力と部分転位間の相互作用力の釣り合いを考えれば良い。ここでそれぞれの転位間に働く力を考えるため、2つのすべり面の交線方向を z 軸とした図 2 に示すような正規直交座標系 (x, y, z) で考える。各転位のラインベクトルは z 軸の正の方向に平行であり、各転位は図 2 に示すような位置関係にあるとする。

すなわち、2つのすべり面上の部分転位の反応により形成された部分転位を転位 3, もとのすべり面である(111)面および($\bar{1}\bar{1}1$)面上に残された部分転位をそれぞれ転位 4, 転位 5 とする。また転位 3 と転位 4 の間隔, および転位 3 と転位 5 の間隔は等しく, どちらも r_2 とし, 転位 4 と転位 5 の間隔は r_3 とする。2つのすべり面, (111)面および($\bar{1}\bar{1}1$)面のなす角度を 2ψ ($2\psi \leq 90^\circ$) とすると,

$$\cos \psi = \boxed{\text{(ケ)}}, \quad \sin \psi = \boxed{\text{(コ)}}$$

材料基礎学 B

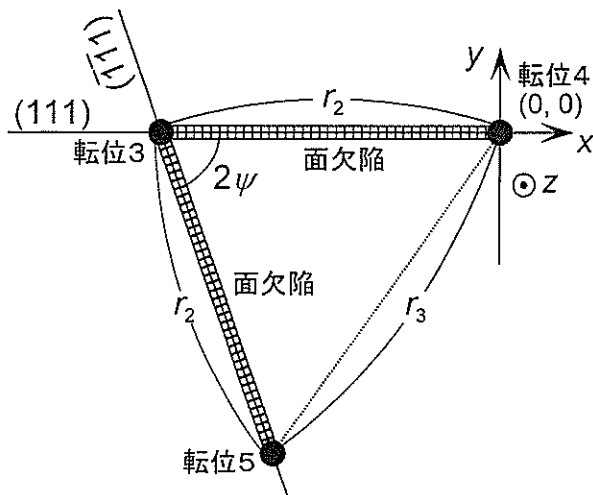


図2. (転位線はz軸に平行なため、z成分は表示していない)

であるので、転位4と転位5の距離 r_3 は r_2 の関数として、次式で表される。

$$r_3 = \boxed{\text{(サ)}} r_2$$

図2のような位置関係における転位3と転位4の安定間隔 r_2 は、転位4にかかるx方向の力の釣り合いを考えることで求めることができる。ここで図2におけるx軸、y軸、z軸は、結晶に付した座標系における結晶方位とそれぞれ以下のような関係にある。

$$x \text{ 軸} // \boxed{\text{(シ)}} , y \text{ 軸} // [111] , z \text{ 軸} // \boxed{\text{(ス)}}]$$

図2の正規直交座標系 (x, y, z) における転位3、転位4、転位5のバーガースベクトルは、結晶に付した座標系におけるバーガースベクトルを座標変換することで求めることができ、それぞれ格子定数 a を用いて次のように表される。

$$\vec{b}_3 = \boxed{\text{(セ)}} , \vec{b}_4 = \boxed{\text{(オ)}} [00] , \vec{b}_5 = \boxed{\text{(ソ)}}]$$

これらと式(2)を参考にすれば、転位3が転位4から受けるx方向の力 $f_{3(4)x}$ および転位5が転位4から受けるx方向の力 $f_{5(4)x}$ は次式のように求められる。

$$f_{3(4)x} = -\frac{\mu a^2}{36\pi(1-\nu)r_2} \tag{5}$$

$$f_{5(4)x} = \boxed{\text{(タ)}} \tag{6}$$

((タ)の解答は μ, ν, a, r_2 を用いて表すこと。)

材料基礎学 B

式(5)および式(6)をもとに、転位4にかかる部分転位間の相互作用力と面欠陥の表面張力の x 方向の釣り合いを考えることで、転位3と転位4の安定間隔 r_2 は以下のように求められる。

$$r_2 = \boxed{\text{(チ)}} \quad (7)$$

(ただし、単位面積当たりの面欠陥のエネルギーは問2と同様に γ とし、(チ)の解答は μ, ν, a, γ を用いて表すこと.)

問2の式(4)で求めた面欠陥を介した部分転位のラインベクトルが、ここで考えている不動転位のラインベクトルと等しいとしたときの部分転位間の間隔 r_1 と、不動転位中の転位3と転位4の間隔 r_2 の比(r_2/r_1)は、 $\boxed{\text{(ツ)}}$ であり、不動転位中の転位3と転位4の間隔 r_2 の方が短い。

<注釈1> 方向余弦

ベクトル \vec{A} の方向と x 軸、 y 軸、 z 軸の正の方向とのなす角をそれぞれ α_1 、 α_2 、 α_3 としたとき、 $\cos\alpha_1$ 、 $\cos\alpha_2$ 、 $\cos\alpha_3$ を \vec{A} の方向余弦という。このとき次式の関係が成り立つ。

$$\cos^2 \alpha_1 + \cos^2 \alpha_2 + \cos^2 \alpha_3 = 1$$

<注釈2> 三角関数の加法定理

$$\sin(\alpha + \beta) = \sin \alpha \cos \beta + \cos \alpha \sin \beta$$

$$\sin(\alpha - \beta) = \sin \alpha \cos \beta - \cos \alpha \sin \beta$$

$$\cos(\alpha + \beta) = \cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta$$

$$\cos(\alpha - \beta) = \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta$$

材料基礎学 B

[問題 3]

文章<A>、を読んで以下の問に答えよ。

文章<A>

熱平衡状態図は純粋に熱力学によって理解することができるが、実際の材料の組織形成においては、界面に由来したエネルギー上昇の影響や、拡散に支配される速度論の影響なども考慮する必要がある。ここでは、図1に示すような仮想的な元素 A と元素 B からなる A-B 二元合金の平衡状態図とそれに基づく組織形成について考える。

純金属 A および B の融点はそれぞれ、 °C、 °C であり、融解現象は融点でエントロピーやエンタルピーに不連続 (跳び) が生じる 次相転移である。また、純金属 A は °C で γ 相から α 相へ、純金属 B においては °C で γ 相から β 相へ 変態⁽¹⁾する。

この二元合金系では、 °C 以上では液相 (L) と高温相 (γ) の両方において、A と B が全組成で互いに溶け合う 状態となる。任意の組成のこの合金を、液相状態から平衡を保ちながら冷却していくと で凝固が開始し、 で凝固が完了する。例えば、A-40mol%B 合金を、溶融状態から平衡を保ちながら冷却した場合には、1000°C において得られる固相は、元素 B の組成が mol% の均一な組織となる。しかし、ある一定の有限の速度で冷却したとき、最終的に得られた固相の組成は場所によって不均一になる場合がある。この現象を という。

さらに、この合金系では低温側で不変系反応の一つである 反応を示す。このような相分離において、次の場合を考える。 α 相と β 相の結晶構造が異なる場合には、両相の自由エネルギー曲線は独立に定義され、両相が理想溶体の場合でも相分離現象は起こりうる。例えば、A-20mol%B 合金を 500°C で長時間保持したのち 250°C に急冷してその温度で保持したとき、 α 相の過飽和固溶体から β 相が核生成・成長過程を経て析出⁽²⁾する。 また、A-60mol%B 合金を、ゆっくり冷却した場合の反応により形成される組織は、板状の α 相と β 相が交互にならんだラメラ組織を示すことがある。この組織形成においては、 α/β 界面が形成されることにより、相変態の実質の駆動力は減少し、そのラメラ間隔 λ は過冷度 ΔT に依存する⁽³⁾ことが知られている。

問1 文章<A>の空欄 ~ を適当な語句または数字で埋めよ。

問2 下線(1)の相変態において、変態潜熱を $\Delta H (> 0)$ [$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$], 変態温度を T_1 [K], 過冷度を $\Delta T (=T_1 - T > 0)$ とする。 T_1 近傍の温度 T での変態の駆動力 $\Delta G (> 0)$ [$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$] を $\Delta H, \Delta T, T_1$ を用いて表せ。ただし、 T_1 近傍における両相のエントロピー差は温度に依存せず一定であるとする。導出過程も簡潔に記述すること。

材料基礎学 B

問3 下線(2)において、 α マトリクス中に平衡組成をもつ半径 r [m] の球状の β 相が核生成・成長するものとする。図2は、 250°C における 1 mol あたりのギブズ自由エネルギー G [$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$] (以下、単に自由エネルギーとよぶ) 曲線を組成の関数として模式的に描いたものである。 α/β 界面の界面エネルギーを σ [$\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$] とする。

- (a) 核生成の駆動力を解答欄の図中に矢印で図示せよ。共通接線や接線をひいて組成の数値を明確にすること。
- (b) 析出初期における β 相粒子の中心を原点としたときの、半径方向の組成 c -距離 x 曲線を解答欄の図中に定性的に描け。図には合金の平均組成と、界面における α 相、 β 相の組成の数値も記入せよ。ただし、 α/β 界面では局部平衡が成り立っているものとし、界面の曲率は平衡状態に影響を与えないものとする。
- (c) 実際には界面の曲率は平衡状態に影響を与える。球状粒子の場合、半径 r の大きさによって、球体内部には ΔP [Pa] だけ余分な圧力が生じる。 ΔP を σ と r を用いて表せ。導出過程も簡潔に記述すること。さらに、析出相の β 相のモル体積を V_β [$\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$] とし、自由エネルギー G が温度と圧力の関数であることを示す全微分式(熱力学関係式)に基づいて、余分な圧力による β 相 1 mol あたりの自由エネルギーの増分 ΔG [$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$] を求めよ。
- (d) 上の(c)で考えた界面に起因する自由エネルギー変化に基づいて、析出後期においてオストワルド成長(小さい粒子は消失し、大きい粒子がさらに成長する現象)が起こる理由を説明せよ。

問4 250°C において下線(3)のラメラ組織が形成する場合を考える。

- (a) α 相および β 相が同時に核生成する組成範囲を解答欄の図に示せ。共通接線をひいて組成の数値を明確にすること。
- (b) 問2 でみたように、一般に相変態の駆動力はおおよそ過冷度 ΔT (> 0) に比例する。 γ 相から α 相と β 相の複相組織が生成する駆動力の大きさを $a\Delta T$ [$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$] (a は正の定数) と表す。 α 相と β 相の2層の厚さの合計(ラメラ間隔)を λ [m]、 α/β 界面の界面エネルギーを σ [$\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$]、2相組織のモル体積を $V_{\alpha+\beta}$ [$\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$] とすると、相変態が進行するには、 $V_{\alpha+\beta}$ 、 a 、 ΔT 、 σ 、 λ の間にある条件を満足する必要がある。その条件を不等式で表せ。導出過程も簡潔に記述すること。

材料基礎学 B

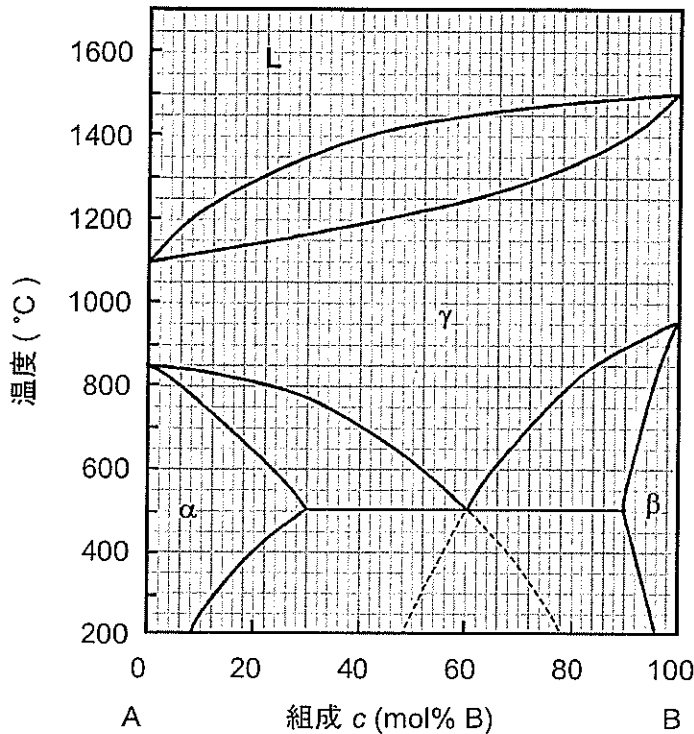


図1. A-B 二元合金状態図

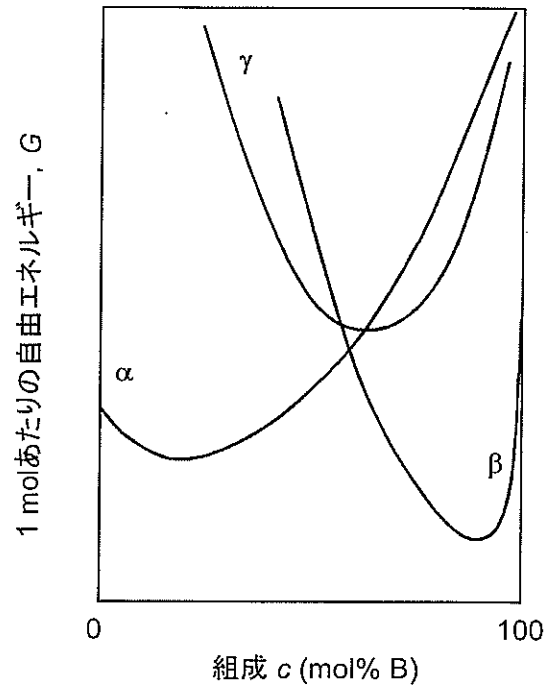


図2. 自由エネルギー - 組成曲線

<文章B>

高分子は、多数の原子が連結した巨大分子である。その多くは、同一の構造単位が共有結合により連結した繰り返し構造をもつ。この構造単位の基となる原料分子は とよばれる。 が多数連結した分子が高分子であり、多量体（ポリマー）とよばれることもある。その際、連結した の個数を とよぶ。

高分子固体では、多数の高分子が集合し微細組織を形作っている。図3は、タイプAおよびタイプBの2種類の熱可塑性樹脂の高分子配列構造を、模式的に表したものである。1本の曲線は、高分子1分子を表している。タイプAの樹脂は、①と②で示す分子配列様式の異なる2つの領域をもつ。一方、タイプBの樹脂は、ほぼすべて領域②から構成されている。領域①では、高分子同士が規則正しく配列しており、 領域とよばれ、X線回折などによってその存在を確認することができる。領域①では高分子同士が分子間相互作用によって強く結びついているため、それぞれの高分子の動きが束縛されている。領域②では、高分子の並びは乱雑であり、分子間相互作用による分子同士の結びつきも弱い。領域①と対比して、領域②は 領域とよばれる。

材料基礎学 B

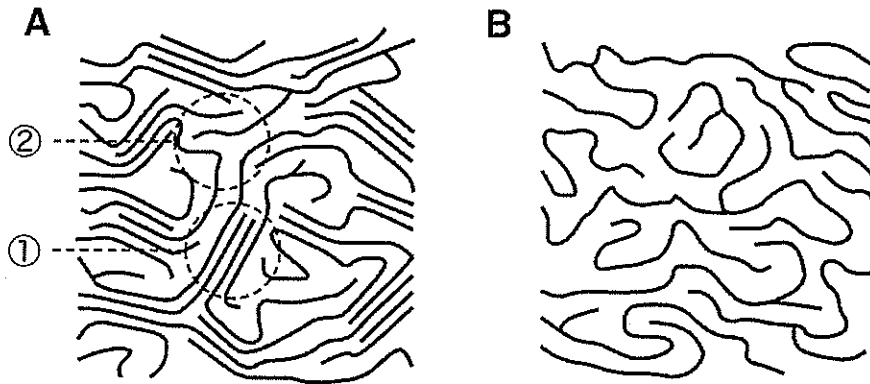


図3. 熱可塑性樹脂の分子配列構造

タイプ **A** の樹脂の比容（単位質量あたりの体積）を測定したところ、温度が上昇するにしたがい比容は一定の割合で増加し、転移温度 X を越えるとその増加率が大きくなった。さらに温度が上昇すると、転移温度 Y で比容は不連続に増加し、樹脂は流動性を示すようになった。この第2の転移温度 Y は、樹脂の融点と定義される。

問5 - に当てはまる語句を、解答欄に記入せよ。

問6 転移温度 X の名称を、解答欄に記入せよ。

問7 転移温度 X を越えると、タイプ **A** の樹脂は、粘弾性に由来する機械的特性を明瞭に示すようになる。具体的には、柔らかくなり弾力性が増すが、全体が流動化し強度が大きく低下することは無い。その理由を解答欄に記入せよ。ただし、ここで考えている温度は、転移温度 Y から十分に離れているとする。

問8 タイプ **B** に分類される熱可塑性樹脂 **O** と **P** には、転移温度 X は存在したが、明瞭な転移温度 Y は見られなかった。樹脂 **O** と **P** の転移温度 X は、それぞれ 200 K, 400 K であった。室温でゴム状になる樹脂はどちらか、その理由とともに解答欄に記入せよ。

問9 可視光をほとんど吸収しない高分子から構成されているにもかかわらず、樹脂 **R** は室温では白濁しており不透明であった。この樹脂 **R** は、**A**, **B** どちらのタイプの樹脂であるか、樹脂 **R** が不透明である理由とともに解答欄に記入せよ。

平成 22 年度
大学院工学研究科修士課程
材料工学専攻入学資格試験 問題冊子

工業数学

100 点満点

9 : 30 ~ 11 : 00

注 意 事 項

1. 問題冊子および解答冊子は係員の指示があるまで開かないこと。
2. 問題冊子は表紙と白紙 1 枚のほかに 5 ページである。
3. 問題冊子は持ち帰ってもよいが、解答冊子は持ち帰ってはならない。
4. 試験開始の合図の後、まず落丁・乱丁のないことをチェックすること。

工業数学

[問題 1]

実数の n 次元線形空間内の無限小 1 次変換を表す次の形の行列を考える.

$$A = E + \varepsilon U = \begin{pmatrix} 1 + \varepsilon u_{11} & \varepsilon u_{12} & \dots & \varepsilon u_{1n} \\ \varepsilon u_{21} & 1 + \varepsilon u_{22} & \dots & \varepsilon u_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varepsilon u_{n1} & \varepsilon u_{n2} & \dots & 1 + \varepsilon u_{nn} \end{pmatrix} \quad U = [u_{ij}]$$

ただし ε は 0 でない微小量であり, ε^n ($n \geq 2$) は 0 であるとする. また E は単位行列である.

このとき上式で定義される行列 A について以下の設問に答えよ.

問 1 行列 A の行列式 $|A|$ を求めよ.

問 2 行列 A の逆行列 A^{-1} を求めよ.

問 3 行列 A が直交行列となるための条件を示せ.

問 4 行列 A は無限小 1 次変換の直交行列 B と対称行列 C の積として $A = BC$ と表される. このとき B, C を A と E を用いて表せ.

工業数学

[問題 2]

次のような関数 $w(x)$ および三角関数 $f(x) = A \cos(Kx + \tau)$ を考える.

$$w(x) = \begin{cases} 1 & |x| < \pi/K \\ 0 & |x| > \pi/K \end{cases}$$

ただし A, K は正の実定数, τ は実定数とする.

このとき以下の設問に答えよ.

問1 $w(x)$ のフーリエ変換を $W(k)$, $g(x) = w(x)f(x)$ のフーリエ変換を $G(k)$ とするとき, $W(k-K)$ と $W(k+K)$ を用いて $G(k)$ を表せ.

問2 $G(k)$ を求めよ.

問3 次の関数 $R_1(k)$ と $R_2(k)$ を用いて $G(k)$ を表せ.

$$R_1(k) = \int_{-\pi/K}^{\pi/K} f(x) \cos(kx) dx$$
$$R_2(k) = \int_{-\pi/K}^{\pi/K} f(x) \sin(kx) dx$$

また $R_1(K/2)$ と $R_2(K/2)$ を用いて A と τ を表せ.

工業数学

[問題 3]

長さ L の1次元試料における気体の拡散を考え、試料内の気体の濃度を $c(x, t)$ ($0 < x < L$) とする。今、 $c(x, t)$ は次の拡散方程式および初期条件・境界条件に従うものとする。

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

$$\text{初期条件} \quad c(x, 0) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L/2 \\ c_0 & L/2 < x < L \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \text{境界条件} \quad c(0, t) &= 0 & (t > 0) \\ c(L/2, t) &= f(t) & (t > 0) \\ c(L, t) &= c_0 \theta(t) & (t > 0) \end{aligned}$$

ただし D は拡散係数、 c_0 は正の実定数である。また $f(t)$ は $t > 0$ で定義された時間の関数であり、 $\theta(t)$ は単位ステップ関数である。

このとき以下の設問に答えよ。

問1 $c(x, t)$ の t に関するラプラス変換を $U(x, s)$ とするとき、 $0 < x < L/2$ および $L/2 < x < L$ の各区間において $U(x, s)$ が満たす方程式を求めよ。

問2 $f(t)$ のラプラス変換を $F(s)$ とするとき、 $U(x, s)$ を求めよ。

問3 $f(t) = (c_0/2)\theta(t)$ であるとき、 $U(x, s)$ を逆変換して $c(x, t)$ を求めよ。
なお、必要に応じて次の級数展開を利用しても良い。

$$\frac{1}{1 - e^{-\lambda}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\lambda} \quad \lambda > 0$$

工業数学

参考資料

1. 行列

n 行 n 列の正方行列を $A = [a_{ij}]$, 単位行列を E とするとき, A に関する記法や定義は以下の通りである.

A の逆行列 A^{-1}	$A^{-1}A = E$
A の転置行列 tA	${}^tA = [a_{ji}]$
A が対称行列	${}^tA = A$
A が直交行列	${}^tA = A^{-1}$

2. フーリエ変換

$|f(x)|$ が積分可能である関数 $f(x)$ のフーリエ変換 $F(k)$ とその逆変換は, 以下のように定義される.

$$F(k) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{-ikx} dx$$
$$f(x) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k)e^{ikx} dk$$

3. ラプラス変換

$t < 0$ で $f(t) = 0$ であるような実関数 $f(t)$ のラプラス変換は, 下のように定義される.

$$F(s) \equiv \int_0^{\infty} f(t)e^{-st} dt$$

いくつかの関数のラプラス変換は次頁の変換表に示されている.

工業数学

ラプラス変換表 ($F(s)$ が左の列, $f(t)$ が右の列に記されていることに注意)

$F(s)$	$f(t)$
1	$\delta(t)$
$\frac{1}{s}$	1 (= $\theta(t)$: 単位ステップ関数)
$\frac{1}{s^n}$	$\frac{1}{(n-1)!} t^{n-1}$
$\frac{1}{(s+\alpha)^n}$	$\frac{1}{(n-1)!} t^{n-1} e^{-\alpha t}$
$\frac{\omega}{s^2 + \omega^2}$	$\sin \omega t$
$\frac{s}{s^2 + \omega^2}$	$\cos \omega t$
$e^{-(\sqrt{s/D})x}$	$\frac{x}{2\sqrt{\pi Dt^3}} e^{-x^2/4Dt}$
$\frac{e^{-(\sqrt{s/D})x}}{\sqrt{s/D}}$	$\sqrt{\frac{D}{\pi t}} e^{-x^2/4Dt}$
$\frac{e^{-(\sqrt{s/D})x}}{s}$	$\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$
$\frac{e^{-(\sqrt{s/D})x}}{s^2}$	$-x\sqrt{\frac{t}{\pi D}} e^{-x^2/4Dt} + \left(t + \frac{x^2}{2D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$