

平成 29 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 7 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]

結晶による回折現象に関する以下の問に答えよ。

問1 面心立方格子や体心立方格子では単位格子中に複数の格子点が含まれているが、これらいずれの場合においても格子点を一つだけ含むような単位格子を選択することができる。このような単位格子を「基本単位格子」という。

(a) 面心立方格子（格子定数： a ）の基本単位格子をその基本ベクトル $\vec{A}_1, \vec{A}_2, \vec{A}_3$ とともに解答用紙の図中に記入せよ。ただし基本ベクトルの起点は図中の O で記した格子点とすること。また図示した基本ベクトル $\vec{A}_1, \vec{A}_2, \vec{A}_3$ を面心立方格子の基本ベクトル $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ を用いて表せ。

(b) 図1に示すような基本ベクトル $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ で定義される単位格子と、その基本単位格子（基本ベクトル $\vec{B}_1, \vec{B}_2, \vec{B}_3 = \vec{b}_3$ ）の間のミラー指数の変換を考える。 $\vec{B}_3 = \vec{b}_3$ に平行な任意の面 C が基本格子および基本単位格子についてのミラー指数でそれぞれ $(hc\ kc0), (Hc\ Kc0)$ と表されるとき、 Hc, Kc をそれぞれ hc, kc を用いて表せ。

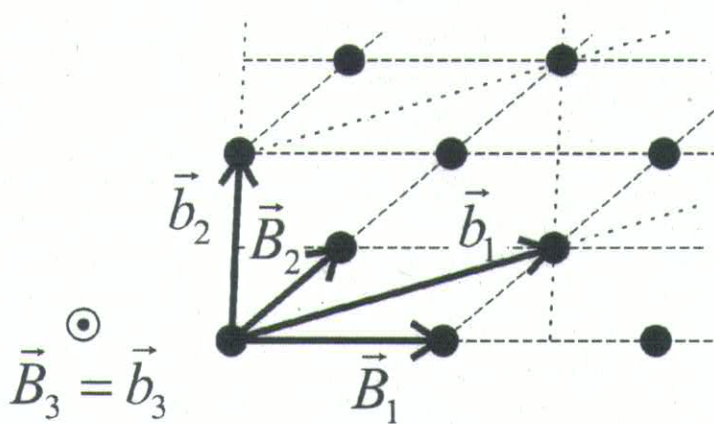


図1

(c) 面心立方格子とその基本単位格子 ((a)で解答したもの) との間のミラー指数および方向指数の変換式を答えよ。ただし、面心立方格子およびその基本単位格子でのミラー指数をそれぞれ $(hkl), (HKL)$ 、方向指数をそれぞれ $[uvw], [UVW]$ とする。

材料基礎学 A

問2 ある単位格子においてミラー指数 (hkl) で表される面に垂直で、その面間隔 d_{hkl} の逆数に等しい大きさをもつベクトルを逆格子ベクトル $\vec{g}_{hkl}^* = h\vec{g}_1^* + k\vec{g}_2^* + l\vec{g}_3^*$ と定義する。ここで \vec{g}_1^* , \vec{g}_2^* , \vec{g}_3^* は逆格子の基本ベクトルである。問1(a)で解答した基本単位格子について、その逆格子の基本ベクトル \vec{A}_1^* , \vec{A}_2^* , \vec{A}_3^* を \vec{a}_1 , \vec{a}_2 , \vec{a}_3 および a を用いて表せ。

問3 単位格子中に1個の原子を含むある結晶に波数ベクトル \vec{k}_0 の平面波(波長 λ) が入射し、 \vec{k} の方向へ散乱される場合、波数ベクトルの変化 $(\vec{k} - \vec{k}_0)$ が逆格子ベクトル \vec{g}_{hkl}^* と一致するとき強い散乱(回折)が起こる。問1(c)で解答した関係をもとに面心立方構造を有する結晶から回折が起こるために h, k, l が満たすべき条件を求めよ。解答欄には導出の過程も記入すること。

問4 結晶に入射する平面波が電子線の場合(電子回折)、(ア)入射波に垂直な逆格子断面に対応した電子回折図形を得ることができる。

(a) 電子線の加速電圧が 200 kV であるときの電子線の波長を求めよ。プランク定数を 6.63×10^{-34} J s, 電気素量を 1.60×10^{-19} C, 電子の質量を 9.11×10^{-31} kg とし、簡単のため相対論的効果は考慮しなくてよい。解答欄には導出の過程も記入すること。

(b) 体心立方構造を有する結晶(格子定数: 0.287 nm) の 110 反射がブラッグ条件を満たしている場合について、電子線の波数ベクトル \vec{k}_0 の大きさと逆格子ベクトル \vec{g}_{110}^* の大きさの比 $|\vec{k}_0|/|\vec{g}_{110}^*|$, ならびに回折角($^\circ$)を求めよ。またこれらの数値を参考にして下線部(ア)の理由をエバルト球の概念にもとづいて簡潔に説明せよ。

(c) 面心立方構造を有する結晶の [110] にそって電子線を入射した場合の電子回折図形に対応する逆格子断面を図示せよ。解答の際には解答欄の逆格子原点(点 O^*) と 220 逆格子点(点 D^*) を基準として、 $|h| \leq 2$, $|k| \leq 2$, $|l| \leq 2$ の範囲にある逆格子点すべてをそれぞれ●で図示せよ。なお図示した逆格子点には指数 hkl を付すこと。さらに図示した逆格子点の中から一つの逆格子点(指数を $h'k'l'$ とする)を選択し、 $|\vec{g}_{h'k'l'}^*|/|\vec{g}_{220}^*|$ ならびに \vec{g}_{220}^* と $\vec{g}_{h'k'l'}^*$ のなす角度($^\circ$)を答えよ。

材料基礎学 A

【問題 2】

弾性ひずみエネルギーの導出に関する《文章 A》、刃状転位と溶質原子の弾性相互作用に関する《文章 B》を読んで以下の問に答えよ。なお、一階のテンソル（ベクトル）の各成分は a_i ($i = 1, 2, 3$)、二階のテンソルの各成分は a_{ij} ($i, j = 1, 2, 3$) と表し、テンソル計算は総和規約（末尾参考 1）に基づいて記述する。

《文章 A》

図 1(a)のように、長さ L 、断面積 S 、ヤング率 E である同じ材料の二つの棒 A、B があり、図 1(b)のように棒 B のみに相変態が起こりその長さが ΔL だけ伸びたとする。この相変態によるひずみを $\varepsilon^* = \Delta L / L$ と表す。相変態後の棒 B を相変態前の元の長さになるまで弾性変形させてから棒 A と棒 B を貼り合わせ、たわみが生じない状況で図 1(c)のように緩和させる。力学平衡後の棒 A の長さを $L + \Delta L_A$ 、棒 B の長さを $L + \Delta L - \Delta L_B$ とする。 ΔL は L に比べて十分小さいものとし、 $\varepsilon = \Delta L_A / L$ 、 $e = -\Delta L_B / (L + \Delta L) \approx -\Delta L_B / L$ とすると、

$$\varepsilon = e + \varepsilon^* \tag{1}$$

が成立し、 ε は和の形で表現されるので全ひずみと呼ぶ。 ε および $e = \varepsilon - \varepsilon^*$ はそれぞれ棒 A および棒 B にとっての弾性ひずみである。一方、弾性応力が発生しないひずみ ε^* を一般に固有ひずみと呼ぶ。相変態によって棒 B の断面積は変化せず、また物理定数も変化しないとすると、力学平衡状態において棒 A、棒 B に働いている力 F_A 、 F_B は、右向きを正方向として、 $F_A =$ 、 $F_B =$ と表される。静的釣り合いの条件、

$$F_A + F_B = \text{ウ} \tag{2}$$

より、 ε は ε^* を用いて、 $\varepsilon =$ と表される。このように、外部応力が無い状態での力学平衡状態を内部応力状態という。

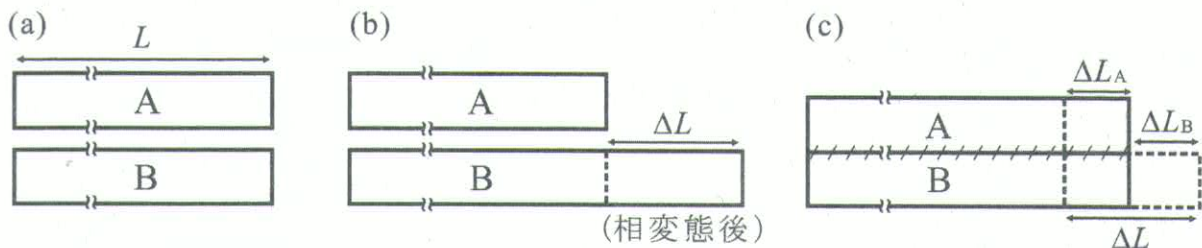


図 1

材料基礎学 A

この考え方を一般化し、固有ひずみ ε^* を有する領域が無限大のマトリクス中のある領域に存在する場合を考える。例えば、物体内に転位が存在したり、ある一部の領域で熱膨張が起こったり、格子定数の異なる相が生成したりすると、内部応力状態となる。位置 \mathbf{x} にあった物体内の点が、内部応力による変形後に位置 $\mathbf{x}+\mathbf{u}$ の点 (\mathbf{u} : 変位ベクトル) に移動したとする。変形により生じる全ひずみテンソルの各成分 $\varepsilon_{ij}(\mathbf{x})$ は、

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3)$$

と定義される。内部応力問題では先の例と同様に、位置 \mathbf{x} における全ひずみ $\varepsilon_{ij}(\mathbf{x})$ は、 $e_{ij}(\mathbf{x})$ と $\varepsilon^*_{ij}(\mathbf{x})$ の和として書けるので、実際の弾性ひずみは $e_{ij}(\mathbf{x}) = \varepsilon_{ij}(\mathbf{x}) - \varepsilon^*_{ij}(\mathbf{x})$ として与えられる。静的釣り合いの条件は、応力テンソル $\sigma_{ij}(\mathbf{x})$ を用いると、

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} \left(= \frac{\partial \sigma_{1j}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{2j}}{\partial x_2} + \frac{\partial \sigma_{3j}}{\partial x_3} \right) = \boxed{\text{オ}} \quad (4)$$

となる。全ひずみの定義式(3)、固有ひずみ $\varepsilon^*_{ij}(\mathbf{x})$ と弾性定数テンソル C_{ijkl} を用いてフックの法則を適用すると、 $\sigma_{ij}(\mathbf{x}) = C_{ijkl} \boxed{\text{カ}}$ が得られ、これを式(4)に代入して得られる微分方程式を解くことにより、変位 $u_i(\mathbf{x})$ 、弾性ひずみ $e_{ij}(\mathbf{x})$ 、応力 $\sigma_{ij}(\mathbf{x})$ などが求まる。

以上のようにして求めた $\sigma_{ij}(\mathbf{x})$ と $e_{ij}(\mathbf{x})$ を用いると、弾性ひずみエネルギー W は、

$$W = \int_V \frac{1}{2} \sigma_{ij}(\mathbf{x}) e_{ij}(\mathbf{x}) dx \quad (5)$$

と表される。式(5)の積分は $d\mathbf{x} (= dx_1 dx_2 dx_3)$ を体積要素とする物体 V 全体にわたる体積積分である。ここで、応力テンソル σ_{ij} の対称性を利用すると、式(5)の弾性ひずみエネルギー W は、 $\sigma_{ij}(\mathbf{x})$ 、 $\partial u_i / \partial x_j$ 、 $\varepsilon^*_{ij}(\mathbf{x})$ を用いて、

$$W = \int_V \boxed{\text{キ}} dx \quad (6)$$

と書き直すことができる。部分積分を実行して末尾参考2に示した Gauss の発散定理を利用し、式(4)、および自由表面において面力は $\sigma_{ij} n_j = \boxed{\text{ク}}$ (n_j : 面法線ベクトルの成分) であることを用いると、式(6)の W は $\sigma_{ij}(\mathbf{x})$ と $\varepsilon^*_{ij}(\mathbf{x})$ を用いて次式で表される。

$$W = \int_V \boxed{\text{ケ}} dx \quad (7)$$

材料基礎学 A

問1 空欄 ~ を適切な数値または式で埋めよ。ただし、 および の解答には、 $E, S, \varepsilon, e, \varepsilon^*$ のうち必要なものを用いること。

問2 等方弾性体中に存在する刃状転位の単位長さあたりの弾性ひずみエネルギーを、考え方を示しながら導出せよ。なお、刃状転位の応力場のおよぶ範囲を転位から距離 R までの範囲とし、さらに転位芯部分（転位芯半径： r_0 ）のエネルギーは考えなくてよい。ただし、 x_1, x_2, x_3 直交座標系において、バーガースベクトル \vec{b} が x_1 軸正方向に平行で x_3 軸上に存在する刃状転位（転位線方向は x_3 軸正方向）の固有ひずみは、 $\varepsilon^*_{12} = \varepsilon^*_{21} = (b/2)\delta(x_2)H(-x_1)$ であり、その他の ε^*_{ij} はゼロである。ここで、 $b = |\vec{b}|$ 、 $H(x)$ は Heaviside の階段関数、 $\delta(x)$ は Dirac のデルタ関数であり、 $H(x)$ と $\delta(x)$ の数学的性質は末尾参考3に示してある。また、式(4)に基づく微分方程式を解いて求めた等方弾性体中に存在する刃状転位周囲の応力場は末尾参考4に与えてある。

《文章B》

無限大物体中に固有ひずみを有する領域 Ω^I と Ω^{II} が存在するときの Ω^I と Ω^{II} の弾性相互作用エネルギー W_{int} について考える。 Ω^I および Ω^{II} によって作られる応力場と弾性ひずみ場をそれぞれ σ^I_{ij} 、 σ^{II}_{ij} 、 e^I_{ij} 、 e^{II}_{ij} とすると、物体中の全弾性ひずみエネルギー W は、応力場、ひずみ場の両者において重ね合わせができるので、弾性定数の対称性を利用すると、

$$W = \int_V \frac{1}{2} (\sigma^I_{ij} + \sigma^{II}_{ij}) (e^I_{ij} + e^{II}_{ij}) dx = \int_V \frac{1}{2} \sigma^I_{ij} e^I_{ij} dx + \int_V \frac{1}{2} \sigma^{II}_{ij} e^{II}_{ij} dx + \int_V \sigma^I_{ij} e^{II}_{ij} dx \quad (8)$$

と書ける。ここで、 Ω^I および Ω^{II} の固有ひずみをそれぞれ ε^*_{ij} および ε^{*II}_{ij} とすると、式(7)と同様に末尾参考2に示した Gauss の発散定理を利用することにより、弾性相互作用エネルギー W_{int} は、

$$W_{\text{int}} = - \int_V \sigma^I_{ij} \varepsilon^{*II}_{ij} dx \quad (9)$$

と表すことができる。

具体的に、等方弾性体における刃状転位と置換型溶質原子の弾性相互作用エネルギーについて考えよう。刃状転位は問2と同様に x_1, x_2, x_3 直交座標系において x_3 軸上にあり（転位線方

材料基礎学 A

向は x_3 軸正方向), バーガースベクトル \vec{b} が x_1 軸正方向に平行である. 溶質原子の半径を r_s , 溶媒原子の半径を r_M とすると, 溶質原子まわりの固有ひずみ ε_{ij}^* は,

$$\begin{pmatrix} \frac{r_s - r_M}{r_M} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{r_s - r_M}{r_M} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{r_s - r_M}{r_M} \end{pmatrix} \quad (10)$$

と表される. 式(10)と末尾参考4に示した刃状転位の応力場を式(9)に代入することによって, 刃状転位と溶質原子の弾性相互作用エネルギーを求めることができる. また, 溶質原子の占有体積を Ω とすると, その体積は極めて小さいため, 式(9)に示した弾性相互作用エネルギー W_{im} における積分は積の形に単純化できる. 溶質原子が十分拡散できる状況では, 刃状転位と溶質原子の間に働く弾性相互作用によって溶質原子が刃状転位の周囲に集まり, コットレル雰囲気形成される.

- 問3 刃状転位と溶質原子の弾性相互作用エネルギーを, 溶質原子の位置の関数として求めよ. ただし, 末尾参考4に示した刃状転位の応力場を利用し, 導出過程も記述すること.
- 問4 溶質原子の刃状転位周囲の安定位置は, 溶質原子と溶媒原子の原子サイズの大小関係に依存する. $r_s < r_M$ および $r_s > r_M$ の場合の溶質原子の安定位置を弾性相互作用エネルギーの観点から説明せよ.

材料基礎学 A

【参考1：テンソル計算における総和規約】

テンソルの計算における総和規約では、一つの項に同じ添え字が二回現れる場合、その添え字について総和をとる。例えば、 $a_i b_i$ や $a_{ij} b_{ij}$ ($i, j = 1, 2, 3$) の計算は下のようになる。

$$a_i b_i = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3$$

$$a_{ij} b_{ij} = a_{11} b_{11} + a_{12} b_{12} + a_{13} b_{13} + a_{21} b_{21} + a_{22} b_{22} + a_{23} b_{23} + a_{31} b_{31} + a_{32} b_{32} + a_{33} b_{33}$$

【参考2：Gauss の発散定理】

ある閉曲面 s で囲まれた領域 V において、 \vec{n} を曲面 s の法線ベクトル、 \vec{A} を位置 x のベクトル関数であるとする、Gauss の発散定理より、

$$\int_V \nabla \cdot \vec{A} dx = \int_s \vec{A} \cdot \vec{n} ds$$

と表され、体積積分が面積積分に変換される。ゆえに以下を得る。

$$\int_V \frac{\partial A_i}{\partial x_i} dx = \int_V \left(\frac{\partial A_1}{\partial x_1} + \frac{\partial A_2}{\partial x_2} + \frac{\partial A_3}{\partial x_3} \right) dx = \int_V \nabla \cdot \vec{A} dx = \int_s \vec{A} \cdot \vec{n} ds = \int_s A_i n_i ds$$

【参考3：Dirac のデルタ関数と Heaviside の階段関数について】

Dirac のデルタ関数 $\delta(x)$ と Heaviside の階段関数 $H(x)$ は次のような性質をもった関数である。

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & (x=0) \\ 0 & (x \neq 0) \end{cases}, \quad \int_{-a}^a \delta(x) dx = 1 \quad (\text{ここで } a \text{ は任意の正の数})$$

$$\int_{y_1}^{y_2} f(y) \delta(y-x) dy = \begin{cases} f(x) & (y_1 < x < y_2) \\ 0 & (\text{上記以外の場合}) \end{cases}$$

$$H(x) = \begin{cases} 1 & (x > 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases}, \quad \delta(x) = \frac{dH(x)}{dx}$$

【参考4：刃状転位周囲の応力場】

$x_1 x_2 x_3$ 直交座標系において、バーガースベクトル \vec{b} が x_1 軸正方向に平行であり、転位線方向が x_3 軸正方向である刃状転位が等方弾性体中の x_3 軸上にあるときの刃状転位周囲の応力場は、 μ を剛性率、 ν をポアソン比として、次のようになる。ただし $b = |\vec{b}|$ である。

$$\left(\begin{array}{cc} -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_2(3x_1^2 + x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_1(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & 0 \\ \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_1(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_2(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\mu \nu b}{\pi(1-\nu)} \frac{x_2}{(x_1^2 + x_2^2)} \end{array} \right)$$

平成 29 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】

二元系合金の組織形成過程は非平衡過程であるが、ここでは熱力学を用いてその過程を考察しよう。次の《文章 A》と《文章 B》を読んで、問に答えよ。以下では、気体定数を R とし、簡単のため原子空孔は考えない。また、相界面では局所平衡が成立しているとする。

《文章 A》 A-B 二元系の正則溶体近似では、 i 相の 1 モルあたりの相互作用パラメータを Ω^i 、B の組成 (モル分率) を x 、ならびに温度を T として、 i 相の 1 モルあたりのギブズエネルギー $G^i(x, T)$ は以下のように表される。

$$G^i(x, T) = (1-x)G_A(T) + xG_B(T) + \Omega^i (\text{ア}) + RT \{ x \ln x + (1-x) \ln(1-x) \} \quad (1)$$

ただし、 $G_A(T)$ 、 $G_B(T)$ はそれぞれ純 A および純 B からなる相の温度 T における 1 モルあたりのギブズエネルギーである。このとき、 i 相における A および B の 1 モルあたりの化学ポテンシャル $\mu_A^i(x, T)$ 、 $\mu_B^i(x, T)$ は、それぞれ

$$\mu_A^i(x, T) = \text{イ} \quad (2)$$

$$\mu_B^i(x, T) = \text{ウ} \quad (3)$$

となる。また、 $G^i(x, T) = \text{エ} \mu_A^i(x, T) + \text{オ} \mu_B^i(x, T)$ である。

次に、正則溶体近似を用い、古典的核生成理論に基づいて核生成成長型の相変態を考えよう。図 1 は仮想的な A-B 二元系状態図、ならびに温度 T_2 における α 相、 β 相、 γ 相の組成-ギブズエネルギー曲線を示している。 α 相、 β 相、 γ 相は全て固相であり、モル体積 V_m は全ての相で等しいとする。また、 α 相における相互作用パラメータを Ω^α とする。

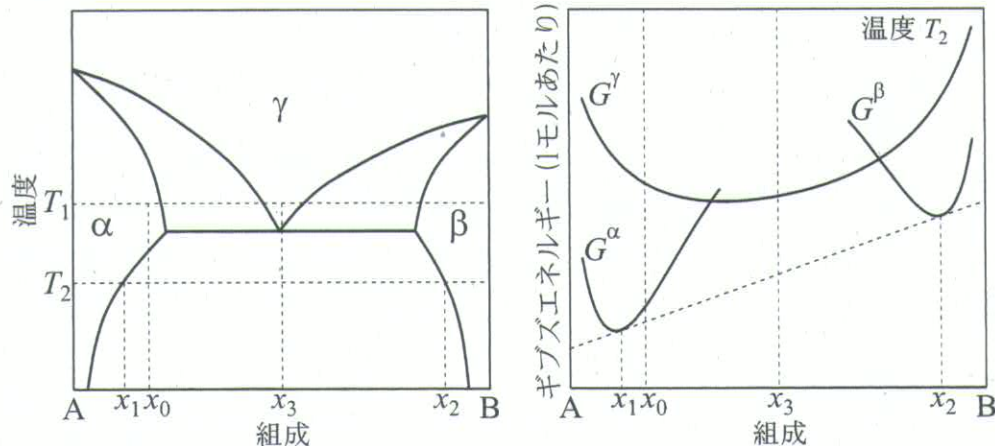


図 1

材料基礎学 B

図1の状態図において、組成 x_0 の合金を温度 T_1 で十分な時間保持したのち、温度 T_2 に急冷し、その温度で保持すると、 α 相の過飽和固溶体から組成 x_2 をもつ β 相の核が生成した。このとき、核生成の駆動力 (1 モルあたり) $\Delta G_v (> 0)$ は、

$$\Delta G_v = \Omega^\alpha (\text{カ}) + RT_2 (\text{キ}) \quad (4)$$

と表される。(4) 式の右辺第1項は (あ){正 / 負} である。また、温度 T_2 が下がると ΔG_v は (い){増加 / 減少} する。

核生成は駆動力に応じた核生成頻度でおこる。そこで、単位時間単位体積あたりの核生成頻度 I^* を以下で考えていこう。

まず、半径 r の球状核1つの生成に伴うギブズエネルギー変化 $\Delta g_n(r)$ を考える。ここで、臨界核半径 r^* は、 $\Delta G_v, V_m$ および α/β 界面の界面エネルギー σ を用いて ク と表される。また、 $\Delta g_n^*(= \Delta g_n(r^*))$ は $\Delta G_v, V_m, \sigma$ を用いて ケ と表される。 ΔG_v が増加すれば、 Δg_n^* は (う){増加 / 減少} する。

ここで、核が形成されるためには母相と異なる組成領域が形成され、この領域が α 相から β 相へ変化する必要がある。この領域をエンブリオと呼ぶ。系内ではある確率で種々の大きさのエンブリオが生成しうるが、 $\Delta g_n(r)$ の関数を考えると、 r^* 以上の半径をもつエンブリオのみが、生成後に自発的に成長することができる β 相の核となりうる。ここでは簡単のため、半径 r^* のエンブリオ(これを臨界核と呼ぶ)の生成頻度が核生成頻度を定めるものとし、核生成頻度が単位体積あたりの臨界核数 N_c に比例するとして、以下これを求めよう。

単位体積あたりの原子数が N の系を考え、臨界核を構成している原子数を $n (< N)$ とする。このとき、系を N/n 個の領域に区切り、1つの領域には1個の臨界核を配置するとき、 N_c 個の臨界核をランダムに配置する場合の数は N, n, N_c を用いて コ と表される。これを用いて、温度 T_2 における N_c 個の臨界核の生成に伴う単位体積あたりのギブズエネルギー変化 Δg_c は、ボルツマン定数を k として、

$$\Delta g_c(N_c) = N_c \Delta g_n^* - kT_2 \ln(\text{コ} \times n^{N_c}) \quad (5)$$

と表される。(5) 式の右辺第1項から臨界核生成によってギブズエネルギーは増加することになるが、第2項の配置のエントロピーによるエネルギー利得がある。そこで、温度 T_2 における N_c の最尤値 (確率的に最も取り得る値) \hat{N}_c は、熱力学的平衡と同じ取り扱いをすれば、 $N, k, T_2, \Delta g_n^*$ を用いて $\hat{N}_c = \text{サ}$ と表される。ただし、 $N \gg n\hat{N}_c$ である。

臨界核が成長して析出粒子となるためには、半径が r^* より大きくなる必要がある。B 原子が拡散により母相から臨界核に流入することで臨界核の半径は大きくなるため、単位時間あたりに臨界核が析出粒子になる頻度 Γ は B 原子の流束に比例する。つまり、 Γ は B 原子

材料基礎学 B

の固有拡散係数に (え) {比例 / 反比例} する。

以上から, I^* は \hat{N}_c と Γ の積で表される. $\Delta g_n^* =$, $\hat{N}_c =$ より \hat{N}_c は温度上昇に伴い (お) {増加 / 減少} する. また, Γ は温度上昇に伴って (か) {増加 / 減少} する. したがって, 核生成頻度 I^* と温度 T との関係は (き) {単調増加 / 単調減少 / ある温度でピークをもつ} 曲線となる.

問1 空欄 ~ を適切な式で埋めよ. については導出過程も示せ. 必要があれば, スターリングの近似式 $\ln X! \cong X \ln X - X$ を用いよ.

問2 (あ) ~ (き) について, { } の中から適切な語句を選び, 解答欄に○をつけよ.

問3 臨界核の配置に関する場合の数が, (5) 式にあるように, $\times n^{N_c}$ と表される理由について説明せよ.

(ヒント) たとえば, 二次元において $n=4$ の場合は図2のような配置が考えられる.

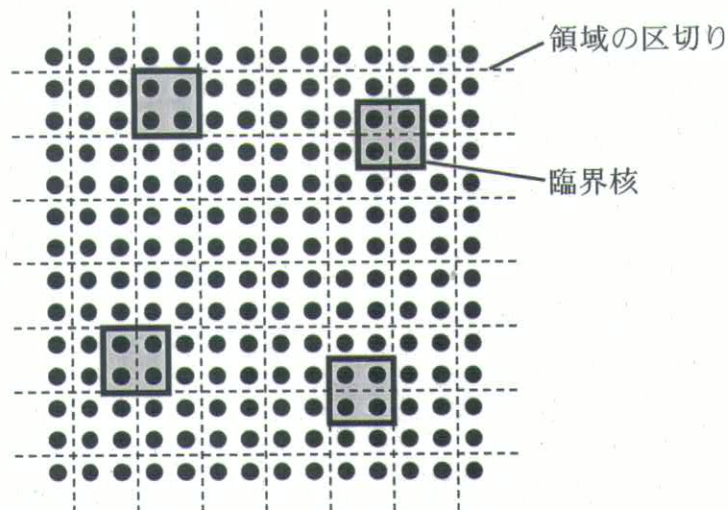


図2

材料基礎学 B

《文章 B》 図1の状態図において、組成 x_3 の合金を温度 T_1 から温度 T_2 に急冷し、その温度で保持した場合は共析変態がおこる。図3はその様子を模式的に示しており、時刻 t_1 は急冷直後である。この相変態においては、時刻 t_2 において、 γ 相の過飽和固溶体から結晶粒界上で α 相と β 相の核が生成した。その後、時刻 t_3 で見られるように、 α 相と β 相が互いに隣接して生成・成長する。鉄鋼材料におけるパーライトは、このように2つの相が協調的に核生成・成長することで形成される共析変態組織の一つである。

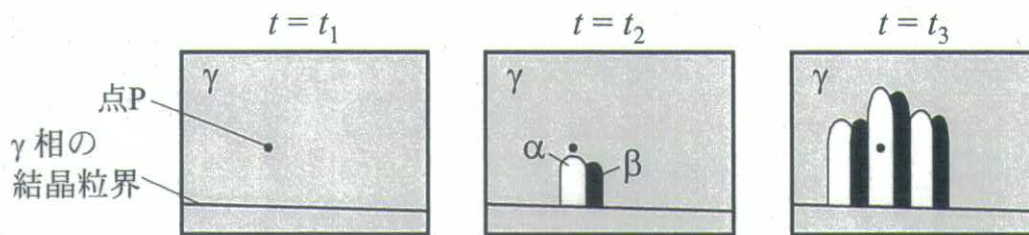


図3

問4 図3のような共析変態の組織形成過程について以下の問に答えよ。

- 解答用紙の組成-ギブズエネルギー曲線上に共析変態の駆動力、および核生成の駆動力を矢印で示せ。ただし、補助線などを利用して根拠がわかるようにせよ。
- 図3のような組織形成過程となる理由を説明せよ。

問5 図3のように組織が変化した場合、図中の点Pにおける組成 x の時間変化を、 α 相と β 相の成長界面前方の拡散場の大きさを考慮して解答用紙のグラフに示せ。また、グラフに示したように変化する理由を、拡散場の大きさに言及して説明せよ。

材料基礎学 B

[問題 2]

膜を介して接触した電解質水溶液について記述した《文章 A》と《文章 B》を読み、以下の間に答えよ。

《文章 A》 図 1 に示すように、膜によって隔てられた水相 1 と水相 2 を考える。水相 1 は X^+ と L^- からなる高分子電解質（高分子鎖に多数の電離可能な官能基をもつ高分子）水溶液、水相 2 は X^+ と A^- からなる電解質水溶液である。ここに示す系は以下のような性質をもつものとする。

- ・ 塩 XA は水溶液中で X^+ と A^- へ完全に電離する。
- ・ 高分子電解質は、高分子鎖に 1 価の負電荷をもつアニオン L^- が固定されており、その対イオンは X^+ である。 X^+ と L^- も完全に電離する。
- ・ 水の自己解離は無視できるものとし、ここでは考えない。
- ・ 高分子鎖の体積も無視できるものとし、 L^- は水中で均一に分散していると考えてよい。
- ・ X^+ と A^- は膜を自由に移動できるが、高分子と水は膜を通過できない。
- ・ 水相 1 と水相 2 は液面が等しくなるように同量注がれている。また、膜を介したイオンの移動によって両水相の体積は変動しない。
- ・ X^+ , A^- , L^- の活量はそれぞれの水相における当該イオンの容量モル濃度に近似でき、これらの濃度を $[X^+]$, $[A^-]$, $[L^-]$ と表す。

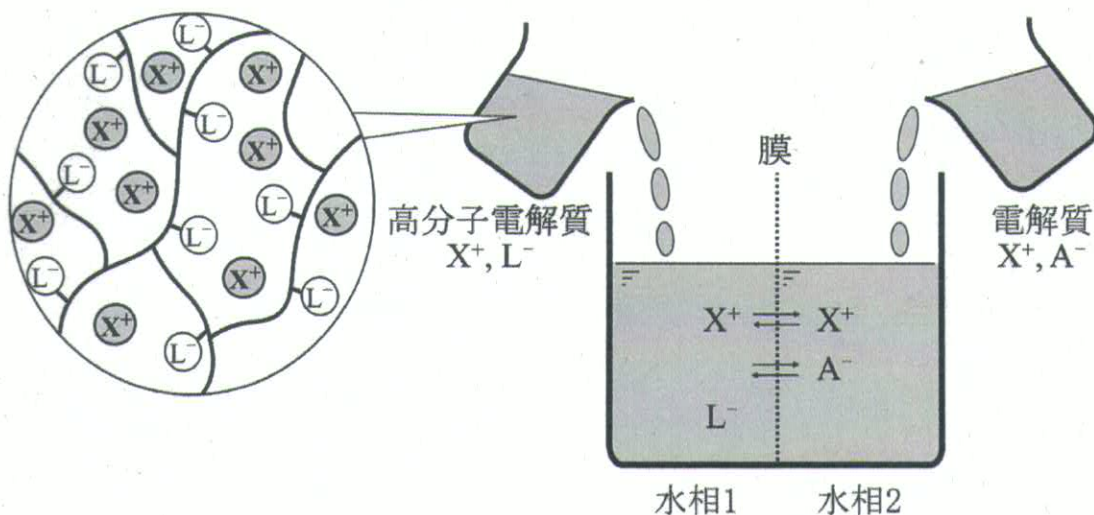


図 1 膜を介して接触した電解質水溶液の模式図

あらかじめ調製した水相 1 へ注ぐ高分子電解質水溶液中の X^+ および L^- の濃度を $[X^+]_{1,initial}$ および $[L^-]_{initial}$ とし、水相 2 へ注ぐ水溶液の X^+ および A^- の濃度を $[X^+]_{2,initial}$ および $[A^-]_{2,initial}$ と

材料基礎学 B

する。いま、 $[X^+]_{1,initial} = [X^+]_{2,initial}$ のときを考えると、これらの水溶液を膜を介して接触させた場合、膜を介して X^+ と A^- のイオンが移動し、その再配置に応じて (a) 両水相の内部電位に差が生じた状態で平衡に達する。この再配置のとき、すなわち平衡に達するまでの過程で A^- は (あ) { 水相 1 から水相 2 / 水相 2 から水相 1 } へと移動している。

では、その内部電位の差が熱力学的にどのように記述されるか考察しよう。水相 1 および水相 2 の内部電位を ϕ_1 および ϕ_2 とし、まず X^+ に着目する。水相 1 および水相 2 における X^+ の標準化学ポテンシャルをそれぞれ μ_{1,X^+}° および μ_{2,X^+}° 、 X^+ の濃度を $[X^+]_1$ および $[X^+]_2$ 、ファラデー定数を F 、液温を T 、気体定数を R とすれば、水相 1 における電気化学ポテンシャル $\tilde{\mu}_{1,X^+}$ は $\tilde{\mu}_{1,X^+} = \text{ア}$ 、水相 2 における電気化学ポテンシャル $\tilde{\mu}_{2,X^+}$ は $\tilde{\mu}_{2,X^+} = \text{イ}$ とそれぞれ表される。これらの関係から、膜に生じる電位差 $\Delta\phi = \phi_1 - \phi_2$ について整理すると、 $\Delta\phi = \text{ウ} + \text{エ}$ と表される。ここから分かるように、膜に生じる電位差は、単一の電極と電解質水溶液の電位差に対するネルンスト式と同じように記述される。同一化学種の標準化学ポテンシャルが膜の両側で同じであるとすれば、 $\Delta\phi = \text{エ}$ となる。また、 A^- についても X^+ と同様に考えられ、平衡に達した際の水相 1 および水相 2 における A^- の濃度を $[A^-]_1$ および $[A^-]_2$ とすれば、 $\Delta\phi = \text{オ}$ と表される。これらの関係にもとづき、膜を介した $[X^+]$ と $[A^-]$ の平衡は カ で示されることが分かる。平衡時の水相 1 における L^- の濃度を $[L^-]$ とすれば、電気的中性の式は、水相 1 において キ 、水相 2 において ク となる。 $\text{カ} \sim \text{ク}$ の関係より $[L^-]$ と $[X^+]_2$ を用いて $[X^+]_1 = \text{ケ}$ と表され、両水相における X^+ の濃度に差が生じた状態で平衡に達することが確認できる。

上記の平衡状態から、水相 2 へ塩 ZA を少量添加して静置したところ、両水相の内部電位の差が変動した。塩 ZA も Z^+ と A^- に完全に電離し、 Z^+ も膜を通過できる。また、 Z^+ の活量も他のイオンと同様に容量モル濃度に近似できるものとする。水相 1 と水相 2 を接触させて静置し、新たな平衡に達した際の水相 1 および水相 2 における Z^+ の濃度を $[Z^+]_1$ と $[Z^+]_2$ 、同じく X^+ の濃度を $[X^+]_{1,Z}$ と $[X^+]_{2,Z}$ で表せば、このときの X^+ と Z^+ の平衡関係は $[Z^+]_1$ 、 $[Z^+]_2$ 、 $[X^+]_{1,Z}$ 、 $[X^+]_{2,Z}$ を用いて コ となる。 $\Delta\phi$ の絶対値を $|\Delta\phi|$ とすると、塩 ZA を少量添加した平衡時の $|\Delta\phi|$ はそれを含まない平衡時と比較して (い) { 増加 / 減少 } する。

問 1 空欄 $\text{ア} \sim \text{コ}$ を適切な式、または等式で埋めよ。

問 2 下線部(a)について、膜がある有限の厚みをもつ場合、平衡時の X^+ の化学ポテンシャル、 X^+ の電気化学ポテンシャル、電場、電位の分布を解答用紙の図中へ模式的に描け。

材料基礎学 B

問3 (あ) および (い) について, 適切な語句を選択し解答欄の正しい方に○を付けよ. また, (い) についてはその根拠を記述せよ.

《文章 B》 一般的に, pH 測定用のガラス電極は図 2 に示すように 2 つの電極 (電極①と電極②) から構成され, 電極①は希薄 HCl 水溶液中に, 電極②は濃厚 KCl 水溶液中に浸漬されている. 電極①はガラス膜を介して試験液と接し, 電極②は液絡を介して試験液と接している. 実用上はガラス膜に接触した 2 つの水溶液それぞれの水素イオン濃度に起因した内部電位の差により pH を測定できることが知られている. すなわち, 試験液に浸漬した際に電極①と電極②の間に生じる電位差を測定することで電解液の pH を知ることができる.

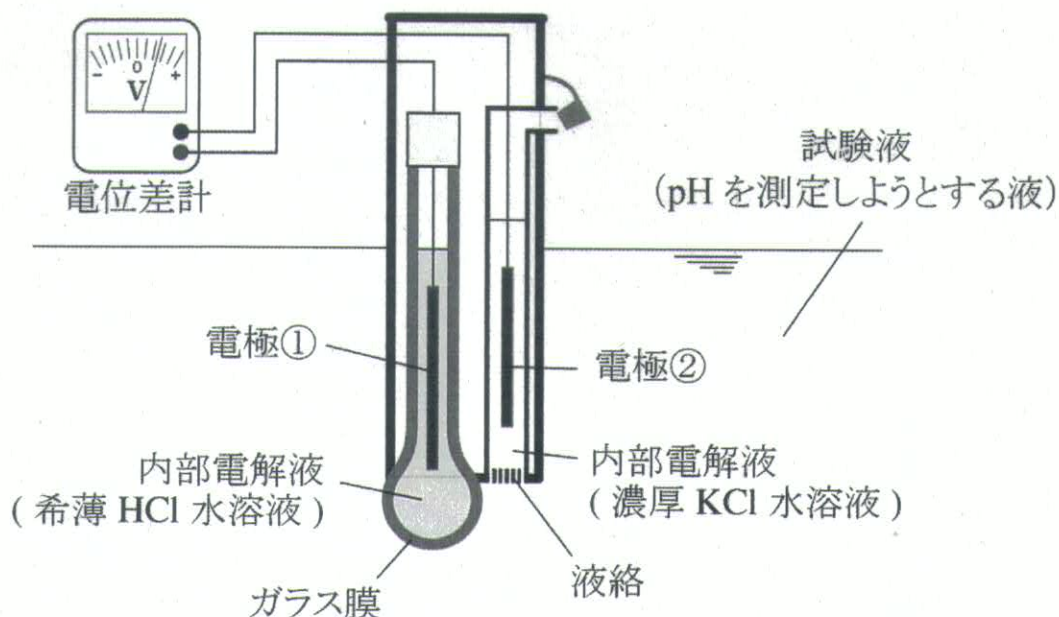


図 2 一般的なガラス電極を用いた pH 測定の様式図

- 問 4 電極①と電極②には一般に, 同種の特徴的な電極が用いられる. どのような電極が用いられるか, その半電池反応 (電位決定反応) を書け.
- 問 5 問 4 で示した半電池反応からなる電極が, 図 2 に示す電極①と電極②として適している理由を説明せよ.
- 問 6 《文章 A》での考察結果を参考に, 試験液の pH が 1 上昇したときに測定される電極②に対する電極①の電位は何 mV 変化するか, 有効数字 3 桁で答えよ. また, その導出過程も示せ. 試験液の液温は 20°C , 電気素量 e を $1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$, ボルツマン定数 k_B を $1.381 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ とせよ.

材料基礎学 B

[問題 3]

以下は、分子中の電子状態および分子の構造を近似的に考察したものである。文章を読んで、問1～問3に答えよ。

原子軌道の線形結合を用いる方法により、異核2原子分子 AB における電子状態の近似解を求める。簡単のため、原子 A と B の規格化された実数型原子軌道を1つだけ考え、それぞれを ϕ_A , ϕ_B とする。まず、2原子分子 AB における分子軌道 Ψ を、係数 c_A , c_B を使って $\Psi = c_A\phi_A + c_B\phi_B$ と書く。2原子分子 AB における一電子ハミルトニアンを \hat{H} としたとき、シュレーディンガー方程式 $\hat{H}\Psi = E\Psi$ の近似解は、レイリー・リッツの変分法により、エネルギー期待値を最小とする分子軌道として求められる。共鳴積分 H_{ij} および重なり積分 S_{ij} を

$$H_{ij} = \int \phi_i(\mathbf{r}) \hat{H} \phi_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (H_{ij} = H_{ji}), \quad S_{ij} = \int \phi_i(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad i, j \in \{A, B\} \quad (1)$$

と定義し、 $H_{AA} = \epsilon_A$, $H_{BB} = \epsilon_B$ と置くと、永年方程式 が得られる。重なり積分 $S_{AB} = 0$ として永年方程式 を解くことにより、分子軌道のエネルギー固有値 E は、 と表される。また、係数比 c_A/c_B は、 ϵ_A , ϵ_B , H_{AB} , E のうち必要なものを用いて と表される。

次に、マリケンの電子密度解析により、分子中での電荷分布を定量的に解析する。ここで、原子 A, B とともに、化学結合に寄与する電子は1つだけ存在し、この2個の電子が結合性の分子軌道を占有するとしたとき、分子中の原子 A および B の有効電荷 Q_A , Q_B は、規格化された係数 c_A , c_B を用いて、

$$Q_A = 2c_A(c_A + c_B S_{AB}), \quad Q_B = 2c_B(c_B + c_A S_{AB}), \quad Q_A + Q_B = 2 \quad (2)$$

で与えられる。ここで、重なり積分を $S_{AB} = 0$ とし $\epsilon_A = 0$, $H_{AB} = -0.25$ と固定する。 $\epsilon_B = 1.0, 0, -1.0$ と変化させる場合を考えると、結合性分子軌道のエネルギー固有値は、それぞれ , , となる。よって、それぞれの場合について、 Q_A , Q_B の大小関係を考えると、 $\epsilon_B = 1.0$ のとき , $\epsilon_B = 0$ のとき , $\epsilon_B = -1.0$ のとき となる。

同様の方法により、分子構造を予測することができる。ここでは、6個の価電子をもつメチレン分子 CH_2 の構造を予測する。図1のような直交座標軸をとり、炭素原子 C の位置を原点 O とする。分子の2回回転軸を x 軸、分子面に垂直な方向を z 軸とする。また、水素原子 H は、原点 O から距離 a 離れた M および N の位置に存在し、結合角は 2β とする。

材料基礎学 B

まず、炭素原子 C の $2s$ 軌道は、 $2p$ 軌道よりもエネルギーが十分下であり、非結合の軌道であると考えられる。よって、分子軌道を表現する実数型原子軌道として、規格化された水素様原子の軌道を導入し、炭素原子 C の $2p_x, 2p_y, 2p_z$ 軌道 $\{\psi_{C,px}, \psi_{C,py}, \psi_{C,pz}\}$ および M, N に位置する水素原子 H の $1s$ 軌道 $\psi_{H,s}^{(M)}, \psi_{H,s}^{(N)}$ を考える。(文末参考のこと。) これら 5 個の原子軌道の線形結合により分子軌道 Ψ が表現されるが、分子の対称性により解の形が限定される。つまり、分子は xz 面に対称であるため、分子軌道 Ψ はこの面に対して、対称か反対称なものしか許されない。よって、異なる原子軌道間の重なり積分をすべてゼロとすると、 CH_2 の分子軌道は、

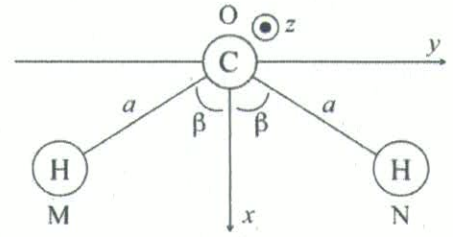


図1 メチレン分子の構造.

$$\Psi^{(S)} = c_s^{(S)} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{H,s}^{(M)} + \psi_{H,s}^{(N)}) \right] + c_p^{(S)} \psi_{C,px} \quad (3)$$

で表される対称解 2 個 (結合性軌道, 反結合性軌道),

$$\Psi^{(A)} = c_s^{(A)} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{H,s}^{(M)} - \psi_{H,s}^{(N)}) \right] + c_p^{(A)} \psi_{C,py} \quad (4)$$

で表される反対称解 2 個 (結合性軌道, 反結合性軌道), および非結合性軌道 $\Psi = \psi_{C,pz}$ の 5 個の解をもつ。

CH_2 における一電子ハミルトニアンを \hat{H} とすると、シュレーディンガー方程式 $\hat{H}\Psi = E\Psi$ から、対称解および反対称解それぞれについて永年方程式を立てることができる。まず、対称解について永年方程式を立てる。異なる原子軌道間の共鳴積分は、炭素原子 C と水素原子 H の原子軌道間のみ値をもつものとし、それ以外はゼロとする。また共鳴積分の対角要素は

$$\int \psi_{C,px}(\mathbf{r}) \hat{H} \psi_{C,px}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int \psi_{C,py}(\mathbf{r}) \hat{H} \psi_{C,py}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int \psi_{C,pz}(\mathbf{r}) \hat{H} \psi_{C,pz}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = E_{C,p} \quad (5)$$

$$\int \psi_{H,s}^{(M)}(\mathbf{r}) \hat{H} \psi_{H,s}^{(M)}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int \psi_{H,s}^{(N)}(\mathbf{r}) \hat{H} \psi_{H,s}^{(N)}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = E_H$$

と置き換えられると仮定する。このとき、対称解に対する 2×2 永年方程式は、

$$\begin{vmatrix} \boxed{\text{コ}} & \boxed{\text{シ}} \\ \boxed{\text{シ}} & \boxed{\text{サ}} \end{vmatrix} = 0 \quad (6)$$

と表される。

材料基礎学 B

次に、永年方程式の非対角項 を計算する。ここでは、非対角項 に含まれる結合角依存の共鳴積分を計算するため、新たな座標軸を考え、その座標軸に基づいた原子軌道を考える。まず、図2(a)に示す $\psi_{C,pX}$ と $\psi_{H,s}^{(N)}$ の間の共鳴積分を計算するため、座標軸を z 軸周りに回転させ、O から N に向かう方向に X 軸、それに垂直な方向に Y 軸を取り直す。その後、図2(b)および(c)のように、 $2p_x, 2p_y$ 軌道 $\{\psi_{C,pX}, \psi_{C,pY}\}$ を導入し、 $\psi_{C,pX}$ と $\psi_{C,pY}$ の線形結合により $\psi_{C,pX}$ を表現すれば、 $\psi_{C,pX} =$ $\psi_{C,pX} +$ $\psi_{C,pY}$ と表される。よって、距離 a によって決まる $\psi_{C,pX}, \psi_{C,pY}$ と $\psi_{H,s}^{(N)}$ との共鳴積分を

$$\int \psi_{C,pX}(\mathbf{r}) \hat{H} \psi_{H,s}^{(N)}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = -t \quad (t > 0), \quad \int \psi_{C,pY}(\mathbf{r}) \hat{H} \psi_{H,s}^{(N)}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0 \quad (7)$$

とすれば、 $\psi_{C,pX}$ と $\psi_{H,s}^{(N)}$ の間の共鳴積分は t, β を使って と表される。同様に、 $\psi_{C,pX}$ と $\psi_{H,s}^{(M)}$ の間の共鳴積分も計算する。図2(b)および(c)と同様に、O から M に向かう方向に X 軸、それに垂直な方向に Y 軸を取り直し、

$$\int \psi_{C,pX}(\mathbf{r}) \hat{H} \psi_{H,s}^{(M)}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = -t \quad (t > 0), \quad \int \psi_{C,pY}(\mathbf{r}) \hat{H} \psi_{H,s}^{(M)}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0 \quad (8)$$

とすると、最終的に、非対角項 は t, β を使って と書くことができる。よって、永年方程式を解くと、 $\bar{E} = (E_H + E_{C,p})/2$, $\Delta E = (E_H - E_{C,p})$, t, β を使い、対称解のエネルギー固有値は と得られる。反対称解についても同様に計算すると、エネルギー固有値は $\bar{E} \pm \sqrt{(\Delta E)^2 + 8t^2 \sin^2 \beta} / 2$ と表される。

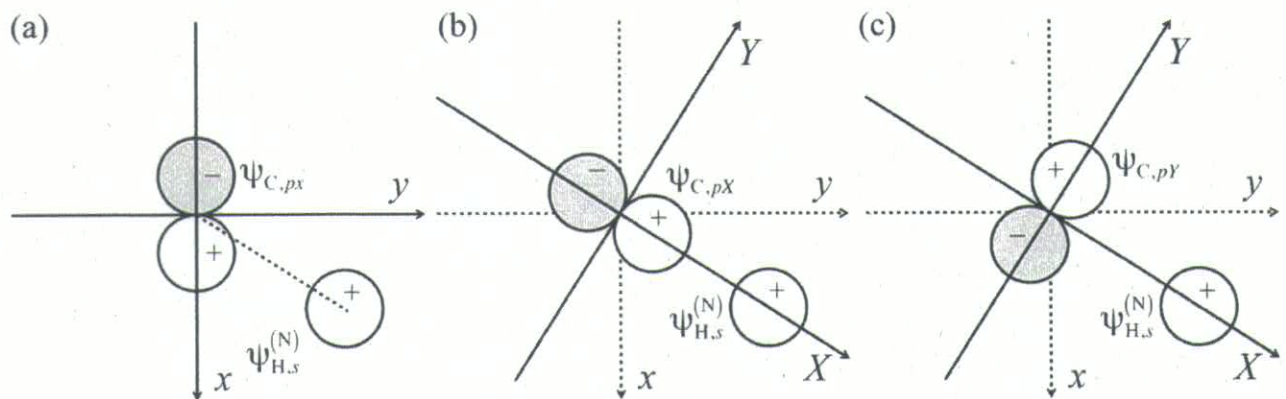


図2 $2p_x$ 軌道およびO からN に向かう方向に X 軸を取ったときの $2p_x, 2p_y$ 軌道。
+ および - 記号は原子軌道の位相である。

問1 ~ , ~ を適切な式または数値で埋めよ。
 については、積分記号を残したままでよい。 ~ については、等号もしくは不等号を使って、 Q_A と Q_B の大小関係を記入せよ。

材料基礎学 B

問2 メチレン分子 CH_2 におけるエネルギー固有値の基準を \bar{E} とし、さらに $\Delta E = t$ とする。結合角 2β を 90° から 180° まで変化させたときの対称解, 反対称解および非結合性軌道 $\Psi = \psi_{C,pz}$ のエネルギー固有値を解答欄の図に描き加えよ。問2の解答欄には、炭素原子 C の $2s$ 軌道のエネルギー固有値 $\epsilon_{C,s}$ (ここでは仮に $-2t$ とする) がすでに描かれている。

問3 問2を利用して、メチレン分子 CH_2 の構造を予測し、理由とともに解答欄に記入せよ。ここで、分子全体のエネルギーは、電子により占有されている分子軌道のエネルギー固有値の和により表現できるものとする。

(参考)

以下に、炭素原子 C の $2p_x, 2p_y, 2p_z$ 軌道および水素原子 H の $1s$ 軌道の具体形を示す。共鳴積分の計算の際、示された原子軌道の特徴を適切に利用すること。

水素様原子の軌道の動径成分は、 $\rho = 2Zr/na_0$ としたとき、

$$R_{1,0}(r) = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) \quad R_{2,1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \rho \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) \quad (9)$$

となる。ここで、 Z は原子番号、 a_0 はボーア半径、 r は中心からの距離、 n は主量子数である。炭素原子 C の $2p_x, 2p_y, 2p_z$ 軌道 $\{\psi_{C,px}, \psi_{C,py}, \psi_{C,pz}\}$ の具体形は、炭素原子 C の中心からの距離 r を使って、

$$\psi_{C,px}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{2,1}(r) \frac{x}{r} \quad \psi_{C,py}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{2,1}(r) \frac{y}{r} \quad \psi_{C,pz}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{2,1}(r) \frac{z}{r} \quad (10)$$

と表される。 $2p_x, 2p_y$ 軌道についても同様に与えられる。また、水素原子 H の $1s$ 軌道 $\psi_{H,s}^{(M)}, \psi_{H,s}^{(N)}$ の具体形は、位置 M および N からの距離 r_M, r_N を使って、

$$\psi_{H,s}^{(M)}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} R_{1,0}(r_M) \quad \psi_{H,s}^{(N)}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} R_{1,0}(r_N) \quad (11)$$

と表される。

平成 29 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]

ベクトル a , b および行列 X , Y , Z を以下のように定義する. このとき問1~問3に解答せよ.

$$a = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

問1 XY および YX の固有値と長さ1の固有ベクトルを答えよ.

問2 以下の条件を満たす行列 P , Q を, X , Y の線形結合を用いて表せ.

$$\begin{aligned} Pa &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} & Pb &= a \\ Qa &= b & Qb &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

問3 行列 R を以下のように定義する.

$$R = X \sin \theta \cos \phi + Y \sin \theta \sin \phi + Z \cos \theta$$

この R の固有値を求め, また R について長さ1の固有ベクトルを $\cos(\theta/2)$, $\sin(\theta/2)$, $e^{i\phi}$ を用いて表せ. ただし $0 < \theta < \pi$, $0 \leq \phi < 2\pi$ であるとする.

[参考]

u , v を複素数とするとき, ベクトル $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ の長さは $\sqrt{uu^* + vv^*}$ と定義される.

ここに u^* , v^* は, それぞれ u , v の複素共役である.

工業数学

[問題 2]

以下の問1, 問2に解答せよ。ただし必要に応じて付録のラプラス変換表を用いて良い。

問1 抵抗値 R の抵抗, 容量 C のコンデンサ, 電圧 E の直流電源, およびスイッチ S からなる図1の回路について考える。初期状態ではスイッチ S は開いており, 回路は定常状態にある。

時刻 $t=0$ でスイッチ S を閉じるとき, コンデンサ両端の電圧 $v_C(t)$ が満たす微分方程式を電流 $i(t)$ を用いて作成し, $v_C(t)$ を $t>0$ に対して求めよ。ただし, $v_C(0) = v_0$ であり, また $v_0 < E$ である。

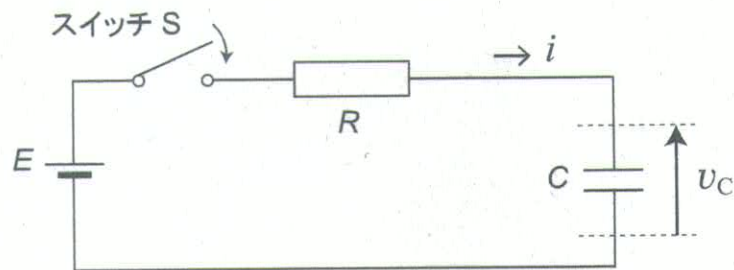


図1

問2 抵抗値 R の抵抗, インダクタンス L のコイル, 容量 C のコンデンサ, 電圧 E の直流電源, およびスイッチ S からなる図2の回路について考える。抵抗, コイル, コンデンサの両端の電圧をそれぞれ $v_R(t)$, $v_L(t)$, $v_C(t)$ とし, 電流 $i_{LC}(t)$, $i_R(t)$ を図2に示すように定める。初期状態でスイッチ S は閉じており, 回路は定常状態に達している。

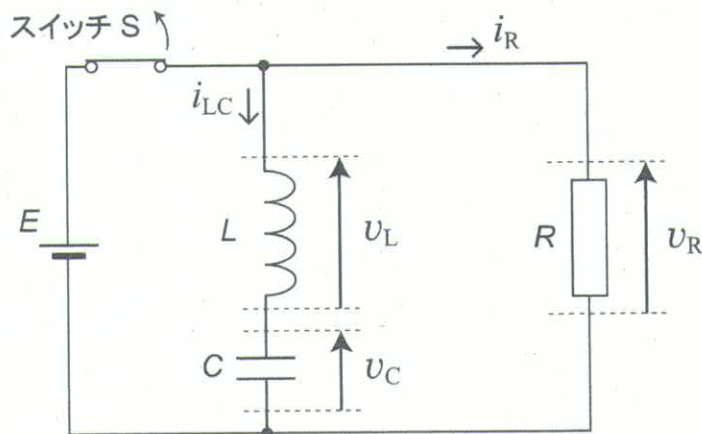


図2

工業数学

時刻 $t = 0$ でスイッチ S を開くとき、以下の (a), (b) に解答せよ。

(a) $C = 4L/R^2$ であるとき、 $v_R(t)$ を $t > 0$ に対して求めよ。

(b) $C = 4L/(5R^2)$ であるとき、同様に $v_R(t)$ を $t > 0$ に対して求めよ。

[参考]

抵抗値 R の抵抗、インダクタンス L のコイル、容量 C のコンデンサに流れる電流 i_R , i_L , i_C とそれぞれの素子両端の電圧 v_R , v_L , v_C とは次の関係にある。

$$v_R = Ri_R, \quad v_L = L \frac{di_L}{dt}, \quad i_C = C \frac{dv_C}{dt}$$

工業数学

[問題 3]

次の1次元熱伝導方程式を考える。

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2}$$

ここに α は熱拡散係数, $T(x,t)$ は位置 x , 時刻 t における温度を表している。この熱伝導方程式およびその解について, 以下の問1~問3に解答せよ。

問1 次のように定義される変数 u を導入する。

$$u = \frac{x}{2\sqrt{\alpha t}} \quad (t > 0)$$

今 T が u のみの関数であるとするとき, 熱伝導方程式は dT/du に対する微分方程式に変換されることを示せ。

問2 以下の条件の下で問1で求めた微分方程式を解き, $T(x,t)$ を求めよ。

$$\lim_{u \rightarrow -\infty} T = A \quad \lim_{u \rightarrow +\infty} T = B$$

ここに A, B は正の実定数である。

問3 温度 T_0 にある半無限の棒を考える。棒の端を $x=0$ とし, 棒は x の正の方向に伸びているものとする。時刻 t_1 ($t_1 > 0$) に端の温度を T_1 とし, 以降 T_1 に保持する。このとき, T が u のみの関数であると仮定し, 問1, 問2の結果を参照して, 位置 $x \geq 0$, 時刻 $t \geq t_1$ における棒の温度 $T(x,t)$ を求めよ。

[参考]

誤差関数 $\operatorname{erf}(x)$ は, 以下のように定義される関数である。

$$\operatorname{erf}(x) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\eta^2} d\eta$$

$\operatorname{erf}(x)$ は $x \rightarrow +\infty$ で1に収束する。

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \operatorname{erf}(x) = 1$$

工業数学

付録: ラプラス変換とその性質

$t < 0$ で $f(t) = 0$ であるような実関数 $f(t)$ のラプラス変換 $F(s) = \mathcal{L}[f(t)]$ は以下のように定義される.

$$F(s) = \mathcal{L}[f(t)] \equiv \int_0^{\infty} f(t)e^{-st} dt$$

ラプラス変換については, 以下の公式が成り立つ.

$$\mathcal{L}[af(t) + bg(t)] = aF(s) + bG(s)$$

$$\mathcal{L}[f(at)] = (1/a)F(s/a) \quad a \neq 0$$

$$\mathcal{L}[e^{-\alpha t}f(t)] = F(s + \alpha)$$

$$\mathcal{L}[f^{(n)}(t)] = s^n F(s) - s^{n-1}f(0) - s^{n-2}f^{(1)}(0) - \dots - f^{(n-1)}(0)$$

ただし上式において $G(s)$ は $g(t)$ のラプラス変換, $f^{(n)}(t)$ は $f(t)$ の n 次導関数である.

$$G(s) = \mathcal{L}[g(t)], \quad f^{(n)}(t) = \frac{d^n f(t)}{dt^n}$$

主な関数のラプラス変換の表を以下に示す.

$f(t)$	$F(s)$
1	$\frac{1}{s}$
t	$\frac{1}{s^2}$
$e^{-\alpha t}$	$\frac{1}{s + \alpha}$
$\frac{t^{n-1}}{(n-1)!}$	$\frac{1}{s^n}$
$\sin \omega t$	$\frac{\omega}{s^2 + \omega^2}$
$\cos \omega t$	$\frac{s}{s^2 + \omega^2}$