

2024年度（令和6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

- 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。
- 受験番号・氏名を解答冊子、問題冊子の※印の箇所に記入すること。
- 問題冊子は表紙と白紙1枚のほかに9ページである。
- 解答冊子は持ち帰ってはならない。問題冊子の取り扱いは監督者の指示に従うこと。
- 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。

受験番号	※
氏名	※

白紙

材料基礎学 A

[問題 1]

問 1. 面心立方金属(格子定数 a_1)の単結晶試料の塑性変形に関する《文章 A》を読んで、以下の設問に答えよ。

《文章 A》

荷重軸方位が[315]である面心立方金属の棒状単結晶試料の一軸引張変形において、最も初期に活動するすべり系(主すべり系)は([あ]) [い] である。一般に、[う] 転位は[え] すべりをしてすべり面を変えて運動することができる。上記の([あ]) [い] すべり系の場合、([あ])面上をすべり運動している完全転位の[う] 転位は、([お])面へと[え] すべりをすることができる。しかし、多くの面心立方金属では、完全転位は積層欠陥を挟んで2本の[か] 部分転位に分解しており、[え] すべりは困難である。上記の([あ]) [い] すべり系の場合、2本の[か] 部分転位のバーガースベクトルはそれぞれ[き] [く] と[け] [こ] となる。

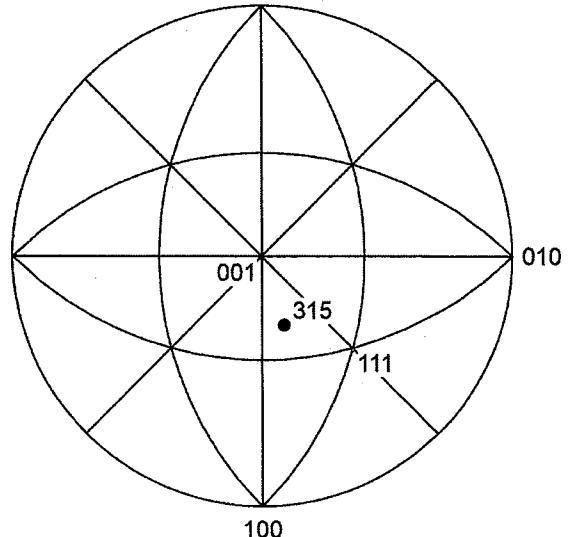


図 1.

- (1) 図 1 に示すステレオ投影図を参照して、次の《文章 A》中の空欄 [あ] ~ [こ] を適切な数字、式あるいは語句で埋めよ。
- (2) 《文章 A》中で下線を付した部分の記述について、その理由を簡潔に述べよ。
- (3) 荷重軸方位が[315]である面心立方金属単結晶を十分大きな変形量まで圧縮変形した場合、圧縮軸はどのような経路をたどって変化するかを解答用紙のステレオ投影図中に示し、そのような経路をたどる理由について簡潔に説明せよ。

材料基礎学 A

問 2. 単純立方構造を持つ純金属単結晶（剛性率 μ , ポアソン比 ν ($0 < \nu < 1/2$) を持つ等方弾性体とし, 格子定数は a_2 とする) を考える. ここで単純立方構造とは, 単純立方格子の各格子点に一つの原子を配置した構造である. 以下の設間に答えよ.

- (4) この結晶のすべり変形は, 最密結晶面をすべり面とし, 最密結晶方向をすべり方向として起こる. すべり面が(001)面の場合, すべり方向はいかなる方向になるかミラー指標で答えよ. 但し, 等価な方向のうち, 特定の一つのみを答えれば良い.
- (5) 設問(4)のすべり系のすべり面の面間隔と, すべり変形を担う転位（完全転位）のバーガース・ベクトル \vec{b} の大きさを a_2 を用いて表せ.
- (6) この結晶の(001)面には, $\frac{a_2}{2} <110>$ の変位の位置に安定かつ低エネルギーの積層欠陥が存在する. 設問(4)で答えたすべり系の完全転位に対して考えられる分解反応を答えよ.
- (7) 設問(5)の完全転位が積層欠陥を介して2本の部分転位(バーガース・ベクトル \vec{b}_1 および \vec{b}_2) に分解する反応について考える. それぞれの転位のライン・ベクトルは, \vec{l} , \vec{l}_1 , \vec{l}_2 とする. 2本の部分転位間の間隔 r は, 積層欠陥の張力と部分転位間の反発力の釣り合いにより決定され, 単位面積当たりの積層欠陥エネルギー γ_{SF} と以下の関係式で結び付けられる.

$$\gamma_{SF} = \frac{\mu}{2\pi r} (\vec{b}_1 \cdot \vec{l}_1)(\vec{b}_2 \cdot \vec{l}_2) + \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)r} |\vec{b}_1 \times \vec{l}_1| |\vec{b}_2 \times \vec{l}_2|$$

この式の右辺の第1項および第2項の物理的意味を答えよ.

- (8) 設問(7)の転位の分解反応に関する以下の《文章 B》を読み, 空欄 ~ を適切な数式あるいは語句で埋め, 選択肢 { そ } については, 解答欄の正しいものに○をつけよ. 但し, は μ と b のみ, は θ のみ, は ν のみの関数で, また は適切な語句で埋めること.

材料基礎学 A

《文章 B》

完全転位のバーガース・ベクトル \vec{b} とライン・ベクトル \vec{l} のなす角度を θ , 部分転位のバーガース・ベクトルの大きさを b とすると, 部分転位間の間隔 r は

$$r = \frac{1}{\pi \gamma_{SF}} \cdot \boxed{\text{さ}} \cdot \cos(\boxed{\text{し}}) \cdot \left(\frac{\boxed{\text{す}}}{1-\nu} \right)$$

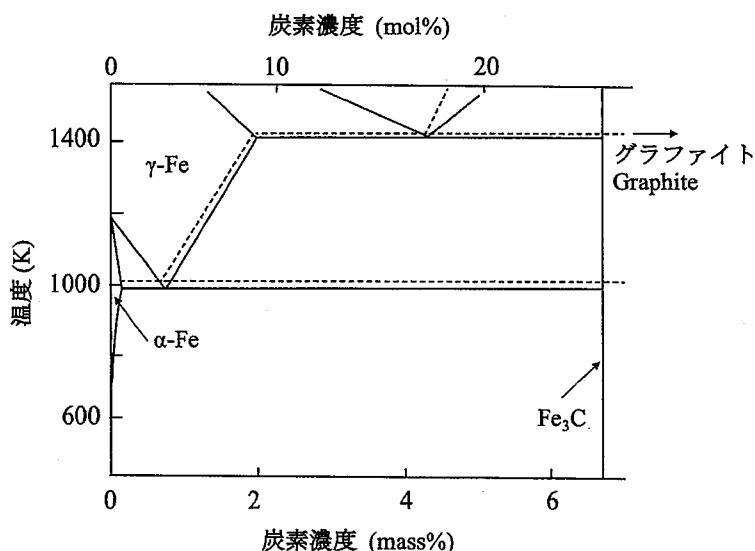
と求まる. 完全転位がらせん転位の場合, この反応での部分転位間の間隔 r は $\boxed{\text{せ}}$ の値となるため, 完全転位は {そ. 分解する・分解しない} ことを意味する.

- (9) 設問(8)で { そ } となる理由について, 設問(7)を参照して答えよ.

材料基礎学 A

[問題2]

以下の相変態と溶質の固溶に関する文章を読んで、問1から問4に答えよ。温度は絶対温度を表し、1気圧の一定圧力下での相変態を考える。なお、解答に際して文章中で示された記号以外の記号を用いる必要があれば、記号を明示的に定義した上で使用してもよい。



図は Fe-C 系状態図の概略であり、点線で示した α -Fe 相とグラファイト相を構成相とする

ア {平衡系・準安定系} と、実線で示した α -Fe 相と Fe_3C 相を構成相とする

イ {平衡系・準安定系} がある。 α -Fe 相と Fe_3C 相のイ {平衡系・準安定系}において、

ウ {体心立方構造・面心立方構造・六方最密構造・その他の構造} の γ -Fe を冷却したとき、添加元素や冷却条件に依存して、

エ {体心立方構造・面心立方構造・六方最密構造・その他の構造} の α -Fe 相に固溶する炭素量が変化し、多様な組織が形成する。

まず、Fe-C 系を基本とする炭素濃度 0.3 mass%程度の典型的な炭素鋼を 1400 K で十分な時間保持した後に冷却過程の組織形成を考える。十分にゆっくり冷却すると、拡散変態により γ 相中に α -Fe 相が析出した後に、微細な α -Fe 相と Fe_3C 相が交互に並んだオ組織が形成する。一方、十分に速く冷却すると、 γ -Fe 相が α -Fe 相と Fe_3C 相の共析温度よりも低い温度まで α -Fe 相の核生成がおこらないままで冷却され、ある温度まで過冷却すると無拡散変態であるカ変態が起こることがある。このカ変態では、

材料基礎学 A

キ {置換型元素・侵入型元素・その他の元素} である炭素を過飽和に固溶した α -Fe 相 (α' 相とする) が形成する。また、均一な γ -Fe 相を、 α -Fe 相と Fe₃C 相の共析温度以下、かつ、 α' 相が形成する温度以上にすみやかに冷却すると、ク 変態が起こることがある。このク 変態では、炭素を過飽和に固溶した α -Fe 相が形成するため、平衡状態よりも Fe₃C 相の体積分率が低くなることがある。

このような組織形成を利用した熱処理は、鉄鋼材料において広く利用されている。熱力学に基づいた場合、 α -Fe 相中への炭素の過飽和な固溶には、平衡状態からの逸脱である過冷却が必要である。そこで、次のように定義される A-B 二元系合金について、過冷却と溶質の固溶を考察する。同素変態を有する成分 A は、高温相である β 相と低温相である α 相が存在し、 α 相と β 相が平衡する温度は T_e である。成分 A を溶媒、成分 B を溶質として取り扱う A-B 二元系合金において、冷却過程あるいは温度を保持した過程における β 相から α 相への相変態と成分 B の α 相中への固溶を考えるため、成分 B のモル分率（以下、モル分率とする）を x とし、以下のように熱力学量などを定義する。

R 気体定数 [J mol⁻¹ K⁻¹]

$G_\alpha(x, T)$ モル分率 x 、温度 T における α 相のギブズエネルギー [J mol⁻¹]

$G_\beta(x, T)$ モル分率 x 、温度 T における β 相のギブズエネルギー [J mol⁻¹]

$G^{(0)}$ モル分率 $x = 0$ 、温度 T_e における α 相のギブズエネルギー [J mol⁻¹]

S_α モル分率 $x = 0$ 、温度 T_e における α 相のエントロピー [J mol⁻¹ K⁻¹]

S_β モル分率 $x = 0$ 、温度 T_e における β 相のエントロピー [J mol⁻¹ K⁻¹]

Ω_α α 相における成分 A と成分 B の相互作用係数（定数）[J mol⁻¹]

Ω_β β 相における成分 A と成分 B の相互作用係数（定数）[J mol⁻¹]

温度 T_e より高い温度に保持した物質量 1 mol、モル分率 x_0 の均一な β 相を、 α 相の核生成が起らぬまま α 相の析出が許される温度 T まで冷却して、すみやかに温度 T で保持する。温度 T に保持している過程で、モル分率 x_α 、物質量 m [mol] の α 相が析出して β 相のモル分率が x_β となった。ただし、 α 相および β 相の組成はそれぞれ均一とする。 α 相の析出による系のギブズエネルギーの変化 G_p は、 α - β 界面、 α 相あるいは β 相の粒界のエネルギーを無視できる場合、

材料基礎学 A

$$G_p = mG_\alpha(x_\alpha, T) + (1-m)G_\beta(x_\beta, T) - G_\beta(x_0, T) \quad (1)$$

である。 α 相の析出が許される熱力学的条件は、ギブズエネルギーの利得があることであり、

$$\lim_{m \rightarrow 0} \left(\frac{dG_p}{dm} \right) \leq 0 \quad (2)$$

となる。したがって、析出が許される α 相のモル分率 x_α は、温度 T と β 相の初期モル分率 x_0 に依存する。溶質保存などを考えて、式(2)の条件を $x_0, x_\alpha, T, G_\alpha, G_\beta$ およびこれらのモル分率に対する微分を用いて表すと、

$$\boxed{\text{ }} \leq 0 \quad (3)$$

となる。この条件から、(a) ギブズエネルギー曲線において析出が許される α 相のモル分率の範囲を幾何学的に説明できる。

ギブズエネルギーを正則溶体モデルで近似すると、物質量 1 molあたりの α 相と β 相のギブズエネルギーは、それぞれ、

$$G_\alpha(x, T) = (1-x) \cdot G_\alpha(0, T) + x \cdot G_\alpha(1, T) + RT\{(1-x)\ln(1-x) + x\ln x\} + \Omega_\alpha x(1-x) \quad (4)$$

$$G_\beta(x, T) = (1-x) \cdot G_\beta(0, T) + x \cdot G_\beta(1, T) + RT\{(1-x)\ln(1-x) + x\ln x\} + \Omega_\beta x(1-x) \quad (5)$$

となる。ここで、およそ温度 T_e 付近の温度領域 ($0.9T_e < T < 1.1T_e$) において、簡単のため

$$(1-x) \cdot G_\alpha(0, T) + x \cdot G_\alpha(1, T) = G^{(0)} - (T - T_e)S_\alpha \quad (6)$$

$$(1-x) \cdot G_\beta(0, T) + x \cdot G_\beta(1, T) = G^{(0)} - (T - T_e)S_\beta \quad (7)$$

が近似的に成り立つとする。このとき、それぞれのギブズエネルギーは、

$$G_\alpha(x, T) = G^{(0)} - (T - T_e)S_\alpha + RT\{(1-x)\ln(1-x) + x\ln x\} + \Omega_\alpha x(1-x) \quad (8)$$

$$G_\beta(x, T) = G^{(0)} - (T - T_e)S_\beta + RT\{(1-x)\ln(1-x) + x\ln x\} + \Omega_\beta x(1-x) \quad (9)$$

となる。

式(8)と式(9)のギブズエネルギーに基づいて、 変態やマッシブ変態のように β 相と等しいモル分率の α 相が形成する変態を考える。このような相変態が起こる熱力学的な必要条件は、式(3)において $x_\alpha = x_0$ を代入した条件である。 β 相の初期モル分率 x_0 に等しいモル

材料基礎学 A

分率の α 相の析出が許される最高の温度 T_0 は、

$$T_0 = \boxed{\quad \text{コ} \quad} \quad (10)$$

となる。つまり、 β 相が温度 T_0 以下まで過冷却することが、 力 変態やマッシブ変態が起こるための必要条件となる。

式(10)の温度 T_0 も含めた A-B 二元系合金状態図を考える。式(8)からモル分率 x_α の α 相における成分 A、成分 B の化学ポテンシャル $\mu_A^{(\alpha)}$ 、 $\mu_B^{(\alpha)}$ は、それぞれ、

$$\mu_A^{(\alpha)} = G_\alpha(x_\alpha, T) - \{ \boxed{\quad \text{サ} \quad} \} \cdot x_\alpha \quad (11)$$

$$\mu_B^{(\alpha)} = G_\alpha(x_\alpha, T) + \{ \boxed{\quad \text{サ} \quad} \} \cdot (1 - x_\alpha) \quad (12)$$

となる。 β 相の成分 A、成分 B の化学ポテンシャル $\mu_A^{(\beta)}$ 、 $\mu_B^{(\beta)}$ についても同様に記述される。 α 相と β 相の平衡条件である $\mu_A^{(\alpha)} = \mu_A^{(\beta)}$ 、かつ、 $\mu_B^{(\alpha)} = \mu_B^{(\beta)}$ を満たす α 相のモル分率 x_α と β 相のモル分率 x_β を求め、状態図を作成できる。この x_α と x_β を温度の関数として解析的を求めることは困難であるが、簡単な数値計算や幾何学な作業により十分な精度で状態図を作成することが可能である。

問 1 ア ~ ク について、適切な語句を答えよ。なお、{} 内に複数の語句が示されている場合は、もっとも適切な語句を一つ選んで解答用紙の選択肢を○で囲むこと。

問 2 ケ ~ サ について、適切な式を答えよ。

問 3 下線部 (a) について、解答用紙に示した α 相と β 相のギブズエネルギー曲線を用いて、析出が許される α 相の組成範囲を示せ。組成範囲を導出した根拠が分かるように図中に必要な事項や説明を記入すること。

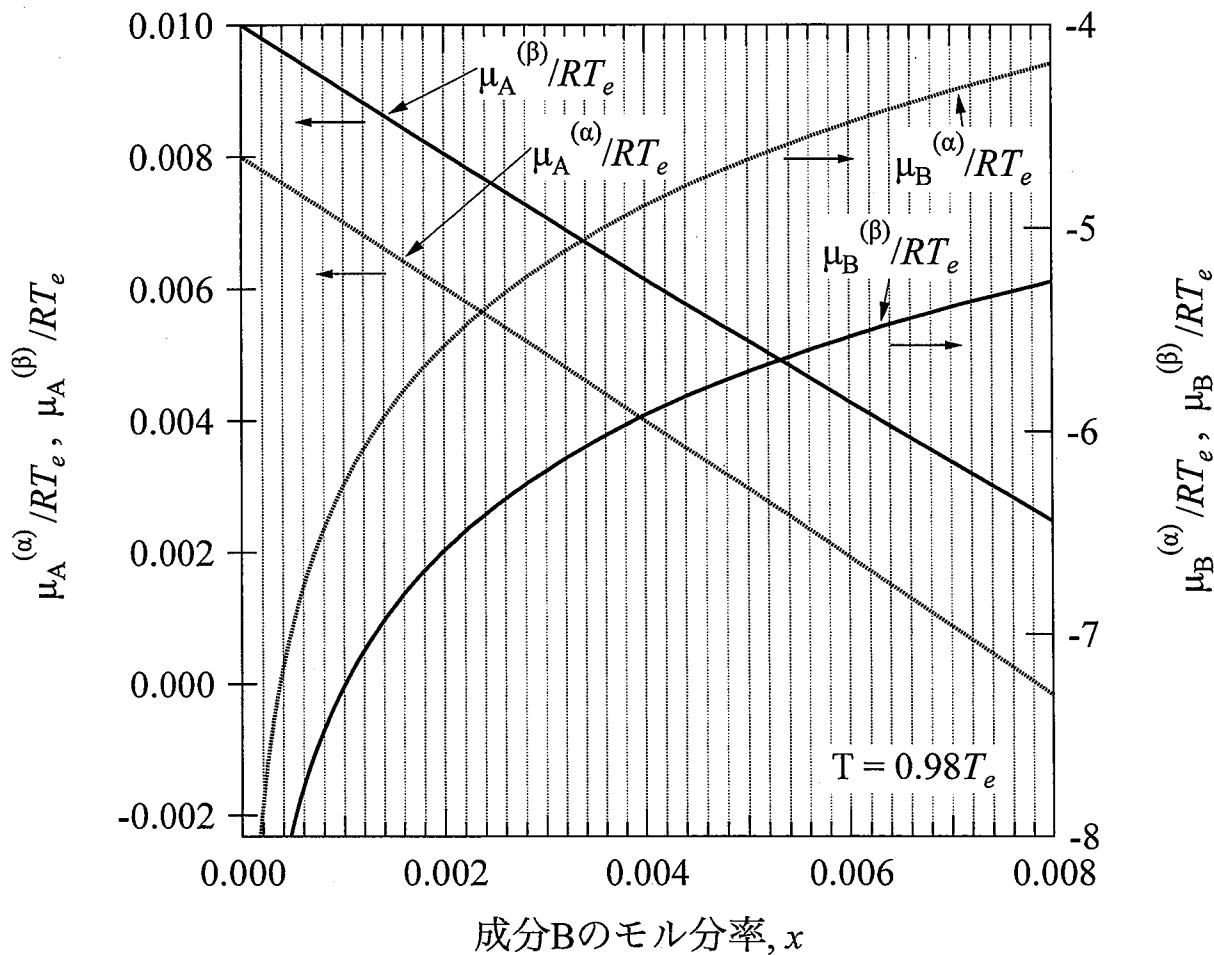
問 4 A-B 二元系合金の熱力学量などが、次のように与えられている。式(10)の温度 T_0 とモル分率 x の関係 (T_0 曲線) も含めた状態図を作成せよ。ただし、解答用紙の状態図における温度は、温度 T_e で規格化されていることに留意せよ。

$$G^{(0)} = 0, \quad S_\alpha = 0.4R, \quad S_\beta = 0.5R, \quad \Omega_\alpha = 0.5RT_e, \quad \Omega_\beta = -0.5RT_e$$

必要があれば、参考 1 および参考 2 を利用して解答しても良い。

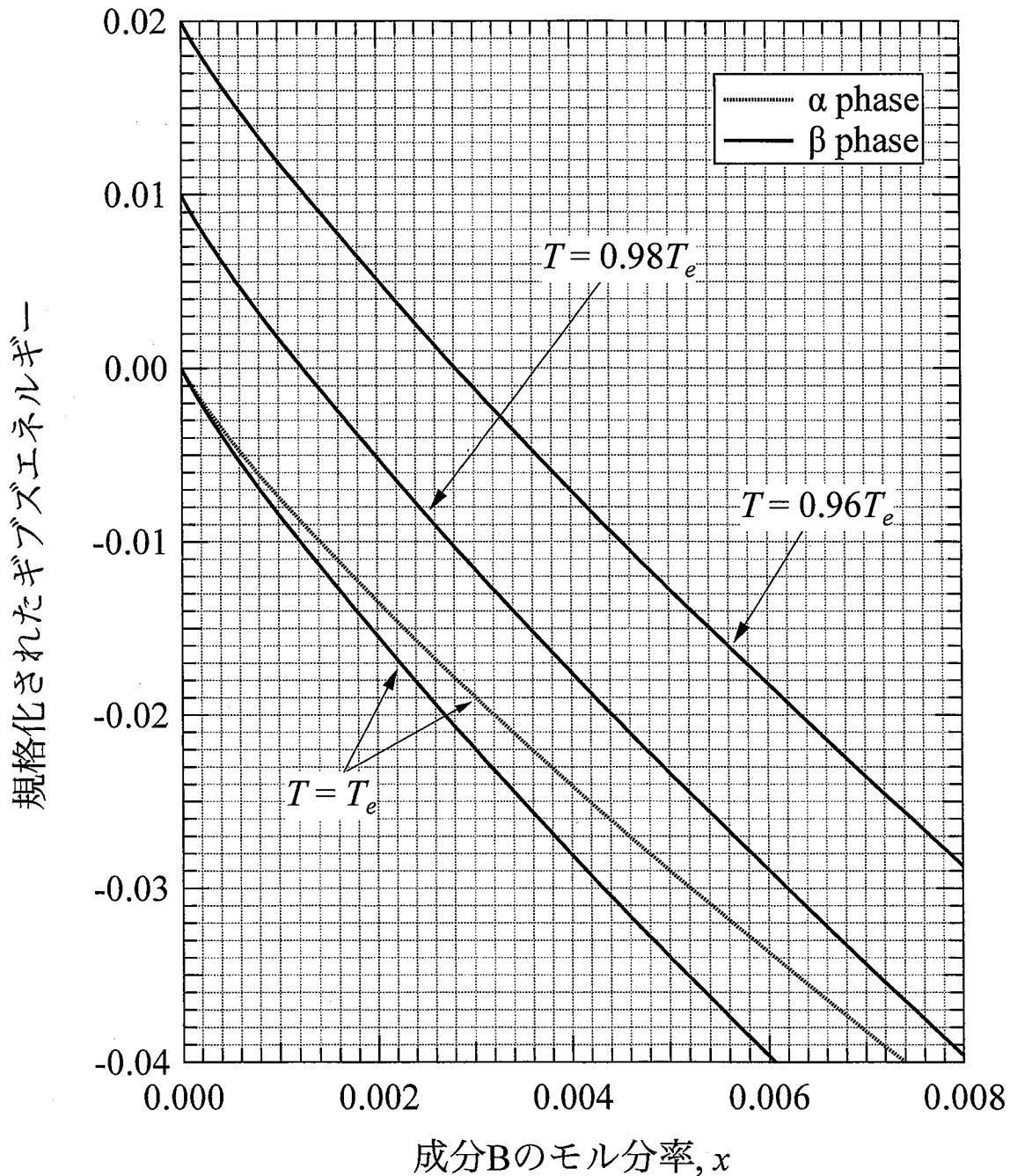
材料基礎学 A

参考1: $T = 0.98T_e$ における RT_e で規格化された成分A, Bの化学ポテンシャルとモル分率の関係。ただし、実線が β 相、点線が α 相である。



材料基礎学 A

参考2： RT_e で規格化されたギブズエネルギー曲線とモル分率の関係である。 $T = T_e$ については α 相と β 相の規格化されたギブズエネルギー曲線、他の温度については β 相の規格化されたギブズエネルギー曲線が描かれている。



2024年度（令和6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

- 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。
- 受験番号・氏名を解答冊子、問題冊子の※印の箇所に記入すること。
- 問題冊子は表紙と白紙1枚のほかに12ページである。
- 解答冊子は持ち帰ってはならない。問題冊子の取り扱いは監督者の指示に従うこと。
- 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。

受験番号	※
氏名	※

白紙

材料基礎学 B

[問題1]

以下の《文章》を読んで間に答えよ。問題文中の記号 (*sol*) および (*liq*) はそれぞれ固体および液体の状態を示し、*R* は気体定数を表す。

《文章》 ギブズエネルギーを *G*、エンタルピーを *H*、エントロピーを *S*、内部エネルギーを *U*、圧力を *p*、絶対温度を *T*、体積を *V* で表す。このとき、*G* は $G = H - TS$ で、*H* は $H = U + pV$ で与えられる。系がその状態を変えるときの *G* の微小変化 dG について *H*、*T*、*S* の微小変化 dH 、 dT 、 dS を考えよう。圧力一定のもとで準静的過程によって状態の変化が進行するとき dU は $dU = TdS - pdV$ で表される。これらの関係から、下記の式(1)と式(2)は *T*、*S*、*V*、*p* のうち必要なものを用いて

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p = \boxed{\text{ア}} \quad (1)$$

および

$$\left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T = \boxed{\text{イ}} \quad (2)$$

と表される。これらのうち、式(1)をもとに *H* と *T* を用いて式(3)に示すギブズ・ヘルムホルツの式が導出できる。

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p = \boxed{\text{ウ}} \quad (3)$$

次に、ギブズ・ヘルムホルツの式を利用して凝固点降下について考えてみよう。ここでは、溶媒（成分 A）にある溶質（成分 B）が均一に溶解した状態について考える。成分 A と成分 B が均一に混合している液相から、*T* が変化して成分 A (*sol*) が析出する場合に着目する。このとき、成分 B (*liq*) の物質量に対して析出した成分 A (*sol*) の物質量は十分に少なく、成分 A (*liq*) の活量 a_A の変化は無視できる。ここで、溶媒である成分 A について液相と固相とともに \boxed{a} 基準の標準状態を考えれば、固相は純粋な成分 A であることから、純粋な成分 A からなる固相の標準化学ポテンシャル $\mu_{A,x_A=1}^{\circ,sol}$ および液相の標準化学ポテンシャル

材料基礎学 B

$\mu_{A,x_A=1}^{\circ,liq}$ と a_A には、 $\mu_{A,x_A=1}^{\circ,sol}$ ， $\mu_{A,x_A=1}^{\circ,liq}$ ， R ， T を用いて式(4)の関係が成り立つ。

$$\ln a_A = \boxed{\text{エ}} \quad (4)$$

一方、純粋な成分 A の融解モルギブズエネルギー変化 $\Delta g_{A,melt}(T)$ と $\mu_{A,x_A=1}^{\circ,sol}$ および $\mu_{A,x_A=1}^{\circ,liq}$ には式(5)の関係が成り立つ。

$$\Delta g_{A,melt}(T) = \boxed{\text{オ}} \quad (5)$$

いま、融解モルエンタルピー変化 $\Delta h_{A,melt}(T)$ の温度依存性は無視できるとしよう。このとき、 $\ln a_A$ の T での偏微分は式(3)を用いて整理すると、 $\Delta h_{A,melt}$ ， R ， T を用いて

$$\frac{\partial \ln a_A}{\partial T} = \boxed{\text{カ}} \quad (6)$$

と導くことができる。純粋な成分 A の凝固点を T^* として式(6)を積分すれば、 $\ln a_A$ は $\Delta h_{A,melt}$ ， R ， T と T^* を用いて

$$\ln a_A = \boxed{\text{キ}} (\boxed{\text{ク}} - \boxed{\text{ケ}}) \quad (7)$$

と表すことができる。いま、 $\Delta T = T^* - T$ ， $\Delta T / T^* \ll 1$ とすれば、 ΔT は次に示すように $\Delta h_{A,melt}$ ， R ， T^* ， a_A を用いて

$$\Delta T = - \boxed{\text{コ}} \ln a_A \quad (8)$$

と整理できる。いま、液相の成分 A が \boxed{a} の法則に従うとき、その活量係数 γ_A は 1 に近似できる。また、成分 A と成分 B のモル分率 x_A と x_B には $x_A + x_B = 1$ が成立し、成分 B は希薄であることから x_B について、 $\ln(1-x_B) \cong -x_B$ の近似が成り立つ場合、式(8)は

$$\Delta T = \boxed{\text{コ}} x_B \quad (9)$$

と整理され、 ΔT は成分 B がどのような成分であるかに関わらず x_B に比例することがわか

入学資格試験問題

材料基礎学 B

る。このように、希薄溶液において物質がもつ性質には影響を受けて、溶質の数密度にのみ依存する性質は **b** 的性質と呼ばれ、上述の凝固点降下以外に **c**、
d は **b** 的性質を示すことが知られている。

ところで、ギブズ・デュエムの関係式から p や T が一定の条件では γ_A と成分 B の活量係数 γ_B には式(10)の関係が成り立つ。

$$x_A d \ln \gamma_A + x_B d \ln \gamma_B = 0 \quad (10)$$

この関係式から、溶媒である成分 A の活量係数が 1 であるときには、溶質である成分 B の活量係数は一定であり、これは **e** の法則と呼ばれる。逆にいえば、溶質の活量係数が **e** の法則に従わないとき、溶媒の活量係数は 1 とはならず、凝固点降下における **b** 的性質は失われる。ここで、溶質の活量係数のみが組成に対して実験的に測定されているときを考えよう。このようなときは、関数 α を $\alpha \equiv \ln \gamma_B / x_A^2$ と定義すれば、式(10)を式(11)ならびに式(12)のように変形でき、溶質の活量係数から溶媒の活量係数を求めることができる。

$$\frac{d \ln \gamma_A}{d x_A} = \boxed{\text{サ}} \frac{d \alpha}{d x_A} - \boxed{\text{シ}} \quad (11)$$

$$\ln \gamma_A = \boxed{\text{ス}} - \int_{x_A=1}^{x_A=x_A} \boxed{\text{セ}} d x_A \quad (12)$$

さて、 γ_A が 1 に近似できる電解質水溶液について考えよう。別の実験によって純粋な水の $\Delta h_{A,melt}$ が 6.01 kJ mol^{-1} と測定された。溶質の質量モル濃度が十分に小さい場合、上記の $\Delta h_{A,melt}$ の値と式(9)から、純粋な水は **ソ** K kg mol^{-1} の比例定数に従って凝固点が降下することがわかる。いま、あるカルボン酸 $C_nH_{2n+1}COOH$ (n は自然数) が純粋な水の中に濃度 $2.00 \times 10^{-3} \text{ mol kg}^{-1}$ で溶解している。このとき、 ΔT を測定したところ $4.20 \times 10^{-3} \text{ K}$

入学資格試験問題

材料基礎学 B

であった。当該カルボン酸が完全に電離すると考えて式(9)から求めた ΔT と上記の測定値は一致しない。これは当該カルボン酸が弱酸であることに由来する。上述の実験結果をもとに考えれば、当該カルボン酸の電離度は タ %と計算できる。

問 1 ア から セ を適切な数式で埋めよ。

問 2 a から e を適切な語句で埋めよ。

問 3 ソ を適切な数値で埋めよ。有効数字は3桁とせよ。水の凝固点は273 K,

気体定数 R は $8.31 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$, 水の分子量は 18.0 とせよ。

問 4 タ を適切な数値で埋めよ。ただし、有効数字3桁で答えよ。

材料基礎学 B

[問題 2]

X 線回折に関する《文章 I》～《文章 IV》を読み、間に答えよ。

《文章 I》 波長 λ の X 線の弾性散乱について、入射 X 線の波数ベクトルを \vec{k} 、散乱 X 線の波数ベクトルを \vec{k}' とする ($|\vec{k}| = |\vec{k}'| = 2\pi/\lambda$)。原点 0 における散乱と原点 0 から \vec{r} だけ離れた点における散乱の位相差は、散乱ベクトル $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$ を用いて [ア] と表される。この位相差に応じて、散乱 X 線は強め合ったり弱め合ったりする。いま、原点 0 にのみ原子が存在し、原子核を中心に広がる電子雲からの X 線散乱を考える。位置 \vec{r} 、体積 dV の微小領域からの散乱振幅を $n_{\text{atom}}(\vec{r})dV$ とすると、この原子全体からの散乱波の合成振幅 $f(\vec{q})$ は

$$f(\vec{q}) = \int n_{\text{atom}}(\vec{r}) \exp(i[\text{ア}]) dV \quad (1)$$

となる。ここで、 i は虚数単位、積分の範囲は空間全体である。この $f(\vec{q})$ は原子散乱因子と呼ばれ、ここでは正の実数とする。以下、 f と簡易表記する。

次に、図 1 に示すような $N (= N_1 \times N_2 \times N_3)$ 個の単位胞で構成された結晶からの X 線回折を考える。この結晶の並進ベクトル $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ を図のように取り、各単位胞の原点の位置ベクトルを $\vec{r}_{i_1 i_2 i_3} (= i_1 \vec{a}_1 + i_2 \vec{a}_2 + i_3 \vec{a}_3, i_1, i_2, i_3 \text{ は整数})$ とする。いま、各単位胞の原点にのみ原子が存在するものとすると、結晶全体からの散乱振幅 $W(\vec{q})$ は

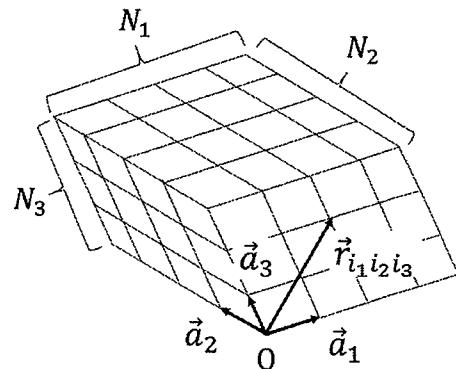


図 1

$$W(\vec{q}) = f \times \sum_{i_1=0}^{N_1-1} \sum_{i_2=0}^{N_2-1} \sum_{i_3=0}^{N_3-1} [\text{イ}] \quad (2)$$

と書ける。この結晶の逆格子の基本並進ベクトルを $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ とすると、 N_1, N_2, N_3 が十分に大きければ、[ウ] が $\vec{G}_{stu} = s\vec{b}_1 + t\vec{b}_2 + u\vec{b}_3$ (s, t, u は整数) と等しい場合に限り $W(\vec{q})$ は値をもち、それ以外では 0 となる。

材料基礎学 B

問 1 空欄 ア ~ ウ を適切な数式で埋めよ.

問 2 逆格子の基本並進ベクトル $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ を $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ を用いて表せ.

問 3 この結晶の $(s \ t \ u)$ 面は $\vec{a}_1/s, \vec{a}_2/t, \vec{a}_3/u$ を通る平面として定義される. $\vec{G}_{stu} = s\vec{b}_1 + t\vec{b}_2 + u\vec{b}_3$ がこの結晶の $(s \ t \ u)$ 面の法線と平行であることを示せ. また, $(s \ t \ u)$ 面の面間隔 d_{stu} は, 原点Oと $\vec{a}_1/s, \vec{a}_2/t, \vec{a}_3/u$ を通る平面の距離である. d_{stu} を \vec{G}_{stu} の大きさ $|\vec{G}_{stu}|$ を用いて表せ.

《文章 II》 図 2 のような面心立方構造をもつ金属結晶を考える. 単位胞中に一つだけ原子が含まれる基本単位胞を与える基本並進ベクトル $\vec{c}_1, \vec{c}_2, \vec{c}_3$ を, 図 2 に示す慣用的な単位胞の [100], [010], [001] 方向の単位ベクトル $\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}$ と格子定数 α を用いて, $\vec{c}_1 = \frac{\alpha}{2}(\vec{y} + \vec{z}), \vec{c}_2 = \frac{\alpha}{2}(\vec{z} + \vec{x}), \vec{c}_3 = \frac{\alpha}{2}(\vec{x} + \vec{y})$ とする.

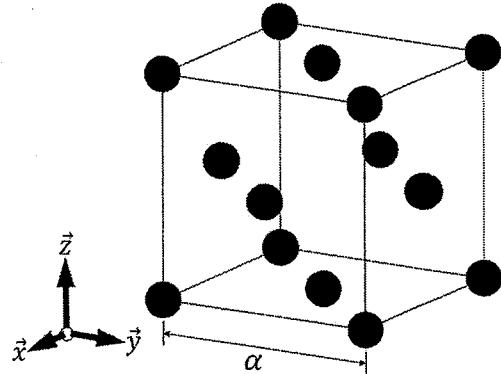


図 2

問 4 慣用的な単位胞を与える並進ベクトル $\vec{d}_1 = \alpha\vec{x}, \vec{d}_2 = \alpha\vec{y}, \vec{d}_3 = \alpha\vec{z}$ と, それに基づく $(h \ k \ l)$ 面を考える (h, k, l は整数). 基本並進ベクトル $\vec{c}_1, \vec{c}_2, \vec{c}_3$ に基づく $(s \ t \ u)$ 面が $(h \ k \ l)$ 面と一致するとき, s, t, u を h, k, l を用いて表せ. また, この構造に対する消滅則 ($W(\vec{q}) = 0$ となる条件) を h, k, l を用いて表せ. なお, 消滅測については, $(s \ t \ u)$ 面と $(h \ k \ l)$ 面の関係に基づいて導出せよ.

材料基礎学 B

《文章 III》 図 2 で示した面心立方構造をもつ金属結晶の粉末試料を用いて、X 線回折実験を行う。装置の概略は図 3 のとおりである。X 線源から放射される X 線は平行で単色化されており、その波長 λ は 0.154 nm である。なお、粉末試料では、結晶粒がランダム配向しているものとする。

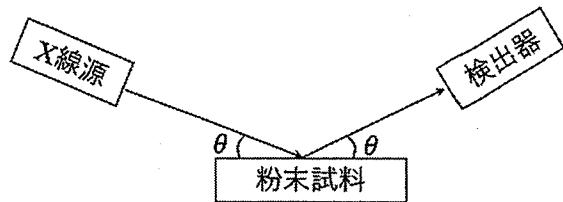


図 3

問 5 格子定数 α が 0.408 nm のとき、観察される回折ピークの回折角 θ を、その値の小さい方から順に 3 つ求めよ（回折角の小さい方から回折ピーク 1, 2, 3 とする）。なお、回折角の単位は度 ($^\circ$)、有効数字 3 衔で解答せよ。また、対応する面指数 $\{h k l\}$ も付すこと。

《文章 IV》 最後に、単位胞の中に複数の原子が含まれる結晶からの X 線回折を考える。ここでは、単位胞内の原子数を N_{atom} 、結晶中における各単位胞の原点の位置ベクトルを $\vec{r}_{i_1 i_2 i_3}$ (i_1, i_2, i_3 は整数)、単位胞の原点を基準とした単位胞内の各原子の位置ベクトルを \vec{r}_j ($j = 1, 2, \dots, N_{\text{atom}}$) とする。また、ある単位胞内における j 番目の原子による X 線散乱において、位置 \vec{r} 、体積 dV の微小領域に存在する電子雲からの散乱振幅を $n_j(\vec{r} - (\vec{r}_{i_1 i_2 i_3} + \vec{r}_j))dV$ とする。 $i_1 = i_2 = i_3 = 0$ の単位胞 ($\vec{r}_{000} = \vec{0}$) に注目すると、その単位胞の散乱因子 $F(\vec{q})$ は原子 j の原子散乱因子 f_j を用いて

$$F(\vec{q}) = \sum_{j=1}^{N_{\text{atom}}} (f_j \times \boxed{\text{エ}}) \quad (3)$$

となる。このとき、結晶全体からの散乱振幅 $W(\vec{q})$ は次のように書ける。

$$W(\vec{q}) = F(\vec{q}) \times \sum_{i_1=0}^{N_1-1} \sum_{i_2=0}^{N_2-1} \sum_{i_3=0}^{N_3-1} \boxed{\text{イ}} \quad (4)$$

材料基礎学 B

いま、原子 A および原子 B からなる閃亜鉛鉱型構造（図 4）を考える。これは、原子 A からなる面心立方構造（図 2）内の特定の四面体位置に原子 B が侵入した構造とみなすことができる。基本並進ベクトル $\vec{c}_1, \vec{c}_2, \vec{c}_3$ を《文章 II》と同じように定義すると、基本単位胞の原点に位置する原子 A に対して、

原子 B は オ $\vec{c}_1 + \input type="text"/> カ $\vec{c}_2 + \input type="text"/> キ \vec{c}_3 の位置に存在する。なお、原子 A および原子 B の原子散乱因子 f_A, f_B には $f_A > f_B$ の関係があるものとする。$$

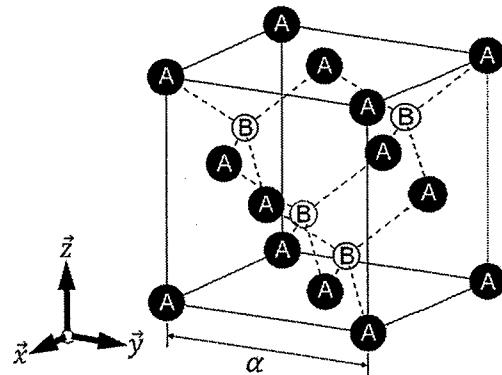


図 4

問 6 空欄 エ ~ キ を適切な数式または数値で埋めよ。

問 7 慣用的な単位胞（格子定数 α ）を与える並進ベクトル $\vec{d}_1 = \alpha \vec{x}, \vec{d}_2 = \alpha \vec{y}, \vec{d}_3 = \alpha \vec{z}$ と、それに基づく $(h k l)$ 面を考える (h, k, l は整数)。 h, k, l を用いて、この構造の消滅則を表せ。

問 8 この化合物の粉末試料を用いて X 線回折実験を行う。原子 A のみからなる面心立方構造（図 2）に対して、原子 B が侵入した閃亜鉛鉱型構造では回折ピークの強度はどのように変化するか。回折角 θ の小さい方から 3 つの回折ピーク（回折ピーク 1, 2, 3）について、閃亜鉛鉱型構造の基本単位胞に対する $|F(\vec{q})|^2$ を f_A および f_B を用いて表し、それに基づいてピーク強度変化（増加 / 減少 / 不変）を答えよ。なお、原子 B の侵入前後で、格子定数 α 、原子 A および原子 B の原子散乱因子 f_A, f_B は変化しないものとする。

問 9 閃亜鉛鉱型構造の原子 A と原子 B が完全に無秩序化した構造を考える。 h, k, l を用いて、この構造の消滅測を表せ。なお、その導出過程も示すこと。また、回折角 θ の小さい方から 3 つの回折ピーク（回折ピーク 1, 2, 3）について、対応する面指数 $\{h k l\}$ を答えよ。

材料基礎学 B

[問題3]

次の《文章A》から《文章C》を読んで、問1から問6に答えよ。

《文章A》

金属の自由電子はフェルミ・ディラック統計に従う。このとき、エネルギー ϵ の準位が電子で占められる確率 $f(\epsilon)$ は絶対温度 T 、化学ポテンシャル μ 、ボルツマン定数 k を用いて $f(\epsilon) = \boxed{\text{ア}}$ で表される。 $T \rightarrow 0\text{ K}$ の極限（以下、これを $T = 0\text{ K}$ と表す）における μ をフェルミエネルギー ϵ_F と呼ぶ。このとき、 $0 < \epsilon < \epsilon_F$ に対して $f(\epsilon) = \boxed{\text{イ}}$ 、 $\epsilon > \epsilon_F$ に対して $f(\epsilon) = \boxed{\text{ウ}}$ となる。また、温度 T によらず $f(\mu) = \boxed{\text{エ}}$ となる。エネルギー ϵ の3次元自由電子の状態密度 $D(\epsilon)$ は、電子の質量 m 、ディラック定数 \hbar を用いて

$$D(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\epsilon}$$

で表される。また、電子密度（単位体積あたりの電子数） n は、 $f(\epsilon)$ と $D(\epsilon)$ を用いて

$$n = \int_0^\infty f(\epsilon) D(\epsilon) d\epsilon$$

で表される。したがって、 $T = 0\text{ K}$ における μ 、すなわちフェルミエネルギー ϵ_F は n を用いて $\epsilon_F = \boxed{\text{オ}}$ と表すことができる。

問1 空欄 $\boxed{\text{ア}}$ および $\boxed{\text{オ}}$ を適切な式で、 $\boxed{\text{イ}}$ 、 $\boxed{\text{ウ}}$ 、 $\boxed{\text{エ}}$ を適切な数値で埋めよ。

問2 金属 Na の原子量は 23.0、密度は 0.968 g cm^{-3} である。Na 原子 1 個あたり 1 個の自由電子を供給すると仮定し、 $m = 9.11 \times 10^{-31}\text{ kg}$ 、 $\hbar = 1.05 \times 10^{-34}\text{ Js}$ 、電気素量 $e = 1.60 \times 10^{-19}\text{ C}$ とし、さらにアボガドロ数を 6.02×10^{23} とするとき、金属 Na の ϵ_F を求めよ。ただし単位は eV とし、有効数字 2 衔で答えよ。

材料基礎学 B

《文章 B》

真性半導体は、図1に示すようなエネルギーバンドを形成する。 $T = 0\text{K}$ のとき、価電子帯は電子で満たされており、そのエネルギーの最大値を ϵ_v とする。 $T = 0\text{K}$ で伝導帶は空であり、そのエネルギーの最小値を ϵ_c とする。 E_g はバンドギャップである。 $E_g \equiv \epsilon_c - \epsilon_v$ である。温度が高くなるにつれ、電子は価電子帯から伝導帯に熱的に励起される。伝導帯の電子と価電子帯のホールが電気伝導に寄与する。以下、 $T > 0\text{ K}$ における真性半導体の電子状態について考える。伝導帯の電子の状態密度 $D_n(\epsilon)$ は、 m_n^* を電子の有効質量として、

$$D_n(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_n^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\epsilon - \epsilon_c}$$

で与えられる。いま、真性半導体においてエネルギー ϵ を占める電子の占有確率 $f_n(\epsilon)$ が、《文章 A》で示した金属の $f(\epsilon)$ と等しいとする（すなわち、 $f_n(\epsilon) = \boxed{\text{ア}}$ ）。ここで、 $\epsilon_c - \mu \gg kT$ が成り立つとして近似すると、伝導帯の電子密度 n_i は $n_i = \boxed{\text{カ}}$ である。

次に、価電子帯のホール密度 p_i について考える。ただし、価電子帯におけるホールの状態密度 $D_p(\epsilon)$ は、 m_p^* をホールの有効質量として

$$D_p(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_p^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\epsilon_v - \epsilon}$$

で与えられる。また、エネルギー ϵ をもつ準位がホールで占められる確率 $f_p(\epsilon)$ は、 $f_p(\epsilon) = 1 - f_n(\epsilon)$ で与えられる。 $\mu - \epsilon_v \gg kT$ が成り立つと近似すると、 $p_i = \boxed{\text{キ}}$ である。

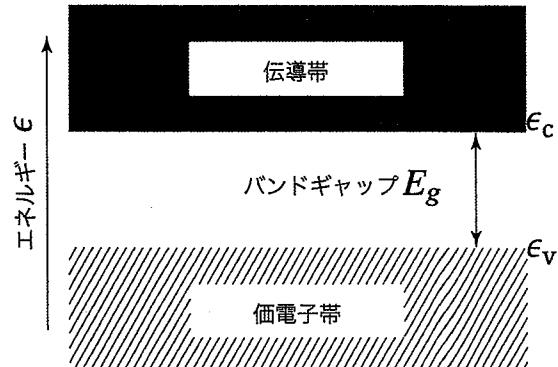


図1

材料基礎学 B

真性半導体では常に $n_i = p_i$ が成り立つ。したがって、真性半導体の μ は $\epsilon_c, \epsilon_v, m_n^*, m_p^*$ を用いて、 $\mu = \boxed{\text{ク}}$ である。また、 $\boxed{\text{カ}}$ および $\boxed{\text{キ}}$ から μ を消去して、 E_g を用いて $n_i = p_i = \boxed{\text{ケ}} \exp(\boxed{\text{コ}})$ である。

問3 空欄 $\boxed{\text{カ}}$ ~ $\boxed{\text{コ}}$ を適切な式で埋めよ。なお必要に応じて積分公式

$$\int_0^\infty \sqrt{x} e^{-x} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

を用いて良い。

問4 半導体の電気伝導率 σ はキャリア密度と移動度に比例する。ある真性半導体の温度 T_1 のときの伝導率が σ_1 、温度 T_2 のときの伝導率が σ_2 であった。このとき、バンドギャップ E_g を $T_1, T_2, \sigma_1, \sigma_2$ を用いて表せ。ただし、 T_1 と T_2 が十分に近く、この温度域において、移動度および《文章 B》中の $\boxed{\text{ケ}}$ の温度変化は、 $\exp(\boxed{\text{コ}})$ の温度変化に対して無視できるとみなせるとする。

《文章 C》

真性半導体に不純物元素を添加することで、p型およびn型半導体が得られる。例えばシリコン半導体の場合、主に13族元素を添加することによってp型半導体を、15族元素を添加することによってn型半導体を得ることができる。p型半導体に添加されている元素をアクセプタ、n型半導体に添加されている元素をドナーと呼ぶ。以下、図1に示した真性半導体の各エネルギー準位に加え、アクセプタ準位を ϵ_a 、ドナー準位を ϵ_d として議論を行う。

まず、13族元素をアクセプタとするp型半導体について議論する。アクセプタ密度 N_a のp型半導体において、温度 $T (> 0 \text{ K})$ でアクセプタ準位 ϵ_a を占める電子の電子密度は、フェルミ・ディラック統計を用いると、 $\boxed{\text{サ}}$ と表される。いま、温度 T が十分に低く、伝導帯の自由電子密度は無視できるほど小さいとする。さらに $\epsilon_a - \mu \gg kT$ が成り立つとす

材料基礎学 B

ると、電荷中性条件より、p型半導体の化学ポテンシャル μ は $\mu = \boxed{\text{シ}}$ と表される。

次に、15族元素をドナーとするn型半導体について議論する。ドナー密度 N_d のn型半導体において、温度 $T (> 0 \text{ K})$ でドナー準位 ϵ_d に電子が捕獲されているドナーの密度は、フェルミ・ディラック統計を用いると、 $\boxed{\text{ス}}$ と表される。このとき、イオン化したドナー密度は $\boxed{\text{セ}}$ と表される。p型半導体と同様に、温度 T が十分に低く、価電子帯の正孔密度は無視できるほど小さいとする。さらに、 $\mu - \epsilon_d \gg kT$ の近似が成り立つとすると、電荷中性条件より、n型半導体の化学ポテンシャル μ は $\mu = \boxed{\text{ソ}}$ と表される。

p型半導体、n型半導体いずれにおいても、温度 T が上昇するにつれてドナーおよびアクセプタのイオン化が進み、ほぼすべてのドナー・アクセプタがイオン化する。さらに温度が上がると、真性半導体と同様に価電子帯から伝導帯に電子が励起される。

問5 空欄 $\boxed{\text{サ}}$ ~ $\boxed{\text{ソ}}$ を適切な式で埋めよ。ただし、 $\boxed{\text{サ}}$ および $\boxed{\text{ス}}$ において、縮退因子は考慮しなくて良い。

問6 p型半導体およびn型半導体の電気伝導率 σ は温度 T に対して変化する。十分低温から十分高温の範囲における電気伝導率 σ と温度 T のおおよその関係を、横軸を $1/T$ 、縦軸を $\ln \sigma$ とするグラフに図示せよ。

2024年度（令和6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

- 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。
- 受験番号・氏名を解答冊子、問題冊子の※印の箇所に記入すること。
- 問題冊子は表紙と白紙1枚のほかに5ページである。
- 解答冊子は持ち帰ってはならない。問題冊子の取り扱いは監督者の指示に従うこと。
- 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。

受験番号	※
氏名	※

白紙

工業数学

[問題 1]

実関数に関する問 1 および問 2 に答えよ。必要に応じて次頁の参考資料を参照してよい。

問 1 $t \geq 0$ において定義される実関数 $f(t)$ のラプラス変換 $F(s) = \mathcal{L}[f(t)]$ は次式で定義される。

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

以下の間に答えよ。

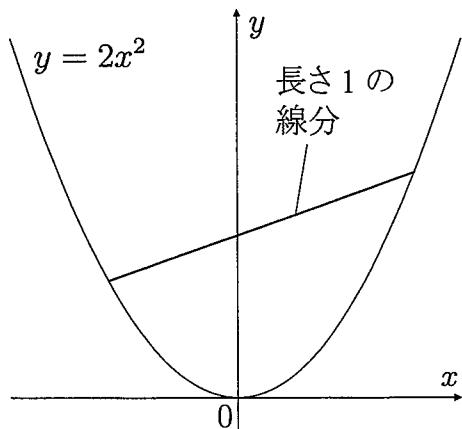
(1-1) 次の関数をラプラス変換せよ。

$$(a) e^{-t} \sin 4t \quad (b) t^2 \cos t$$

(1-2) $t \geq 0$ において定義される関数 $y(t)$ について、境界条件 $y(0) = 3$, $\left. \frac{dy}{dt} \right|_{t=0} = 1$ のもとで、次の微分方程式を解け。

$$\frac{d^2y}{dt^2} + 2\frac{dy}{dt} + y = 5te^{-t}$$

問 2 図のように、 $x-y$ 平面において長さ 1 の線分の両端点が曲線 $y = 2x^2$ 上にある。線分の長さを保ったまま両端点が曲線上を移動するとき、線分の中点の y 座標の最小値を求めよ。



工業数学

【参考資料】

1. ラプラス変換 \mathcal{L} の性質

$\mathcal{L}[f(t)] = F(s)$, $\mathcal{L}[g(t)] = G(s)$ と表すとき,

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

$$\mathcal{L}[f(at)] = \frac{1}{a}F\left(\frac{s}{a}\right)$$

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

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

$$\mathcal{L}[tf(t)] = -\frac{dF(s)}{ds}$$

2. ラプラス変換表

$f(t)$	t^n ($n = 0, 1, 2, \dots$)	e^{kt}	$\sin kt$	$\cos kt$
$F(s)$	$\frac{n!}{s^{n+1}}$	$\frac{1}{s-k}$	$\frac{k}{s^2+k^2}$	$\frac{s}{s^2+k^2}$

3. ラグランジュの未定乗数法 (2 变数関数の場合)

变数 x, y が制約条件 $g(x, y) = c$ (定数) を満たしながら変化するとき, 関数 $f(x, y)$ が極値をとる点 (x, y) を求めることを考える. 制約条件を満たすある点 P において, $\frac{\partial g}{\partial x}, \frac{\partial g}{\partial y}$ の少なくとも一方が 0 でない場合に点 P が極値を与える必要条件は, ある定数 λ が存在して

$$\frac{\partial f}{\partial x} - \lambda \frac{\partial g}{\partial x} = 0 \quad \text{および} \quad \frac{\partial f}{\partial y} - \lambda \frac{\partial g}{\partial y} = 0$$

が成立することである.

工業数学

[問題 2]

問 1 関数 $f(z)$ が、複素 z 平面上の領域 D 内において、点 $z = a$ を除いて正則かつ一価であるとする。このとき $f(z)$ は点 $z = a$ のまわりで、次のようにローラン級数展開できる。

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n (z - a)^n \quad (1)$$

以下の(1-1), (1-2)に答えよ。

- (1-1) 領域 D 内の反時計回りの積分路 C, Γ に対する以下の積分 I_C, I_Γ を求めよ。但し、 C は $z = a$ を中心とした半径 $R (> 0)$ の円、 Γ は $z = a$ を内部に含む D 内の任意の閉じた積分路である(図 1)。

$$I_C = \oint_C f(z) dz \quad (2)$$

$$I_\Gamma = \oint_\Gamma f(z) dz \quad (3)$$

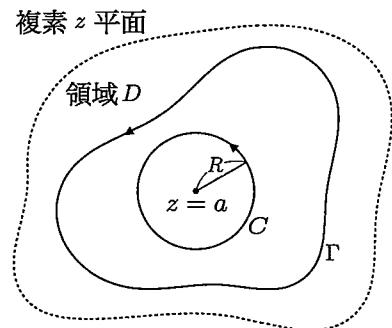


図 1

- (1-2) 式(1)の最小のべきの項が $n = -k$ ($n < -k$ の $A_n = 0$) であるとき、 A_l ($l \geq -k$) は

$$A_l = \lim_{z \rightarrow a} \frac{d^m}{dz^m} [g(z)f(z)] \quad (4)$$

で与えられる。関数 $g(z)$ と整数 m を求めよ。

- 問 2 以下の積分 I_1, I_2, I_3 を求めよ。但し、 i は虚数単位、 z は複素数、 x は実数、 k, γ は正の実数である。また、 I_3 の積分路 Λ は複素 z 平面内の原点 $z = 0$ を内部に含む反時計回りの閉じた積分路である(図 2)。

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x \sin kx}{x^2 + \gamma^2} dx \quad (5)$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(ikx)}{(x^2 + \gamma^2)^2} dx \quad (6)$$

$$I_3 = \oint_{\Lambda} z^2 \exp\left(\frac{1}{z}\right) dz \quad (7)$$

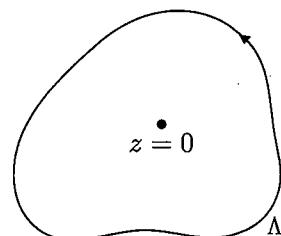
複素 z 平面

図 2

工業数学

[問題 3]

正の整数 n と J 次元実ベクトル $\vec{x} \in \mathbb{R}^J$ (ただし $J \geq 2$) を指定して得られる, 以下で定義される実二次関数 $f_n(\vec{x})$ およびその指数関数 $\exp[f_n(\vec{x})]$ の性質を考える:

$$\begin{aligned} {}^t\vec{x} &= (x_1, x_2, \dots, x_J) \\ f_1(\vec{x}) &= \sum_{i=1}^J \sum_{k=1}^J c_{ik} x_i x_k = {}^t\vec{x} \mathbf{A} \vec{x} \quad (\forall i, k : c_{ik} = c_{ki}, c_{ik} \in \mathbb{R}) \\ f_n(\vec{x}) &= {}^t\vec{x} (\mathbf{A}^n) \vec{x} \end{aligned} \tag{1}$$

ただし ${}^t\vec{x}$ は \vec{x} の転置を表す. \mathbf{A} は $J \times J$ 正方行列であり, その全ての固有値 $\{\lambda_m\}$ は互いに異なる正の実数

$$0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_J \tag{2}$$

であった. このとき, 以下の間に答えよ. 導出過程もあわせて示すこと. なお, 必要に応じて次頁の参考資料の結果を用いても良い.

問 1 行列 \mathbf{A} の i 行 k 列目の要素 A_{ik} および \mathbf{A} の対角和を各々, $\{c_{ik}\}$ の中から必要なものを用いて表せ.

問 2 \vec{x} が, J 次元ユークリッド空間上で原点からの距離 G (G は正の実定数) を満たす集合である $(J - 1)$ 次元超球面上にある場合を考える. また, \mathbf{A} の正規化された J 個の固有ベクトル $\{\vec{\phi}_m\}$ を各列に持つ $J \times J$ 正方行列 \mathbf{U} を用いた変換 $\vec{y} = {}^t\mathbf{U} \vec{x}$ を導入する. ただし ${}^t\mathbf{U}$ は \mathbf{U} の転置を表す. このとき, 以下の(2-1), (2-2) および (2-3) に答えよ.

(2-1) ${}^t\mathbf{U} \mathbf{U} \mathbf{A}$ および $\mathbf{U} {}^t\mathbf{U} \mathbf{A}$ の各々の i 行 k 列目の要素 g_{ik} および h_{ik} を, J , $\{\lambda_m\}$ および $\{c_{ik}\}$ の中から必要なものを用いて表せ.

(2-2) $|\vec{y}|^2$ を G , J および $\{\lambda_m\}$ の中から必要なものを用いて表せ.

(2-3) $\exp[f_1(\vec{x})]$ の最小値を G , J および $\{\lambda_m\}$ の中から必要なものを用いて表せ.

(次頁に続く)

工業数学

[問題 3] (続き)

問 3 J 重積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-f_n(\vec{x})] d\vec{x} \quad (3)$$

の値を J , $\{\lambda_m\}$ および n の中から必要なものを用いて表せ.

【参考資料】

1. 内積
- $\langle \cdot, \cdot \rangle$
- と
- $J \times J$
- 正方行列
- \mathbf{W}
- およびその転置行列
- ${}^t\mathbf{W}$
- に関して以下が成り立つ:

$$\forall \vec{a}, \vec{b} \in \mathbb{R}^J : \quad \langle \mathbf{W}\vec{a}, \vec{b} \rangle = \langle \vec{a}, {}^t\mathbf{W}\vec{b} \rangle \quad (4)$$

2. 積分公式:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp[-\alpha x^2] dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (\alpha > 0) \quad (5)$$