

平成 28 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 9 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。

白紙

## 材料基礎学 A

## [問題 1]

組織形成に関する次の文章を読んで、問1～問10に答えよ。なお、解答用紙に図面が与えられている場合、それらを利用して解答すること。以下、組成はすべてモル分率である。

《文章 A》 合金の凝固・変態（以下、変態）では、生成相の組成は母相の組成と違うため、母相と生成相の界面では変態の進行とともに原子の分配が起こる。原子の拡散が十分な場合、合金全体が平衡もしくは平衡に近い状態で、平衡状態図にしたがって組織が形成される。一方、原子の拡散が不十分な場合、母相と生成相の界面での平衡（以下、局所平衡）が成立しても合金全体の平衡は成立せず、母相と生成相の界面での原子の分配が組織形成に影響する。この場合でも、平衡状態図とその背景にある熱力学は、組織形成の理解に役立つ。ここでは、二元系および三元系合金の組織形成について考える。

図1は液相（L）から $\alpha$ 相と $\beta$ 相が生成する共晶反応を有したA-B二元系合金の平衡状態図（状態図1）であり、図2は液相（L）と $\alpha$ 相から $\beta$ 相が生成する包晶反応を有したA-B二元系合金の平衡状態図（状態図2）である。これらの合金の変態過程および変態後の組織を観察したところ、以下の結果が得られた。

状態図1において組成 $x_1$ の合金を均一な液相（L）から温度 $T_1$ まで冷却すると複数の核から $\alpha$ 相のデンドライト成長が起こった（図3）。(7) 原子の拡散が十分に起こる場合には温度 $T_2$ では均一な $\alpha$ 相のみから成る多結晶組織（図4）が形成され、原子の拡散が不十分な場合には図4の粒界に相当する領域に $\beta$ 相が存在する多結晶組織（図5）が形成された。図5の $\alpha$ 相の結晶粒中の破線はその結晶粒内での等組成線であり、結晶粒中心から周辺に向かい元

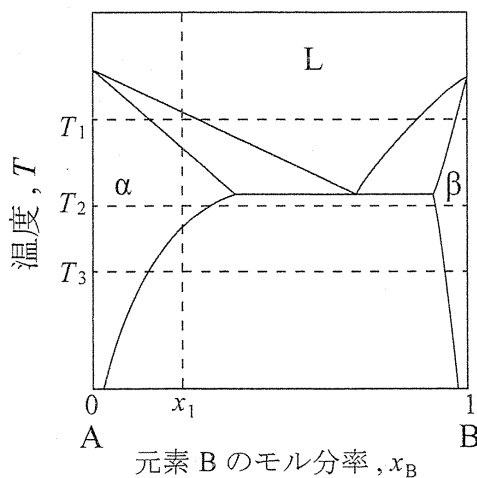


図1 A-B 二元系平衡状態図1

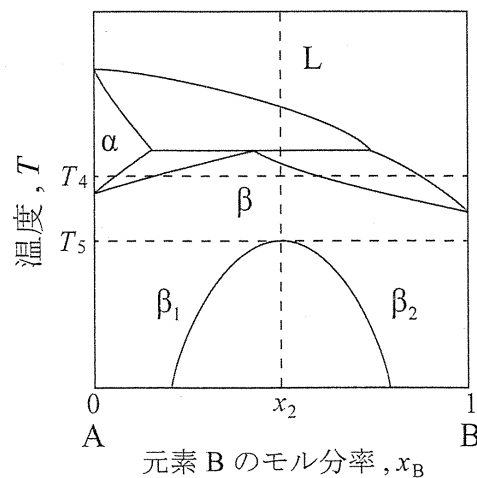


図2 A-B 二元系平衡状態図2

材料基礎学 A

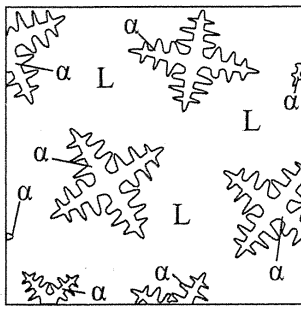


図3 温度  $T_1$  の組織の模式図

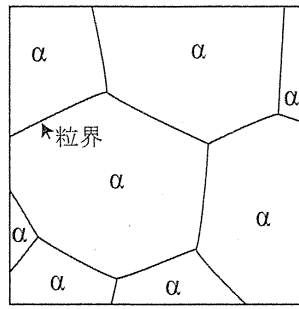


図4 温度  $T_2$  の組織の模式図

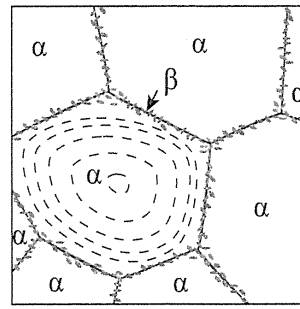


図5 温度  $T_2$  の組織の模式図 (β相: 灰色) 破線は等組成線

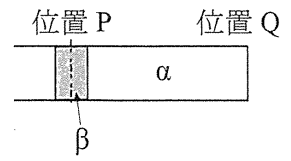


図6 温度  $T_3$  におけるβ相の成長の模式図

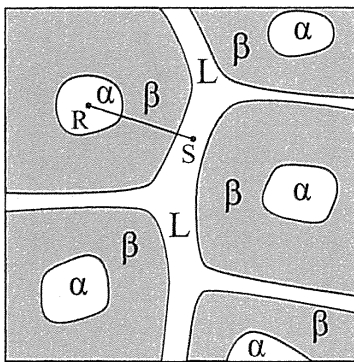


図7 温度  $T_4$  の組織の模式図

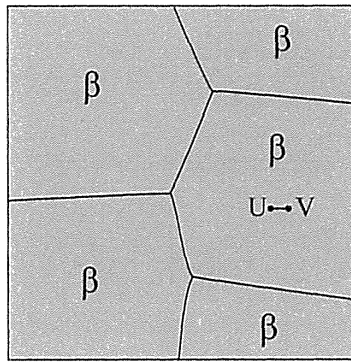


図8 温度  $T_4$  で十分に保持された組織の模式図

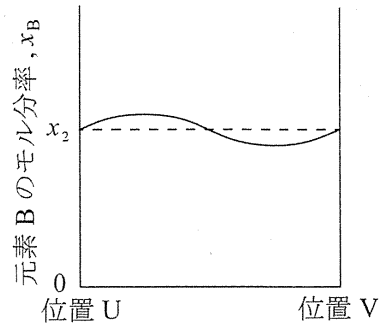


図9 β相中の組成のゆらぎの模式図

素Bのモル分率が増加していた。

図4の均一なα相を温度  $T_2$  から冷却すると、温度  $T_3$  においてα相中にβ相の析出が開始した。図6は、温度  $T_3$  で保持したときに観察された位置Pに核生成したβ相の成長を1次元の成長として考えた模式図である。

状態図2において組成  $x_2$  の合金を均一な液相(L)から冷却すると、原子の拡散が不十分なため温度  $T_4$  においてもα相とβ相と液相の3相が存在する組織(図7)が観察された。この組織を温度  $T_4$  でさらに保持すると、やがて均一なβ相のみからなる多結晶組織(図8)に変化した。

次に、図8の均一なβ相を温度  $T_4$  から冷却すると、温度  $T_3$  より低い温度では、β相中に(1)わずかな組成のゆらぎ(図9)が生じはじめ、最終的にβ相はβ<sub>1</sub>相とβ<sub>2</sub>相に相分離した。

問1 状態図1について温度  $T_1$  における液相、α相、β相のギブズの自由エネルギー曲線をそれぞれ模式的に描け。必要に応じ、解答用紙の状態図上に組成を定義し、示すこと。

## 材料基礎学 A

- 問2 図6のように温度  $T_3$  における  $\beta$  相の成長を一次元の成長と考える。位置 P を中心に  $\beta$  相は対称に成長し、他の  $\beta$  相の影響はないとする。位置 P と位置 Q 間の元素 B のモル分率、元素 A と元素 B の化学ポテンシャルの分布をそれぞれ模式的に描け。元素 B のモル分率では溶質の保存を考慮した分布を描くこと。必要に応じ、解答用紙の状態図上に組成を定義し、示すこと。なお、 $\beta$  相中の元素 B のモル分率、位置 P における元素 A と元素 B の化学ポテンシャルは解答用紙にそれぞれ与えられている。ただし、界面エネルギーの影響は無視でき、局所平衡は成立しているとせよ。また、位置 P と位置 Q 間の距離は、 $\beta$  相の析出開始時点からの元素 A と元素 B の拡散距離に比べて十分に長いとせよ。
- 問3 図7の位置 R と位置 S 間の組織を、解答用紙に示すように1次元の組織形成に単純化し、 $\alpha$  相、つづいて  $\beta$  相が位置 R から位置 S の方向に成長しているとする。位置 R と位置 S 間の元素 B のモル分率、元素 A と元素 B の化学ポテンシャルの分布をそれぞれ模式的に描け。位置 R における元素 A と元素 B の化学ポテンシャルは解答用紙にそれぞれ与えられている。必要に応じ、解答用紙の状態図上に組成を定義し、示すこと。ただし、界面エネルギーの影響は無視でき、局所平衡が成立しているとせよ。
- 問4 温度  $T_3$  より低い温度において、図8の位置 U と位置 V 間に図9に示す組成のゆらぎが生じたとき、位置 U と位置 V 間における元素 A と元素 B の化学ポテンシャルの分布をそれぞれ模式的に描け。なお、位置 U における元素 A と元素 B の化学ポテンシャルは解答用紙にそれぞれ与えられている。

《文章 B》 《文章 A》の下線部 (ア) の組織形成について考える。図10は状態図1の亜共晶領域を拡大した図である。液相と  $\alpha$  相の密度は等しく、組成に依存しない。液相線と固相線はともに直線であり、液相と  $\alpha$  相の局所平衡が成立している界面では、液相の組成  $x_L$  と  $\alpha$  相の組成  $x_\alpha$  には、分配係数  $k$  ( $0 < k < 1$ ) を用いて、式(1)の関係が成立する。

$$k = x_\alpha / x_L \quad (1)$$

- 問5 液相中および  $\alpha$  相中の拡散は十分に起こり、合金全体で平衡が成立する条件における  $\alpha$  相の成長にともなう液相の組成変化を考える。図11は平均組成  $x_1$  の合金で  $\alpha$  相が1次元的に体積分率  $f$  まで成長したときの組成分布 (実線) とさらに体積分率  $df$  だけ成長したときの組成分布 (破線) である。液相の組成  $x_L$  と体積分率  $f$  の関係を求めよ。

材料基礎学 A

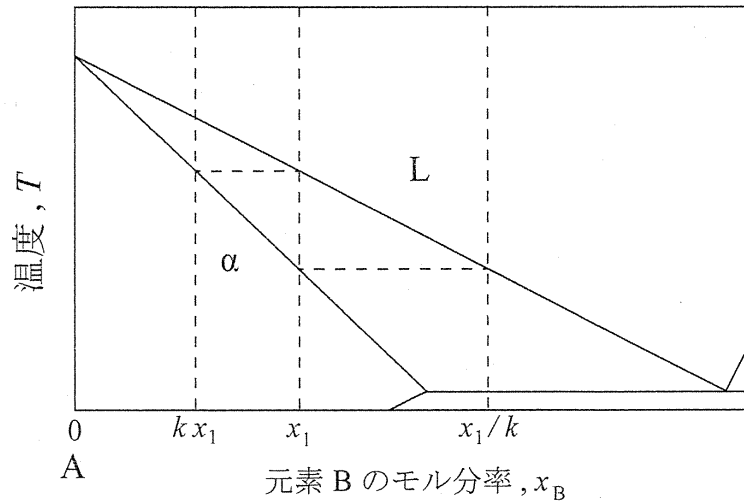


図 10 状態図 1 の亜共晶領域の拡大図

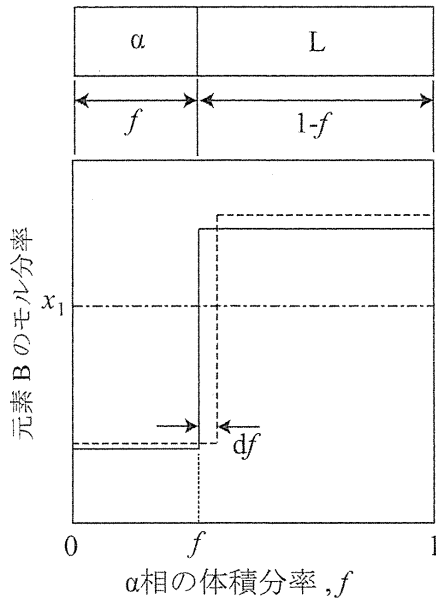


図 11 組成分布の模式図 1

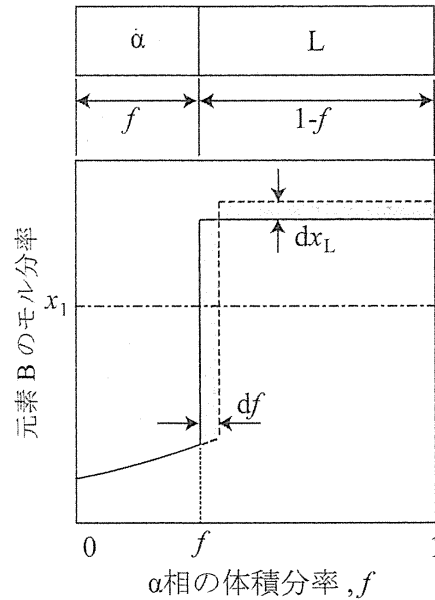


図 12 組成分布の模式図 2

問 6 液相中の拡散は十分に起こるが、 $\alpha$  相中の拡散は起こらない条件における  $\alpha$  相の成長にともなう液相の組成変化を考える。固相の組成は生成したときから変化しないため、固相内の組成は均一ではない。図 12 に示すように、体積分率  $f$  の  $\alpha$  相がさらに微小な体積分率  $df$  だけ成長すると、液相の組成が微小量  $dx_L$  だけ増加するとする。微小な体積分率  $df$  だけ成長したときの溶質の保存を考え、2 次以上の微小量を無視すると常微分方程式が得られる。常微分方程式を導出し、初期条件を考慮して液相の組成  $x_L$  と体積分率  $f$  の関係を求めよ。ただし、局所平衡は成立しているとせよ。

材料基礎学 A

問7 問5と問6でそれぞれ求めた液相の組成  $x_L$  と体積分率  $f$  の関係を比較し、図5の組織が形成される理由を説明せよ。図を用いてもよい。

問8 図13に平衡状態図を示す A-B-C 三元系合金において、固相の成長にともなう液相の組成変化を考える。問7を参考にして、液相中の拡散は十分に起こり、固相中の拡散は起こらない条件で、図13に示した組成 Z の均一な液相 (L) を冷却したときの液相の組成の軌跡を解答用紙の断面図上に描き、その根拠を述べよ。なお、図13にはおのこの二元系合金の平衡状態図、液相- $\alpha$ 相- $\beta$ 相、液相- $\beta$ 相- $\gamma$ 相、液相- $\gamma$ 相- $\alpha$ 相の3相三角形の頂点の軌跡がそれぞれ示されており、融点には  $T_m^{(B)} > T_m^{(A)} > T_m^{(C)}$ 、共晶温度には  $T_{e1} > T_{e2} > T_{e3} > T_{E1}$  ( $T_{E1}$ は三元共晶温度) の関係がある。図14は A-B-C 三元系合金の等温断面図である。ただし、 $\alpha$ 相、 $\beta$ 相、 $\gamma$ 相の核生成は容易に起こり、局所平衡が成立しているとせよ。

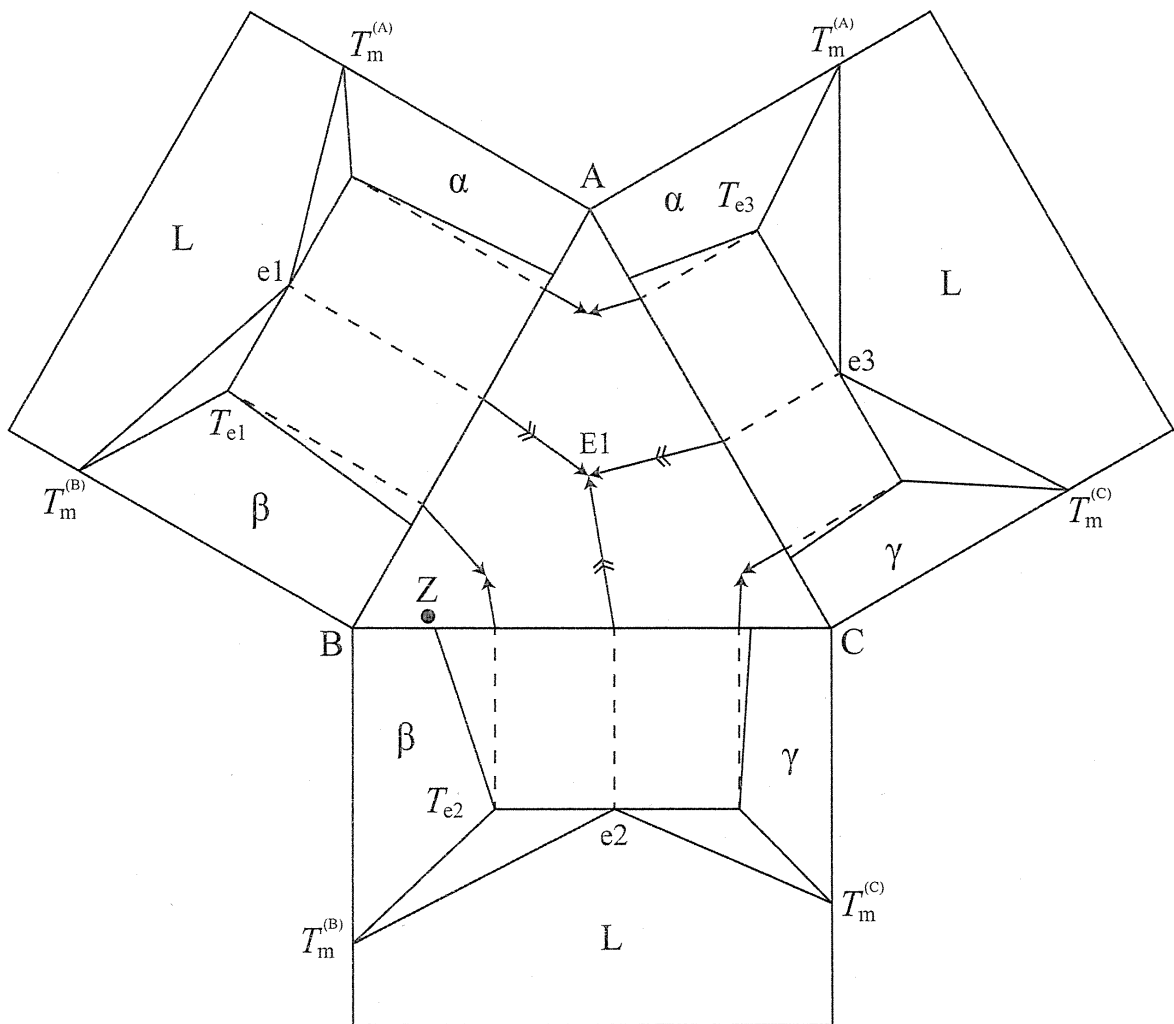


図13 A-B-C 三元系合金の平衡状態図

材料基礎学 A

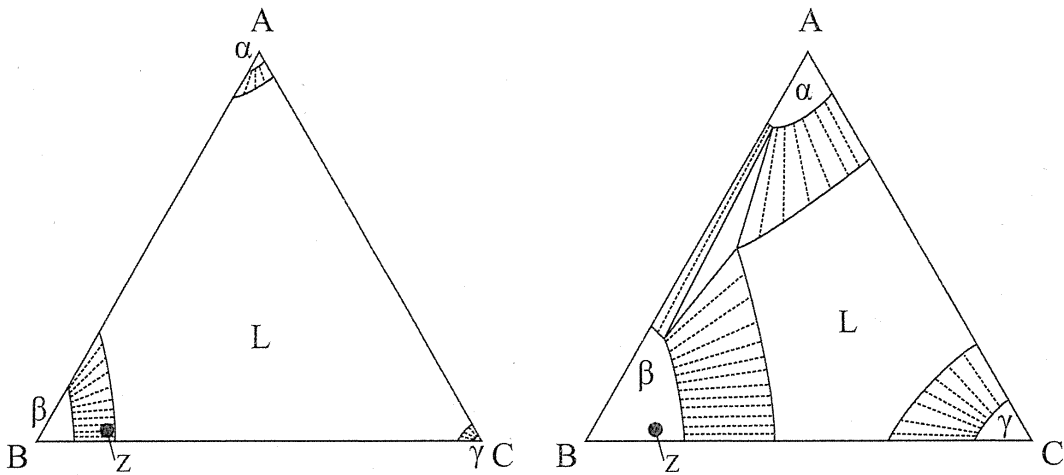


図14 図13のA-B-C三元系合金の等温断面図. 左図の温度 $T$ は $T_m^{(C)} > T > T_{e1}$ であり, 右図の温度 $T$ は $T_{e1} > T > T_{e2}$ である. 破線は2相間の相平衡を示すタイラインであり, 黒丸は組成 $Z$ の位置である.

《文章C》 《文章A》の下線部(イ)の組成のゆらぎが変態を起こす現象を考える.  $\beta$ 相が同じ結晶構造を有した2相に分離する変態がある状態図2において, 1モルあたりの $\beta$ 相のギブズの自由エネルギー $G$ は, 元素Bのモル分率 $x_B$ の関数として, 式(2)で表される.

$$G = [(1-x_B)G_A^0 + x_B G_B^0] + (1-x_B)x_B\Omega + RT[(1-x_B)\ln(1-x_B) + x_B \ln x_B] \quad (2)$$

$R$ ,  $T$ はそれぞれ気体定数, 絶対温度である.  $G_A^0$ ,  $G_B^0$ はそれぞれ純物質A, 純物質Bの1モルあたりのギブズの自由エネルギー,  $\Omega$ は相互作用パラメータと呼ばれる係数である.

エンタルピーが最近接原子間の結合のみで表され, その結合エネルギーは原子対の種類にのみ依存すると仮定すると, 相互作用パラメータ $\Omega$ は式(3)で与えられる.

$$\Omega = \omega [e_{AB} - (e_{AA} + e_{BB})/2] \quad (3)$$

$e_{AB}$ ,  $e_{AA}$ ,  $e_{BB}$ は, それぞれ絶対温度0Kにおける原子A-原子B間, 原子A-原子A間, 原子B-原子B間の1対あたりの結合エネルギーである.  $\omega$ は最近接原子数や原子数に関わる正の定数である.

問9 状態図2に示すように温度 $T_3$ より低い温度で $\beta$ 相が相分離を起こすための相互作用パラメータ $\Omega$ の条件を求めよ. また, その根拠も示せ.

問10 問9で求めた条件と式(3)より, 相分離を起こす条件を結合エネルギーの観点から述べよ.



## 材料基礎学 A

## [問題 2]

簡単なモデル磁性体を用いて、磁場の増大（昇磁と呼ぶ）と減少（減磁と呼ぶ）を等温過程あるいは断熱過程で実行しながら磁気冷凍する仮想的な熱機関を考える。次の文章を読んで下の問に答えよ。ボルツマン定数を  $k$  とし、磁場強度は  $H$ 、エンタルピーは  $A$  と表す。

この磁気冷凍機に用いるモデル磁性体（図1）は、次のような性質をもつ。

- $N$  個の原子からなる磁性体の各々の原子は、大きさ  $m$  の磁気モーメント（以後、「スピン」と呼ぶ）を有しており、どのような磁化状態でも磁性体の体積は一定である。
- 各々のスピンは磁場方向とその反対方向の2通りに向くことができ、磁場  $H$  と同じ方向にスピンの向いている（平行スピンと呼ぶ）ときに  $-mH$ 、磁場  $H$  と反対方向に向いている（反平行スピンと呼ぶ）ときに  $+mH$  のエネルギー状態をとる。
- この系では、スピン間には相互作用はなく、故に、磁場と温度によらず系の内部エネルギー  $E$  は常に一定である。ここでは簡便のため  $E=0$  とする。
- 磁性体の温度  $T$  は、このスピン系の熱力学量によってのみ決まるものとし、格子系のエネルギーやエントロピーなどの影響は考えない。

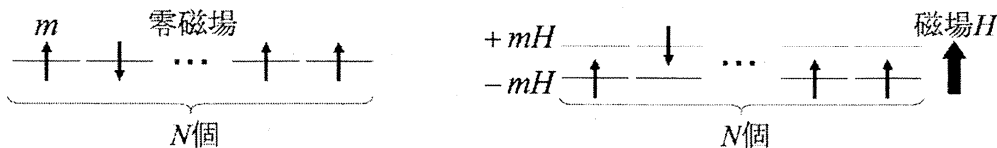


図1 モデル磁性体

まず  $dE = TdS + HdM$  から出発して、この磁性体に関する熱力学関係式を構築する。ここで  $S$  は系のエントロピー、 $M$  は系全体の磁化である。エンタルピー  $A$  は、 $S$  と磁場  $H$  の関数で表すと、その全微分は  $dA = TdS - MdH$  となり、常に  $E=0$  であるので、 $A =$   と表される。一般に、磁場  $H$  一定の条件では、熱平衡温度は  $1/T =$   と偏微分形式で表されるが、特にこのモデルの場合、 $E=0$  で一定であるので  $(\partial S / \partial M)_E =$   となる。同様に、ヘルムホルツ自由エネルギーを  $F =$   と定義することにより、その全微分は  $dF = -SdT + HdM$  となる。また同様にギブズ自由エネルギーを  $G =$   と定義することにより、その全微分は  $dG = -SdT - MdH$  となる。

## 材料基礎学 A

次に、このモデル磁性体の磁場  $H$  の下での熱平衡状態における熱力学量を、ミクロカノニカル法の考え方で求める。平行スピンの数を  $n$  と表すと、磁化  $M$  は平行スピン数と反平行スピン数の差で与えられるので、 $m$ ,  $N$ ,  $n$  を用いて  $M =$   と表される。よって、平行スピン数は  $n =$   となり、エントロピー  $S$  は  $M$  の関数として  $S(M) =$

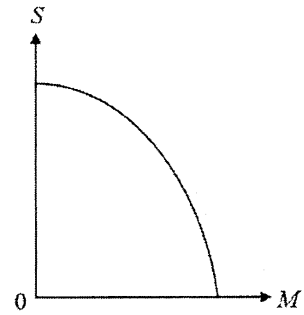
図2  $S$  と  $M$  の関係

図2のようになる。ここでは、平衡温度が負になる  $M < 0$  の領域は考えない。磁場  $H$  での熱平衡温度は  $(\partial S / \partial M)_E =$   の関係式から求まり、 $M$  は  $T$  と  $H$  の関数として  $M =$   と求められる。これにより、熱平衡状態での  $S$  は同様に  $T$  と  $H$  の関数として  $S =$   と求まるので、 $F$  および  $G$  も  $T$  と  $H$  の関数として求まる。以上で、熱平衡状態における一連の熱力学量が求められた。ちなみに、ここで定義されている  $G$  は、 $\beta = (kT)^{-1}$  として、カノニカル法による分配関数  $Z = (e^{\beta mH} + e^{-\beta mH})^N$  から直ちに求めることができる。また  $H = 0$  の状態の場合には  $(\partial S / \partial M)_E = 0$  が常に成立し、図2の  $S(M)$  曲線とも整合するので、 $H = 0$  の状態は任意の温度における平衡状態となる。

次に、このモデル磁性体を用いたカルノーサイクルを考えるため、等温昇磁・減磁過程や断熱昇磁・減磁過程などの各過程を熱力学的に考察する。まずは温度  $T$  の熱浴に接触させて等温昇磁過程を施すことを考える。この過程によって磁化が零の状態から  $M$  まで変化するときの、外部磁場が系にした仕事  $W$  は  $W = \int_0^M H(M') dM'$  より求めることができるが、上で求めた  $M =$   の結果から、 $H$  を  $M$  の関数として陽に表現することが困難である。そこで磁場が零から  $H$  になるまでの  $G$  の変化  $\Delta G$  を  $T$  および  $H$  の関数として先に計算してから  $W$  を求める。熱力学関係式  $dG = -SdT - MdH$  を用いると、 $\Delta G =$   となり、 $\Delta G$  の符号は常に (あ){ 正 / 負 } である。また、 $\Delta G$ ,  $\Delta F$  および  $W$  の関係に基づき、最終的に仕事  $W$  は  $T$  および  $H$  の関数として  $W =$   と求めることができる。系のエントロピー  $S$  が磁化  $M$  の増大に伴い必ず減少していることに着目すれば、等温昇磁過程においては (い){ 吸熱 / 放熱 } が起こり、等温減磁過程においてはその逆のことが起こる。よって、この昇磁過程における  $W$  の符号は (う){ 正 / 負 } となる。次に、熱浴から遮断し、断熱条件下において昇磁・減磁過程を考える。この過程で  $S$  を一定に保つためには  が一

材料基礎学 A

定となる必要がある。よって、断熱昇磁過程においては磁性体の温度は (え) { 上昇 / 低下 } し、断熱減磁過程ではその逆のことが起こる。

各過程における熱力学的考察に基づくと、図3に示すように  $T_l$  の低温熱源から熱  $Q_l (> 0)$  を吸収し、 $T_h$  の高温熱源に熱  $Q_h (> 0)$  を放出するカルノー機関を実現するためには、サイクルを (お) { (1)→(2)→(3)→(4)→(1) / (1)→(4)→(3)→(2)→(1) } の順にまわす必要がある。こ

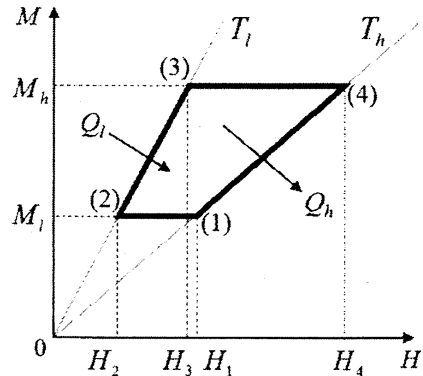


図3 モデル磁性体を使ったサイクル

こで計算を簡単にするため  $mH \ll kT$  の条件を考える。  $M = \text{ケ}$  は、この条件で1次項までテイラー展開すると  $M \approx \text{セ}$  と近似でき、温度一定の条件では  $M$  は  $H$  の比例関数となる。また、  $S = \text{コ}$  については2次項までテイラー展開して計算すると  $S \approx Nk \ln 2 - \text{ソ}$  となる。よって、このサイクルが一周する間に外部磁場がした仕事  $W_{\text{cycle}}$  は、  $k, N, m, T_h, T_l, H_2, H_3$  を用いて表すと  $W_{\text{cycle}} = \text{タ}$  となる。一般に、磁気モーメント  $m$  は  $m = g\mu_B J$  ( $g$  は  $g$  因子、 $\mu_B$  はボーア磁子数、 $J$  は全角運動量子数) と表され、冷凍能を上げるためには  $m$  が大きいこと、すなわち  $J$  の大きい磁性体が要求される。

問1 空欄 **ア** ~ **タ** を、適切な語句や式で埋めよ。エントロピー計算において階乗の項が含まれる際はスターリングの近似式  $\ln X! \approx X \ln X - X$  を用いよ。また計算にあたり末尾に示した数学公式や近似式を利用してもよい。

問2 中括弧(あ) ~ (お)において、正しいものを選択し、解答欄中の語句などを丸で囲め。

問3 下線部について、一般には、現実の磁性体の断熱昇磁・減磁過程では、格子系(格子振動)のエントロピーを考慮する必要がある。磁気冷凍の効率を上げるために、現実の磁性体に要求される物性の一つに、デバイ温度が高いことがあげられる。格子振動のエントロピーがデバイ温度付近で  $4R$  から  $5R$  程度 ( $R$  は気体定数) になることを踏まえ、高いデバイ温度であることが必要な理由を簡潔に述べよ。

【数学公式・近似式】

$$\int \tanh ax \, dx = \frac{1}{a} \ln \frac{e^{ax} + e^{-ax}}{2} + C \quad (C: \text{積分定数}), \quad e^x \approx 1 + x + \frac{1}{2}x^2 \quad (x \ll 1)$$

平成 28 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 11 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。

白紙

材料基礎学 B

[問題 1]

X 線回折における回折条件を逆格子空間で考え、ブラッグの式を導く。以下の文章を読んで、問 1～問 4 に答えよ。

X 線は電子雲によって散乱される。結晶は電子密度の周期性を有しているので、結晶により散乱される X 線強度は、結晶の周期性が反映されたものとなる。基本並進ベクトル  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  をもつ結晶格子に対して、結晶の周期性は並進ベクトル  $\vec{T} = u\vec{a}_1 + v\vec{a}_2 + w\vec{a}_3$  ( $u, v, w$  は任意の整数) で表される。図 1 に示すように、原点  $O$  を結晶内にとり、ベクトル  $\vec{r}$  で表される結晶内の位置  $P$  の電子密度を  $n(\vec{r})$  とすると、 $n(\vec{r})$  は並進操作に対して不変であり、

$$n(\vec{r} + \vec{T}) = n(\vec{r}) \quad (1)$$

となる。ここで、フーリエ係数  $n_{\vec{G}}$  を用いて、 $n(\vec{r})$  をフーリエ級数

$$n(\vec{r}) = \sum_{\{\vec{G}\}} n_{\vec{G}} \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}) \quad (2)$$

で表すとすると、式 (1) が成立するためには、 $\vec{G}$  と  $\vec{T}$  の間に以下の条件

$$\exp(i\vec{G} \cdot \vec{T}) = \boxed{\text{ア}} \quad (3)$$

が常に成立する必要がある。ここで、(あ) 逆格子の基本並進ベクトルを  $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$  として逆格子ベクトルを  $\vec{g}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$  ( $h, k, l$  は任意の整数) と表すと、 $\vec{G} = \vec{g}_{hkl}$  のとき式 (3) は常に成立する。よって、式 (2) は逆格子ベクトル  $\vec{g}_{hkl}$  を用いて式 (4) で表される。

$$n(\vec{r}) = \sum_{\{\vec{g}_{hkl}\}} n_{\vec{g}_{hkl}} \exp(i\vec{g}_{hkl} \cdot \vec{r}) \quad (4)$$

ここで、総和はすべての逆格子点についてとられる。

次に、図 1 に示すように、波数ベクトル  $\vec{K}_0$  ( $|\vec{K}_0| = K = 2\pi/\lambda$ ,  $\lambda$  は X 線の波長) の X 線が無  
 限遠から微小単結晶内部に入射し、原点  $O$  および点  $P$  にある体積素片により弾性散乱され、散乱 X 線  
 をある任意の  $\vec{K}$  方向の無限遠方で観

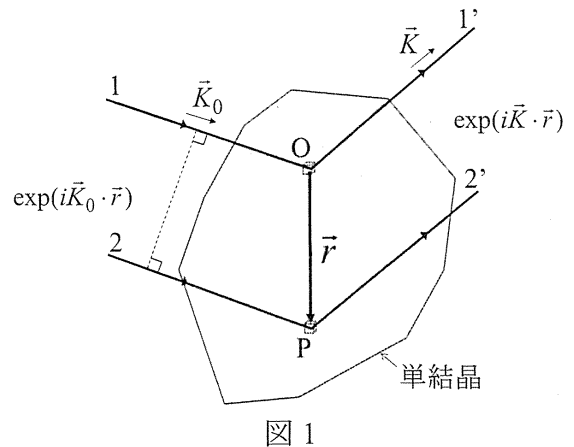


図 1

## 材料基礎学 B

測することを考える。ここで、 $\vec{k}$  は散乱 X 線の波数ベクトルであり、 $|\vec{k}| = K = 2\pi/\lambda$  である。図 1 の点線は X 線の同位相面を示している。 $\vec{K}_0$  の単位ベクトルが  $\vec{K}_0/K$  であることを考慮すると、経路 1+1' と 2+2' を通る X 線の経路差は  $\vec{K}_0, \vec{K}, \vec{r}, K$  を用いて  と表せる。したがって、経路 2+2' を通る X 線は、経路 1+1' を通る X 線に比べて  だけ位相がずれる。体積素片からの散乱波の振幅は、その位置  $\vec{r}$  における電子密度  $n(\vec{r})$  に比例する。よって、 $\vec{k}$  方向への散乱波の合成振幅  $F$  は、散乱ベクトルを  $\Delta\vec{K} = \vec{K} - \vec{K}_0$  と定義することによって  $\Delta\vec{K}$  の関数と見ることができ、結晶全体で積分して次式で表される。

$$F(\Delta\vec{K}) = \int n(\vec{r}) \exp(-i \text{  }) dV \quad (5)$$

ここで式 (4) を式 (5) に代入すると、結晶の体積  $V$  (つまり積分範囲) が十分に大きい場合、 $\Delta\vec{K} = \text{  }$  のときのみ  $F$  の値は零にならず、 $F = \text{  }$  となり回折を起こす。

$\Delta\vec{K} = \text{  }$  は、いわゆるブラッグの式と等価であり、以下でそれを導く。 $\vec{K}_0$  と  $\vec{K}$  のなす角を  $\alpha$  とすると、 $\Delta\vec{K}$  の大きさ  $\Delta K$  は  $\lambda, \alpha$  を用いて  $\Delta K = \text{  }$  となる。また、  
 (イ)  $\vec{g}_{hkl}$  は実格子における  $(hkl)$  面と直交するので、 $\Delta\vec{K} = \text{  }$  の場合の  $\vec{K}_0$  と  $(hkl)$  面のなす角は  である。さらに、 $(hkl)$  面の面間隔  $d_{hkl}$  は、原点から  $(hkl)$  面に下ろした垂線の長さである。よって  $d_{hkl}$  は、 $\vec{g}_{hkl}$  の大きさ  $g$  を用いて  $d_{hkl} = \text{  }$  となる。以上より、  
 (ウ)  $\Delta\vec{K} = \text{  }$  の条件の下でブラッグの式   $= \lambda$  が得られる。

問 1 空欄  ~  を適切な数値、もしくは式で埋めよ。 については導出過程も示せ。

問 2 下線部 (あ) について、実格子と逆格子との関係に基づいて、 $\vec{G} = \vec{g}_{hkl}$  のときに式 (3) が成立することを示せ。

問 3 下線部 (い) について、 $\vec{g}_{hkl}$  が実格子の  $(hkl)$  面と直交することを示せ。

問 4 下線部 (う) に関連して、基本並進ベクトル  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  ( $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = a, |\vec{a}_3| = 2a$ ) を結晶軸ベクトルとする単純正方格子をもつ単結晶の場合について考える。

(1) 逆格子の結晶軸ベクトル  $\vec{b}_i$  を  $\vec{a}_i$  と  $a$  を用いて、 $i=1, 2, 3$  の場合についてそれぞれ表せ。また、 $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$  の大きさを  $a$  を用いて表せ。

## 材料基礎学 B

- (2) 図2の方眼上の矢印で示される波数ベクトルをもつX線を単結晶に入射したとき、102回折を観測した。このとき同時に回折を起こす条件を満たしている全ての逆格子点を、解答用紙の方眼上に・で示せ。ただし、解答は図2に示す逆格子空間における $h0l$ 面内のみを考えればよい。なお、逆格子原点、 $\bar{b}_1$ および $\bar{b}_3$ の方向は解答用紙に記載してある。また、方眼1マスの大きさは $\pi/a$ である。
- (3) 図3に示すように、単結晶試料の(102)面の面法線が入射X線方向と散乱X線方向で作られる面(散乱面)内にのるように光学系を設置し、入射X線の入射角度 $\theta$ を変化させていくと同時に検出器の位置 $2\theta$ を変える $\theta$ - $2\theta$ スキャンを行って回折線を測定する。このスキャン方法によって、回折を観測することが可能な面のミラー指数をすべて答えよ。ただし、X線の波長は上の設問(2)と同じとする。

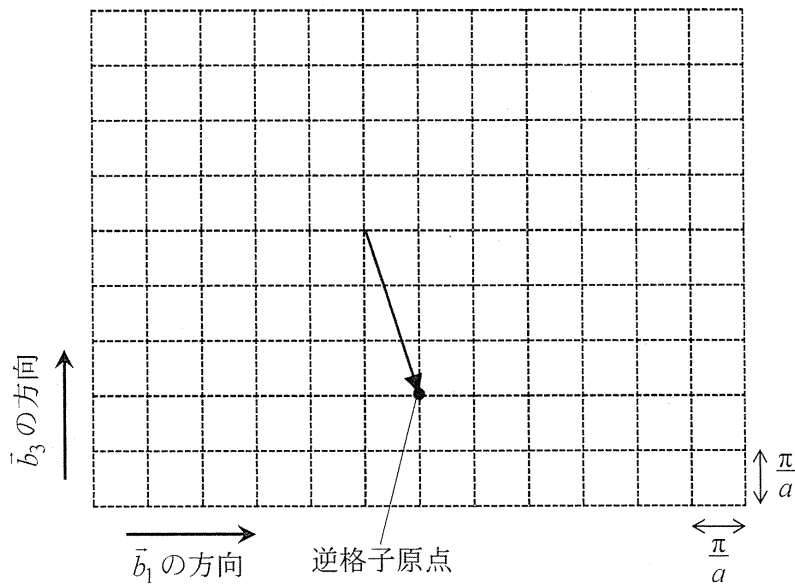


図2

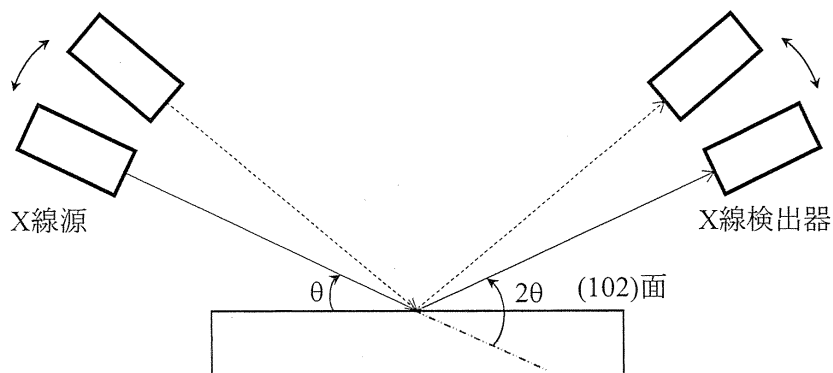


図3



## 材料基礎学 B

## [問題 2]

問 1 以下の文章を読み、～を適切な式で埋めよ。, に関しては枠内の選択肢より適切な語を選択せよ。

水素原子 A および B からなる水素分子を考える。これに束縛された電子の波動関数 $\psi(\vec{r})$ を水素原子 A, B の 1s オービタル $\phi_A(\vec{r}) = \phi\left(\vec{r} + \frac{\vec{d}}{2}\right)$ ,  $\phi_B(\vec{r}) = \phi\left(\vec{r} - \frac{\vec{d}}{2}\right)$ の重ね合わせとして考える。 $\vec{r}$  は位置ベクトル,  $\vec{d}$  は原子 A から B に向かうベクトルである。このとき $\psi(\vec{r})$ は $C_A$ ,  $C_B$ を係数として

$$\psi(\vec{r}) = C_A \phi_A(\vec{r}) + C_B \phi_B(\vec{r}) \quad (1)$$

と近似できる。

水素分子についての 1 電子ハミルトニアンを $\hat{H}$ とし、積分 $H_{ij}$ を

$$H_{ij} = \int \phi_i^*(\vec{r}) \hat{H} \phi_j(\vec{r}) d\vec{r} \quad i, j \in \{A, B\} \quad (2)$$

と定義する。 $i \neq j$ のときこの積分を共鳴積分と呼ぶ。共鳴積分は $H_{AB} = H_{BA} < 0$ である。

また、 $i = j$ のとき、この積分をクーロン積分と呼ぶ。クーロン積分は $H_{AA} = H_{BB} = H_0$ とする。続いて 1s オービタルの重なり積分 $S_{ij}$ を

$$S_{ij} = \int \phi_i^*(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}) d\vec{r} \quad i, j \in \{A, B\} \quad (3)$$

と定義する。1s オービタルは規格化されているので $S_{AA} = S_{BB} = 1$ である。ここでは簡単のため $S_{AB} = S_{BA} = 0$ と近似する。この $\hat{H}$ の期待値 $E$ は

$$E = \frac{\int \psi^*(\vec{r}) \hat{H} \psi(\vec{r}) d\vec{r}}{\int \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d\vec{r}} = \frac{\sum_i \sum_j C_i^* H_{ij} C_j}{\sum_i \sum_j C_i^* S_{ij} C_j} \quad i, j \in \{A, B\} \quad (4)$$

と書ける。式(4)は

$$\sum_i \sum_j C_i^* H_{ij} C_j - E \sum_i \sum_j C_i^* S_{ij} C_j = 0 \quad (5)$$

と変形できる。レイリー・リッツの変分法を用いると $E$ を最小にする近似解は条件 $\frac{\partial E}{\partial C_i} = 0$ に

よって求められるので、式(1)で表される波動関数に対して、永年方程式を得ることができる。ここから、エネルギー固有値はと求められる。規格化条件に注意すると $C_A$ ,  $C_B$ はと求められる。エネルギー固有値の小さな結合性の波動関数では A と

材料基礎学 B

B の 1s オービタルは  {同位相/逆位相}, エネルギー固有値の大きな反結合性の波動関数では A と B の 1s オービタルは  {同位相/逆位相} となる。

問2 以下の文章を読み, 問(a)~(d)に答えよ。

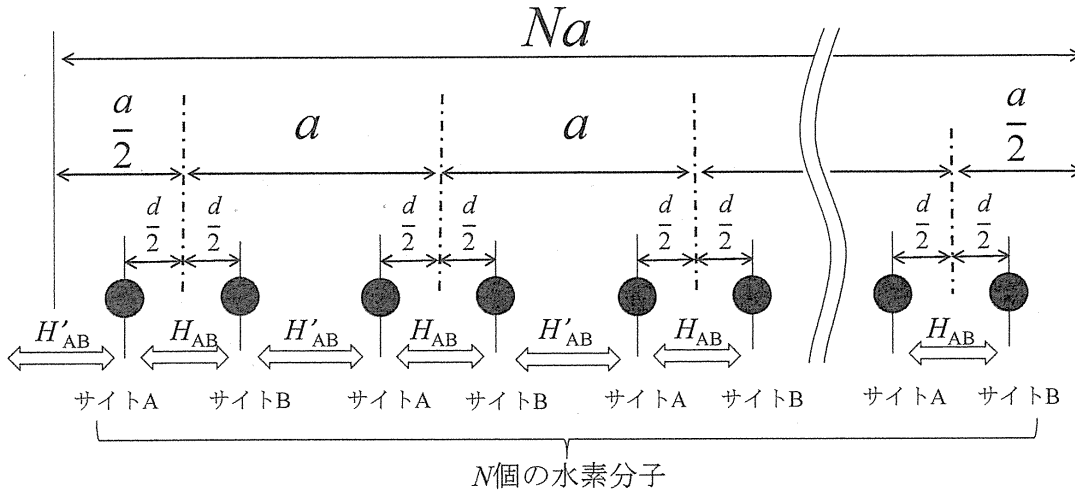


図 1

図 1 に示したように水素分子が等間隔に 1 列に並んだ仮想的な 1 次元結晶を考える。結晶全体で  $N(\gg 1)$  個の水素分子があり, 結晶の格子定数を  $a$  とする。結晶の長さは  $L(=Na)$  とする。 $\vec{R}$  は水素分子の中心の位置を表し,  $\vec{R} = (R, 0, 0) = (na, 0, 0)$  である ( $n$  は整数)。 $\vec{d} = (d, 0, 0)$  は各水素分子におけるサイト A から B に向かうベクトルである。この 1 次元結晶に周期的境界条件を課す。問 1 と同様に各水素原子の 1s オービタルのみを考え,

$\phi_{A,\vec{R}}(\vec{r}) = \phi\left(\vec{r} - \vec{R} + \frac{\vec{d}}{2}\right)$ ,  $\phi_{B,\vec{R}}(\vec{r}) = \phi\left(\vec{r} - \vec{R} - \frac{\vec{d}}{2}\right)$  を用いると, この結晶に束縛された電子の波動関数  $\Phi(\vec{r})$  は近似的に

$$\Phi(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}) \{C_{k,A} \phi_{A,\vec{R}}(\vec{r}) + C_{k,B} \phi_{B,\vec{R}}(\vec{r})\} \quad (6)$$

と書ける。 $\Phi(\vec{r})$  は  $\Phi(\vec{r}) = \Phi(\vec{r} + \vec{R}_N)$  を満たしている ( $\vec{R}_N = (L, 0, 0)$ )。 $\vec{k}$  は波数ベクトルで,  $s$  を整数として  $\vec{k} = (k, 0, 0) = \left(\frac{2\pi s}{L}, 0, 0\right)$  と書ける。 $C_{k,A}, C_{k,B}$  は波数  $k$  に依存した係数である。

式(6)の形で表される結晶中の波動関数を  関数と呼ぶ。

問 1 と同様にこの結晶中の 1 電子ハミルトニアン  $\hat{H}$  を考え, レイリー・リッツの変分法を適用すると, エネルギー固有値  $E(k)$  を求めることができる。ただし, 各原子の 1s オービ

## 材料基礎学 B

タル間の共鳴積分 (式(2)と同様) は, 左右の最近接サイトとのものだけを考えることにする. 分子内の 1s オービタル間の共鳴積分は  $H_{AB}(=H_{BA})$ , 異なる分子同士の 1s オービタル間の共鳴積分を  $H'_{AB}(=H'_{BA})$  と定義する.  $H_{AB} < 0$ ,  $H'_{AB} < 0$  であり, 分子内の 1s オービタル間の共鳴積分のほうが, 分子間の 1s オービタル間の共鳴積分よりもその絶対値が大きいと考えると,  $|H_{AB}| > |H'_{AB}|$  とする. クーロン積分は  $H_0$  とする. 簡単のため, 異なる原子間の 1s オービタルの重なり積分 (式(3)と同様) は 0 であるとする. 1s オービタルは規格化してあるので, 自身との重なり積分の大きさは 1 である.

(a) 空欄  を適切な語で埋めよ

(b) 式(6)の波動関数に対する永年方程式を求め, エネルギー固有値の波数依存性  $E(k)$  を求めよう.  $E(k)$  は式(4)と同様に  $\hat{H}$  の期待値であり,

$$E(k) = \frac{\int \Phi^*(\vec{r}) \hat{H} \Phi(\vec{r}) d\vec{r}}{\int \Phi^*(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) d\vec{r}} \quad (7)$$

で表される.

$$\Phi^*(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}^j} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{R}^j) \{ C_{k,A}^* \phi_{A,\vec{R}^j}^*(\vec{r}) + C_{k,B}^* \phi_{B,\vec{R}^j}^*(\vec{r}) \} \quad (8)$$

と書き, 式を整理したうえでレイリー・リッツの変分法を適用し永年方程式を求めよ. またこれを解き,  $E(k)$  を求め, その概形を描け.

(c)  $k = \frac{\pi}{a}$  のとき, 2 つの異なるエネルギー固有値を持つ波動関数が求まる. それぞれに対応する波動関数における 1s オービタルの位相を, 解答欄の例を参考に, 図示せよ.

(d) 各水素原子は 1 つずつ電子をもっている. 波数空間において  $\frac{2\pi}{L}$  ごとに 1 つ状態があり, 1 つの状態にそれぞれ 2 個電子が収容できることを考えると, この 1 次元結晶の電子状態は金属的であると考えられるか絶縁体的であると考えられるか. 簡単な理由とともに解答せよ.

## 材料基礎学 B

問3 以下の文章を読み問(a), (b)に答えよ。

エネルギー固有値の波数 $k$ に対する依存性が $E(k)$ で表される場合の電子の運動を考える。この電子の運動を半古典近似で考える。簡単のため1次元で考える。

いま、電子が一定の電界により力 $F$ を受けているとする。このとき、電子の波数は時間ともに変化する。時刻0から短い時間 $\Delta t$ の間に波数 $k$ が $\Delta k$ だけ変化したとする。 $\Delta k$ は小さく、この範囲で $E(k)$ は

$$E(k) = E(k_0) + \left. \frac{dE(k)}{dk} \right|_{k=k_0} \cdot (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2E(k)}{dk^2} \right|_{k=k_0} \cdot (k - k_0)^2 \quad (9)$$

と表されるとする。 $k_0$ は時刻0における波数である。また、電子の速度 $v(k)$ は $E(k)$ を用いて

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk} \quad (10)$$

と表される。 $\hbar$ はプランク定数を $2\pi$ で割ったものである。

半古典近似では、電子は有効質量 $m_{\text{eff}}$ をもった古典的な粒子として運動すると考える。 $m_{\text{eff}}$ は波数 $k$ に依存するが、いま考えている短い時間 $\Delta t$ の間は、波数の変化が小さく、 $m_{\text{eff}}$ は時刻0の値から変化しないと考える。古典的な粒子であると考えた場合の短い時間 $\Delta t$ の間のエネルギー増分や速度変化を考え、式(9)および式(10)から得られる結果と比較することで、電界による力 $F$ は $\Delta t$ 、 $\Delta k$ などを用いて、 $F = \boxed{\text{キ}}$ と書くことができる。また有効質量 $m_{\text{eff}}$ は $E(k)$ などを用いて  $m_{\text{eff}} = \boxed{\text{ク}}$ と求めることができる。

(a) 空欄  $\boxed{\text{キ}}$ ,  $\boxed{\text{ク}}$  を適切な式で埋めよ。導出過程も簡単に書け。

(b) ここで考えた有効質量 $m_{\text{eff}}$ を問2の1次元結晶に当てはめる。分子間距離が十分に大きく、分子間の共鳴積分が $|H'_{AB}| = 0$ とみなせるとき、有効質量 $m_{\text{eff}}$ はどのようなになると予想されるか解答せよ。理由も簡単に記述せよ。

## 材料基礎学 B

## [問題 3]

金属材料の塑性変形は一般的に転位のすべり運動によって生じる。転位運動に関する次の《文章 A》、《文章 B》を読んで下の問に答えよ。なお、以下では簡単のため等方弾性体を扱うものとし、その剛性率を  $\mu$ 、ポアソン比を  $\nu$  とする。また、一般にベクトル  $\vec{a}$  の大きさは  $a$  とする。

## 《文章 A》

外部応力の作用下において転位に働く力について考える。図 1 に示す転位のバーガースベクトルは  $\vec{b}$ 、転位線方向を表す単位ベクトルは  $\vec{\xi}$  である。外部応力の作用によって転位素片  $\vec{l}$  が  $\vec{s}$  だけ動いたとする。このとき転位単位長さあたり  $\vec{f}$  の力が働いているとすると、転位素片  $\vec{l}$  に働く力によりなされる仕事は、 $W_1 = \boxed{\text{ア}}$  となる。

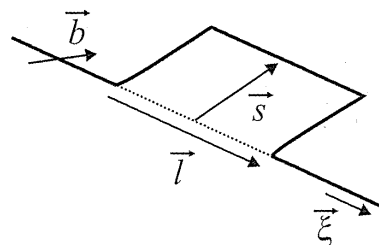


図 1

いま、転位素片  $\vec{l}$  に作用する応力テンソルを  $[\sigma]$  (行列表記)、転位素片  $\vec{l}$  が動いた面の法線ベクトルを  $\vec{n}$  ( $= \vec{l} \times \vec{s}$ )、転位素片  $\vec{l}$  が掃いた面に働く力を  $[\sigma] \vec{n}$  と表す。転位素片  $\vec{l}$  が動いた面の上下の結晶は相対的にバーガースベクトル  $\vec{b}$  だけ変位することを考慮すると、この転位の運動によってなされる仕事は、 $W_2 = \boxed{\text{イ}}$  と表すことができる。 $W_1$  と  $W_2$  は同じ仕事量を別の観点から導出したものであるため、 $W_1 = W_2$  となる。従って、転位単位長さあたりに働く力  $\vec{f}$  は  $[\sigma]$ 、 $\vec{b}$ 、 $\vec{\xi}$  を用いて

$$\vec{f} = \boxed{\text{ウ}} \quad (1)$$

と表すことができる。

式(1)よりバーガースベクトル  $\vec{b}$  の転位に対して、すべり面上ですべり方向にせん断応力  $\tau$  が働いているとき、転位には転位線に対して  $\boxed{\text{エ}}$  な方向に力が働き、その大きさは単位長さあたり  $\boxed{\text{オ}}$  であることがわかる。

問 1 空欄  $\boxed{\text{ア}}$  ~  $\boxed{\text{オ}}$  を適切な式または語句で埋めよ。ただし  $\boxed{\text{ア}}$  の

## 材料基礎学 B

解答には $\vec{f}$ ,  $\vec{s}$ ,  $s$ ,  $\vec{l}$ ,  $l$ のうち必要なものを用い, イの解答には $[\sigma]$ ,  $\vec{n}$ ,  $\vec{b}$ を用いること. また, 必要であれば,  $([A] \vec{u}) \cdot \vec{v} = ([A] \vec{v}) \cdot \vec{u}$  ( $[A]$ は $3 \times 3$ の対称行列),  $\vec{u} \cdot (\vec{v} \times \vec{w}) = (\vec{u} \times \vec{v}) \cdot \vec{w}$ の関係を利用すること.

## 《文章 B》

金属材料に降伏応力以上の力を加えると転位密度が急激に増加し, 塑性変形が進行する. 転位密度の増加は, フランク・リード機構などによって転位が増殖することに起因する. bcc 金属では転位の二重交差すべりによる転位を増殖がしばしば観察される. 以下では二重交差すべりによって転位を増殖が起こる条件を考える.

図2において, すべり面1上にある転位 AB (バーガスベクトル  $\vec{b}$ ) の転位線方向を表す単位ベクトルは $\vec{\xi} = (1, 0, 0)$ である. 二重交差すべりによって, この転位 AB の一部が  $A_1B_1$  の位置で交差すべりを起こしてすべり面2に移り, さらにもう一度  $A_2B_2$  の位置で交差すべりを起こし, すべり面1と平行なすべり面3に移動していくものとする. このような二重交差すべりは転位 AB が カ {刃状転位 / らせん転位} の場合にのみ起こる.

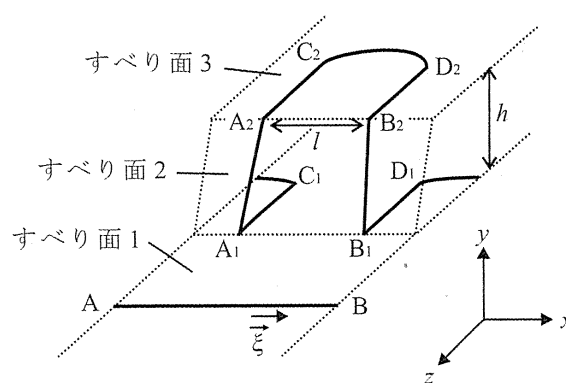


図2

(a) 転位素片  $A_1A_2$  と  $B_1B_2$  の運動が抑制されているとすると, すべり面3に移った転位素片  $A_2B_2$  はフランク・リード源として活動する可能性がある. しかし, 図2のように  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $B_1$ ,  $B_2$  から転位の張り出しが生じるため, 転位素片  $B_1D_1$  と転位素片  $B_2D_2$ , 転位素片  $A_1C_1$  と転位素片  $A_2C_2$  はそれぞれのすべり運動に対して影響をおよぼし合う. つまり, 二重交差すべりによる転位を増殖が生じるためには, すべり面1上の転位素片とすべり面3上の転位素片の間の相互作用も考慮する必要がある.

## 材料基礎学 B

ここでは簡単のため、転位素片  $B_1D_1$  と転位素片  $B_2D_2$  がともに  $z$  軸に平行であり、 $z$  軸正方向から見ると、図 3 のように、転位素片  $B_1D_1$  と転位素片  $B_2D_2$  がそれぞれ  $(x, y) = (0, 0)$ ,  $(x, y) = (d, h)$  の位置に配列している状況を考える。転位素片  $B_1D_1$  と転位素片  $B_2D_2$  の相互作用と転位素片  $A_1C_1$  と転位素片  $A_2C_2$  の相互作用は同じとし、転位素片  $B_1D_1$  と  $B_2D_2$  の相互作用のみを考慮する。図 2 および

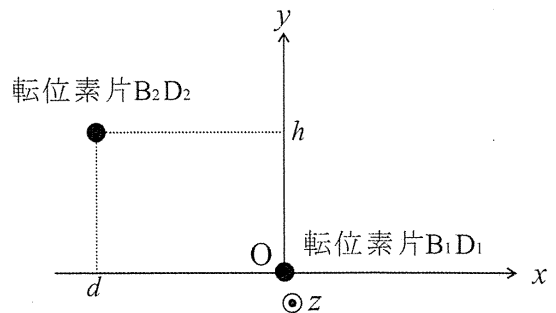


図 3

図 3 から、転位素片  $B_2D_2$  のバーガスベクトルおよび転位線方向を表す単位ベクトルはそれぞれ  $\vec{b} = (\text{キ})$ ,  $\vec{\xi} = (0, 0, 1)$  と表され、転位素片  $B_1D_1$  のバーガスベクトルおよび転位線方向を表す単位ベクトルは、 $\vec{b} = (\text{ク})$ ,  $\vec{\xi} = (\text{ケ})$  と表される。式(1)より、転位素片  $B_2D_2$  が転位素片  $B_1D_1$  から  $x$  方向、 $y$  方向、 $z$  方向に受ける力  $f_x$ ,  $f_y$ ,  $f_z$  はそれぞれ、 $f_x = \text{コ}$ ,  $f_y = \text{サ}$ ,  $f_z = \text{シ}$  と表すことができる。

(b) 転位素片  $B_2D_2$  がすべり運動を続けるためには、転位素片  $B_1D_1$  から受ける最大の引力に打ち勝つ必要がある。二重交差すべり時のすべり面 1 とすべり面 3 の間隔がある一定の値  $h_c$  以上になると、転位素片  $B_2D_2$  が転位素片  $B_1D_1$  から受ける最大の引力は、転位素片  $A_2B_2$  をフランク・リード源として活動させるために必要なせん断力よりも小さくなる。このとき、転位素片  $B_2D_2$  がすべり運動を続けることが可能となり、転位の増殖が起こる。

問 2 空欄  $\text{カ}$  ~  $\text{シ}$  を適切な式または語句で埋めよ。  $\text{カ}$  については適切な語句を { } 内から選べ。必要であれば問題末尾に示した転位の応力テンソルの式を利用すること。

問 3 下線部 (a) について、転位素片  $A_2B_2$  の長さが  $l$  であり、転位の線張力  $T$  が転位線方向によらず常に  $\mu b^2 / 2$  であるとしたときに、転位素片  $A_2B_2$  をフランク・リード源として活動させるために必要なせん断応力を求めよ。導出過程も記述すること。ただし、ここでは異なるすべり面上にある転位素片同士の相互作用は考えなくてよい。

## 材料基礎学 B

問4 下線部 (b) のように、二重交差すべりによって転位が増殖するためには、すべり面1とすべり面3の間隔が $h_c$ 以上となる必要がある。この $h_c$ を $\mu$ ,  $\nu$ ,  $l$ ,  $b$ ,  $d$ のうち必要なものを用いて表せ。導出過程も記述すること。

問5 ある一定の外力下では、一つのフランク・リード源が活動し始めても転位は無限に増殖するわけではない。転位が増殖が停止する機構について、転位間の相互作用の観点から記述せよ。図を用いてもよい。

## 【参考】

$xyz$  直交座標系において、転位線方向が $z$ 軸正方向である転位が $z$ 軸上にあるとき、転位周囲の応力テンソルは次のような行列で与えられる。

らせん転位の場合 ( $\vec{b}$  は $z$ 軸正方向に平行)

$$[\sigma] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{y}{x^2+y^2} \\ 0 & 0 & \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x}{x^2+y^2} \\ -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{y}{x^2+y^2} & \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x}{x^2+y^2} & 0 \end{bmatrix}$$

刃状転位の場合 ( $\vec{b}$  は $x$ 軸正方向に平行)

$$[\sigma] = \begin{bmatrix} -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2} & \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2} & 0 \\ \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2} & \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\mu\nu b}{\pi(1-\nu)} \frac{y}{x^2+y^2} \end{bmatrix}$$



平成 28 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。

白紙

工業数学

**【問題1】**

$t \geq 0$  として以下の問に答えよ。

問1 以下の微分方程式を解け。

$$\frac{d^2x}{dt^2} - 4\frac{dx}{dt} + 4x = 0, \quad x(0) = 3, \quad \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t=0} = 1$$

問2 以下の微分方程式を解け。

$$\frac{d^2x}{dt^2} + x = 2t, \quad x(0) = -1, \quad \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t=0} = 8$$

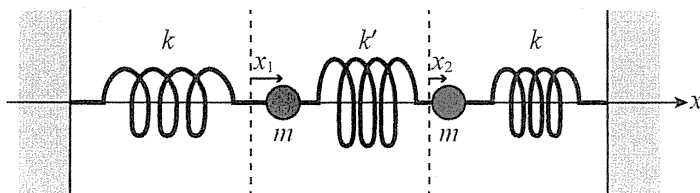
問3 滑らかな水平面上に質量  $m$  の2つの質点があり、バネ定数  $k$  と  $k'$  の質量が無視できるバネで図のように連結されている。ただし、両端のバネの一端は壁に固定されている。いま、両質点を平衡位置付近で  $x$  軸方向に振動させることを考える。両質点の平衡位置からの変位をそれぞれ  $x_1$ ,  $x_2$  として以下の問に答えよ。

- (a) 運動方程式を立てよ。
- (b) 以下の初期条件で、(a) の運動方程式を解け。

$$x_1(0) = x_2(0) = 0, \quad \left. \frac{dx_1}{dt} \right|_{t=0} = a, \quad \left. \frac{dx_2}{dt} \right|_{t=0} = -a$$

- (c) 以下の初期条件で、(a) の運動方程式を解け。

$$x_1(0) = x_2(0) = b, \quad \left. \frac{dx_1}{dt} \right|_{t=0} = \left. \frac{dx_2}{dt} \right|_{t=0} = 0$$



## 工業数学

## [問題2]

問1 以下の積分公式を導け。ただし、 $a$ は正の実数とする。

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

問2 ガウス関数  $g(x) = e^{-ax^2}$  のフーリエ変換  $G(k)$  が

$$G(k) = \frac{1}{\sqrt{2a}} e^{-\frac{k^2}{4a}}$$

となることを示せ。

なお、ここでは  $|h(x)|$  が積分可能である関数  $h(x)$  のフーリエ変換  $H(k)$  とその逆変換を、以下のように定義する。

$$H(k) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} h(x) e^{-ikx} dx$$

$$h(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} H(k) e^{ikx} dk$$

問3 2つの波動関数  $\psi(x)$  と  $\phi(k)$  はフーリエ変換の関係で結ばれている。いま、 $\psi(x)$  が規格化されたガウス関数

$$\psi(x) = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}ax^2}$$

であるとき、波動関数から導かれる確率密度関数  $|\psi(x)|^2$  および  $|\phi(k)|^2$  の標準偏差  $\Delta x$  および  $\Delta k$  の積が  $\frac{1}{2}$  となることを示せ。ただし、解答には以下の標準偏差の定義を用いてもよい。

確率密度関数  $P(q)$  に従う確率変数  $q$  に対し、その期待値  $\langle q \rangle$  と標準偏差  $\Delta q$  は次式で定義される。

$$\langle q \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} q P(q) dq$$

$$\Delta q \equiv \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} (q - \langle q \rangle)^2 P(q) dq} = \sqrt{\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2}$$

## 工業数学

## 【問題3】

$N$ 個の測定データ  $(x_i, y_i)$  ( $i = 1, \dots, N$ ) に対し、以下のような  $M$  個の基底で表されるモデル関数  $f(x)$  をあてはめることを考える。

$$y = f(x) = \sum_{k=1}^M a_k f_k(x) \quad (1)$$

ただし、測定データは全て実数、モデル関数は実関数とする。また、全ての  $f_k(x)$  は少なくとも1つの  $x_i$  に対し  $f_k(x_i) \neq 0$  とする。 $a_k$  はモデル関数のパラメータである。測定データを最も良く再現するパラメータ (最適パラメータ) は

$$\chi^2 \equiv \sum_{i=1}^N \left[ \frac{y_i - f(x_i)}{\sigma_i} \right]^2 = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} \left[ y_i - \sum_{k=1}^M a_k f_k(x_i) \right]^2 \quad (2)$$

が最小のときに得られる。ただし、 $\sigma_i (> 0)$  は測定値  $y_i$  の誤差である。最適パラメータは測定データとモデル関数の基底で構成される以下の行列  $A$ ,  $B$ ,  $C$  およびベクトル  $\alpha$ ,  $\beta$  を用いて表現できる。

$$A = (A_{ij}), \quad A_{ij} \equiv \frac{f_j(x_i)}{\sigma_i} \quad (i = 1, \dots, N \quad j = 1, \dots, M) \quad (3)$$

$$B \equiv A^T A = (B_{jk}), \quad B_{jk} = \sum_{i=1}^N \frac{f_j(x_i) f_k(x_i)}{\sigma_i^2} \quad (j = 1, \dots, M \quad k = 1, \dots, M) \quad (4)$$

$$C \equiv B^{-1} \quad (5)$$

$$\alpha = (\alpha_i), \quad \alpha_i \equiv \frac{y_i}{\sigma_i} \quad (i = 1, \dots, N) \quad (6)$$

$$\beta \equiv A^T \alpha = (\beta_j), \quad \beta_j = \sum_{i=1}^N \frac{y_i f_j(x_i)}{\sigma_i^2} \quad (j = 1, \dots, M) \quad (7)$$

ただし、 $X^T$ ,  $X^{-1}$  はそれぞれ行列  $X$  の転置行列, 逆行列を表す。また、ベクトル  $\gamma$  を列ベクトル,  $\gamma^T$  を行ベクトルとする。以下の問に答えよ。導出過程も書くこと。必要に応じて、参考資料を用いてもよい。

問1 実対称行列  $B$  が正定値であること (零ベクトルでない任意のベクトル  $\epsilon$  およびその転置ベクトル  $\epsilon^T$  に対し  $\epsilon^T B \epsilon > 0$ ) を示し、その結果を用いて  $B$  が逆行列  $C$  を持つことを示せ。

## 工業数学

問2 最適パラメータ  $\mathbf{a} = (a_k) (k = 1, \dots, M)$  を (3) ~ (7) の行列およびベクトル, あるいはそれらの要素を用いて書き表せ.

問3 最適パラメータの分散

$$\boldsymbol{\eta} = (\eta_k), \quad \eta_k = \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 \left( \frac{\partial a_k}{\partial y_i} \right)^2 \quad (k = 1, \dots, M) \quad (8)$$

は行列  $\mathbf{C}$  の要素を用いて表されることを示せ.

## 工業数学

## [参考資料]

## 1. ラプラス変換表

$f(t)$	$F(s) = \mathcal{L}[f(t)] \equiv \int_0^{\infty} f(t)e^{-st} dt$
$\delta(t)$ (デルタ関数)	1
$t^n$ ( $n: 0$ 以上の整数)	$\frac{n!}{s^{n+1}}$
$e^{\omega t} \frac{t^{l-1}}{(l-1)!}$ ( $l: 自然数$ )	$\frac{1}{(s-\omega)^l}$
$\cos \omega t$	$\frac{s}{s^2 + \omega^2}$
$\sin \omega t$	$\frac{\omega}{s^2 + \omega^2}$
$\cosh \omega t$	$\frac{s}{s^2 - \omega^2}$
$\sinh \omega t$	$\frac{\omega}{s^2 - \omega^2}$

また、以下の式が成り立つ。

$$\mathcal{L} \left[ \frac{d^n f(t)}{dt^n} \right] = s^n F(s) - s^{n-1} f(0) - s^{n-2} \left. \frac{df(t)}{dt} \right|_{t=0} - \dots - \left. \frac{d^{n-1} f(t)}{dt^{n-1}} \right|_{t=0}$$

2.  $n$ 次の実対称行列  $Q$  の性質

- 固有値  $\lambda_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ) は全て実数。
- 固有ベクトル  $v_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ) は全て線形独立。
- 規格化された固有ベクトルを列とする行列  $P$  は直交行列 ( $P^T P = E$ ;  $E$  は単位行列) となり、 $Q$  は  $P$  を用いて、以下のように対角化できる。

$$P^T Q P = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{pmatrix}$$