

2027年度（令和9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. 受験番号・氏名を解答冊子の※印の箇所に記入すること.
3. 問題冊子は表紙と白紙1枚のほかに 8 ページである.
4. 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.
5. 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]

等方弾性体である金属結晶 (剛性率 μ , ポアソン比 ν) 中の転位の増殖に関する以下の〈文章〉を読み, 問 1~問 3 に答えよ.

〈文章〉

金属結晶の塑性変形は, 主として転位のすべり運動により進行する. 1 本の転位が動いて試料表面から抜け出すと, 試料表面には最大で最近接原子間距離に相当する段差が生じることになるが, 光学顕微鏡で観察されるようなすべり線はそれよりもはるかに大きい段差である. このことは多数の転位がすべり面上を運動して表面から抜け出していることを意味している.

通常, 十分な焼鈍を施された金属結晶中においても $10^9 \sim 10^{12} \text{ m}^{-2}$ 程度の転位密度の残留転位が含まれるため, 外部から応力が印可された場合には, まずこれらの残留転位の一部がすべり運動を開始し, 何らかの機構により同じすべり面上の転位密度が急激に増える(増殖する)と考えなければならない. このような転位の増殖機構として, ア 機構と二重 イ 機構などが提案されている.

ア 機構は, 両端 A, B が固定された転位セグメント AB から, 転位が次々と自己増殖するという機構である. 転位セグメント AB (図 1 (a)) にせん断応力が働くと, 図 1(b) $\rightarrow$ 図 1(c) $\rightarrow$ 図 1(d) のように張り出していく. 図 1(d) の状態で両方からまわりこんできた互いに逆符号の転位セグメントが合体し消滅する図 1(e) の状態を経ることにより, 1 つの転位ループが形成されるとともに, 再び転位セグメント AB が形成される. この過程の繰り返しにより, 同じすべり面上に多数の転位ループが次々と形成され, 転位が増殖する.

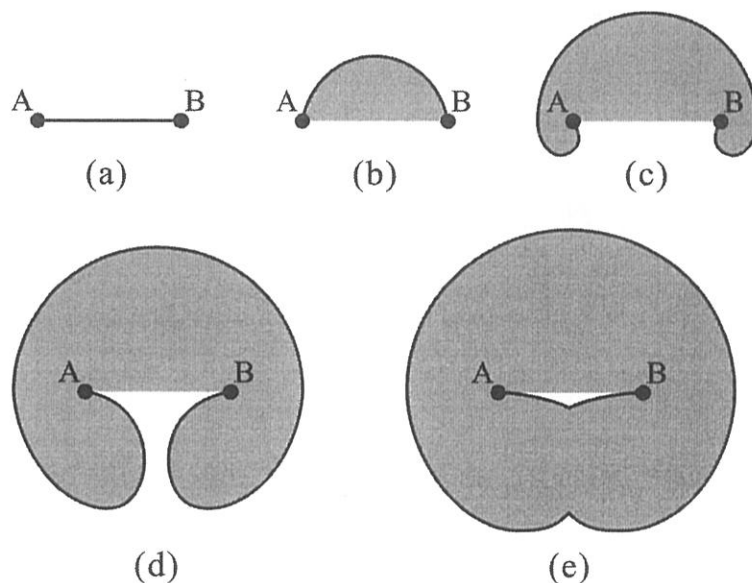


図 1

このときの転位セグメント AB を ア 源と呼ぶ. 長さ L の転位セグメント AB (バーガース・ベクトルの大きさ b) から ア 機構により転位を増殖させるのに必要な最小のせん断応力 τ_{cl} は ウ と表され, L が {エ. 長い, 短い}ほど低い応力で増殖機構が働くことになる.

材料基礎学 A

二重 イ 機構は、1本の転位のらせん転位部分が イ を繰り返すことで、異なるすべり面上に次々と ア 源を作り出すことにより、転位が急激に増殖する機構である。図2(a)ですべり面1上を運動する転位のらせん転位部分が、 イ によりそのすべり面をすべり面2へと移し(図2(b))、そこで少し運動した後、再び イ することにより、もとのすべり面1に平行で距離 h 離れたすべり

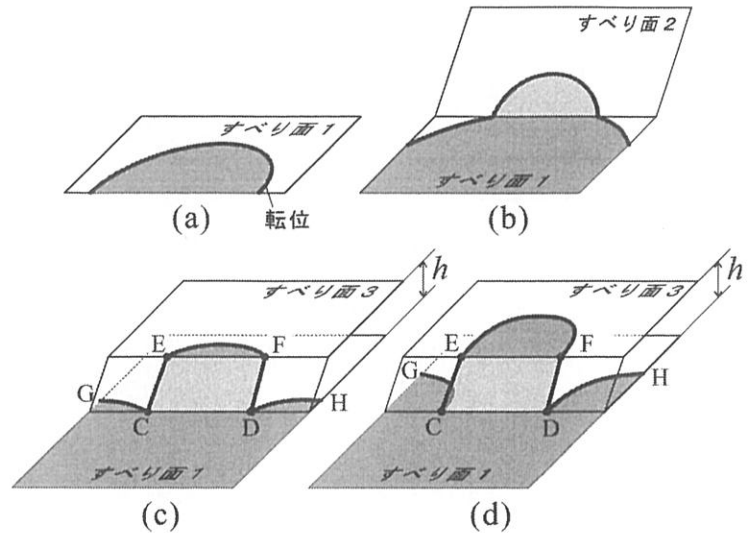


図2

面3上を動き始めたとする(図2(c)). このときすべり面2上にある転位セグメントCEおよびDFの運動が抑制されていれば、すべり面3上に形成された転位セグメントEFが ア 源として働くことができるようになる。またもとのすべり面1上に残された転位セグメントCGおよびDHが引き続き運動を続けると(図2(d))、図1(d)から図1(e)と同様の変化を経て転位セグメントCDが形成され、 ア 源として働くようになる。このようにこの機構では、既存の転位源を考える必要がなく、運動転位が イ できれば、転位を次々と増殖させることができる。ただし、二重 イ 機構による転位の増殖を起こすためには、 ア 機構により転位を増殖させるのに必要な最小のせん断応力 τ_{c1} だけでなく、すべり面1上を運動する転位とすべり面3上を運動する転位の間の相互作用の影響も考慮する必要がある。この相互作用の影響は、距離 h だけ離れたすべり面1上とすべり面3上を運動する互いに逆符号の刃状転位がすれ違うのに必要な最小のせん断応力 τ_{c2} として見積もることができる。今、転位セグメントEFおよびCDの長さがともに L であるとする、二重 イ 機構による転位の増殖を起こすためには、すべり面1とすべり面3の距離 h は臨界値 h_c よりも{オ. 大きく, 小さく}なければならないことがわかる。この機構は低温で変形した試料中に非常に多くの直線状のらせん転位が観察される体心立方金属などで特に重要とされている。

問1. ア 機構に関する以下の問いに答えよ。

(a) 空欄 ア を適切な語句で埋めよ。

(b) 図3のように長さ L の転位セグメントABが曲率半径 R まで円弧状に張り出したとき、すべり面上のすべり方向へ働くせん断応力 τ 、転位の線張力 T 、曲率半径 R の間に成り立つ関係式を答えよ。なお、線張力 T は転位の性格 (バーガース・ベクトルとライン・

材料基礎学A

ベクトルのなす角度 θ)には依存しないとする. 解答欄には必ず導出過程も記すこと.

- (c) 線張力 T が転位の性格によらず $\mu b^2/2$ と表される場合の を答えよ. 解答には μ , v , b , L のうち必要なものを用いること.

- (d) 選択肢{エ}について, 解答欄の正しいものに○をつけよ.

- (e) 実際には転位の線張力 T は転位の性格に依存して変化する. バーガース・ベクトルとライン・ベクトルのなす角度が θ である転位の線張力 $T(\theta)$ は次式で与えられることが知られている.

$$T(\theta) = E(\theta) + \frac{d^2 E(\theta)}{d\theta^2}$$

ここで $E(\theta)$ はバーガース・ベクトルとライン・ベクトルのなす角度が θ である転位の弾性ひずみエネルギーである. この関係式をもとに, 転位の線張力 $T(\theta)$ を導け. 解答欄には必ず導出過程も記すこと. また得られた結果をもとに, らせん転位と刃状転位の線張力の比 $T(0^\circ)/T(90^\circ)$ を求めよ. なお, 解答には μ , v , b , θ , r_0 , r_1 のうち必要なものを用いること. ただし転位の弾性ひずみエネルギーの計算において, 転位の中心からの距離 r に関する積分範囲は r_0 から r_1 とせよ. 必要に応じて, 問題末尾に記した転位の周囲の応力テンソルの式を利用してよい.

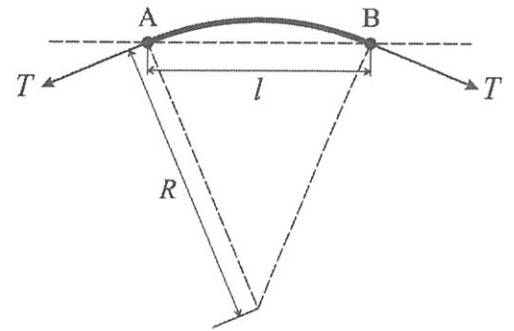


図3

問2. 二重 機構に関する以下の問いに答えよ.

- (a) 空欄 を適切な語句で埋めよ.

- (b) 〈文章〉中の二重下線部の τ_{c2} を見積もるため, 距離 h だけ離れた平行なすべり面上をすべり運動する互いに平行な逆符号の2本の直線刃状転位を考える. 1本目の刃状転位(転位1)が XYZ 直交座標系の Z 軸上に存在し, そのバーガース・ベクトルおよびライン・ベクトルがそれぞれ $\vec{b}_1 = (b, 0, 0)$, $\vec{\xi}_1 = (0, 0, 1)$ であるとき, 位置 $(x, h, 0)$ を通る2本目の刃状転位のバーガース・ベクトル $\vec{b}_2$ およびライン・ベクトル $\vec{\xi}_2$ を答えよ.

- (c) 問2(b)で考えた2本の刃状転位間の相互作用力を求め, そのうち転位のすべり変形に寄与する成分を答えよ. なお, 解答には μ , v , b , h , x のうち必要なものを用いること. またそのグラフの概形を解答欄に記せ. グラフの概形にはそのグラフを特徴づける数式あるいは数値を必ず入れること. さらに2本の刃状転位がすれ違うために必要な最小のせん断応力 τ_{c2} を答えよ. 必要に応じて, 問題末尾に記した転位の周囲の応力テンソルの式を利用してよい.

材料基礎学 A

(d) 二重 機構による転位の増殖を起こすためのすべり面間距離 h の臨界値 h_c を答えよ。解答には μ , ν , b , L のうち必要なものを用いること。

(e) 選択肢{オ}について、解答欄の正しいものに○をつけよ。

問3. 〈文章〉中の下波線部に記すように、低温で変形した体心立方金属中には非常に多くの直線状のらせん転位が観察されることが知られている。その理由については、体心立方構造の原子配列の特徴からしばしば説明がなされる。これに関する以下の問に答えよ。

(a) 図 4(a), (b) はそれぞれ体心立方構造の原子配列とそれを $[111]$ 方向からみたものである。この結晶中の完全転位のバーガース・ベクトルの大きさを b とするとき、 $[111]$ 方向の投影において各原子が存在する $[111]$ 方向の高さを解答用紙の図中の○印内に b を単位とした 0 以上 1 未満の分数あるいは小数で記して図を完成させよ。ただし、図 4(b) 中の中央の原子の高さを 0 とする。また、その完成図から読み取れる原子配列の特徴を詳細に述べよ。

(b) 低温で変形した体心立方金属中に非常に多くの直線状のらせん転位が観察される理由を、問 3(a) の解答内容をもとに図を用いてできるだけ詳しく説明せよ。

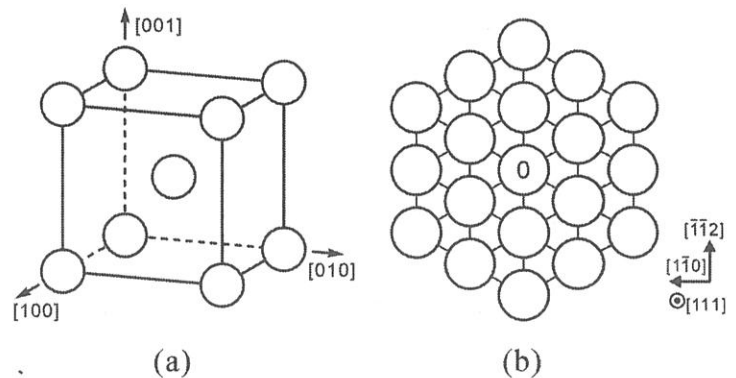


図 4

[参考] XYZ 直交座標系の Z 軸上にある転位 (ライン・ベクトル $\vec{\xi} = (0, 0, 1)$) の周囲の位置 (x, y, z) における応力テンソルの成分は以下のように与えられる。

・刃状転位 (バーガース・ベクトル $\vec{b} = (b, 0, 0)$)

$$\sigma_{xx} = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \quad \sigma_{yy} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2},$$

$$\sigma_{zz} = -\frac{\mu \nu b}{\pi(1-\nu)} \frac{y}{x^2 + y^2}, \quad \sigma_{xy} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2},$$

$$\sigma_{yz} = \sigma_{zx} = 0$$

・らせん転位 (バーガース・ベクトル $\vec{b} = (0, 0, b)$)

$$\sigma_{yz} = \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2}, \quad \sigma_{zx} = -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2},$$

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \sigma_{xy} = 0$$

材料基礎学 A

[問題 2]

物質拡散・熱伝導に関する以下の《文章 A》・《文章 B》を読み, [問 1] ~ [問 3] に答えよ.

《文章 A》

単純立方構造をもつ結晶中における侵入型不純物原子の拡散を考える. 不純物原子は, 単純立方構造の体心位置である一つの格子間位置から六つの最近接格子間位置のいずれかへランダムにジャンプし移動すると仮定する. 不純物原子がジャンプする単位時間あたりの総回数 (ジャンプ頻度) を Γ とし, ジャンプの移動距離は, 単純立方構造の格子定数 a に等しいものとする. また, 不純物原子の濃度 (単位体積あたりの不純物原子数) C は十分に小さく, ジャンプ頻度および拡散係数 D は濃度 C に依存しないものとする.

図 1 に示すような不純物原子の x 方向に沿った拡散を考えよう. このとき, $+x$ および $-x$ 方向へのジャンプ頻度はともに $\boxed{\text{ア}}$ となる. 図 1 のように, 格子間位置を含む一つの面を平面 1, 隣接する格子間位置を含む面を平面 2 とし, 平面 1 における単位面積あたりの不純物原子数を n_1 , 平面 2 における単位面積あたりの不純物原子数を n_2 としたとき, 平面 1 から平面 2 への正味の流束 J は, n_1, n_2 およびジャンプ頻度 Γ を用い,

$$J = \boxed{\text{イ}} \quad (1)$$

と表すことができる. 一方で, 平面 1 における濃度を $C_1 = n_1/a$, 平面 2 における濃度を $C_2 = n_2/a$ と定義し, 平面 1 と平面 2 の間では, x に対して濃度が直線的に変化するものと考えたとき, 濃度差 $C_1 - C_2$ は, 濃度勾配 dC/dx を用いて表すと,

$$C_1 - C_2 = \boxed{\text{ウ}} (dC/dx) \quad (2)$$

となる. よって, 平面 1 から平面 2 への正味の流束 J は

$$J = - \boxed{\text{エ}} (dC/dx) \quad (3)$$

と表される. 最終的にフィックの第一法則

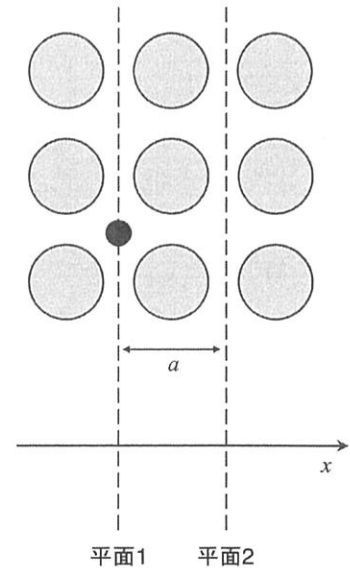


図 1 単純立方構造をもつ結晶中における不純物原子●の x 方向に沿った拡散モデル.

材料基礎学 A

$$J = -D (dC/dx) \quad (4)$$

との比較から、拡散係数 D は、 $D =$ と表される。

次に、原子ジャンプによって記述される原子拡散を確率的に考えよう。図2のような一次元の格子において、原子は隣接する左右の格子点のどちらかに、確率 $1/2$ でランダムにジャンプするものとする。 i 番目のステップにおける $+x$ 方

向のジャンプを $t_i = +1$, $-x$ 方向のジャンプを $t_i = -1$

としたとき、 N ステップ経過後における一つの軌跡

$(t_1, t_2, \dots, t_N)$ が得られる確率は、である。 N

ステップ経過後の正味の移動量は、

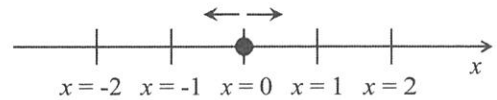


図2 一次元格子における
原子ジャンプの模式図。

$$m = \sum_{i=1}^N t_i \quad (5)$$

となるため、 N ステップ経過後に正味の移動量が m となる確率 $P(m, N)$ は、と書くことができる。ステップ数 N が非常に大きく、 $N \gg m$ が成立する場合、スターリングの公式

$$\ln N! \approx N \ln N - N + \frac{1}{2} \ln(2\pi N) \quad (6)$$

および近似式

$$\ln(1 \pm \varepsilon) \approx \pm \varepsilon - \frac{1}{2} \varepsilon^2 \quad (|\varepsilon| \ll 1) \quad (7)$$

を用いて、 N ステップ経過後に正味の移動量が m となる近似的な確率 $P_a(m, N)$ は、

$$P_a(m, N) = \text{} \exp(\text{}) \quad (8)$$

と表される。

[問1] ~ に入る適切な数式を答えよ。 ~ については、 N および m から必要なものを用いて解答せよ。, の導出の際、最終的な式(8)において、 $(m/N)^2$ に関する項は無視できることを利用せよ。

材料基礎学 A

《文章 B》

均一な単一物質内における定常状態の一次元方向の熱流束 q は、物質の熱伝導率 λ と温度勾配 dT/dx を用いて、フーリエの法則

$$q = -\lambda(dT/dx) \quad (9)$$

によって記述される。これは物質移動におけるフィックの第一法則と数学的に全く等価な形式である。

実用材料においては、2つ以上の相からなる複合材料や、内部に気孔を含む多孔体が多用される。このような不均一系材料におけるマクロな熱伝導性を表す際には、個々の相の物性値だけでなく、材料の内部組織を考慮した有効熱伝導率 λ_{eff} という概念を導入する必要がある。

内部構造の単純な極限モデルとして、図3(a)(b)のような、熱伝導率の異なる相Aと相Bが完全に層状に並んだ^①並列モデル（相の境界面が熱流方向に平行）と^②直列モデル（相の境界面が熱流方向に垂直）がある。以降、相Aと相Bの体積分率をそれぞれ V_A 、 V_B とし、 $V_A + V_B = 1$ とする。 V_A 、 V_B が一定のとき、並列モデルは、任意の幾何学的構造をもつ複合材料が取り得る有効熱伝導率の{(ケ) 上限, 下限}、直列モデルは{(コ) 上限, 下限}をそれぞれ与える。ただし本問では定常状態の熱伝導のみを対象とし、各相内の熱伝導率は常にバルク値と同じとし、界面における熱抵抗や、対流、放射による伝熱は無視できるものとする。

実際の粒子分散材料や多孔体では、分散相の形状や配向が有効物性に多大な影響を与える。例えば、図3(c)のような^③連続相Aの中に球状の分散相Bが孤立している系の有効熱伝導率は、以下のMaxwell-Euckenの式によって近似されることが知られている。

$$\lambda_{\text{eff}}^{(c)} = \lambda_A \frac{2\lambda_A + \lambda_B - 2V_B(\lambda_A - \lambda_B)}{2\lambda_A + \lambda_B + V_B(\lambda_A - \lambda_B)} \quad (10)$$

ここで、 λ_A は連続相Aの熱伝導率、 λ_B は分散相Bの熱伝導率である。

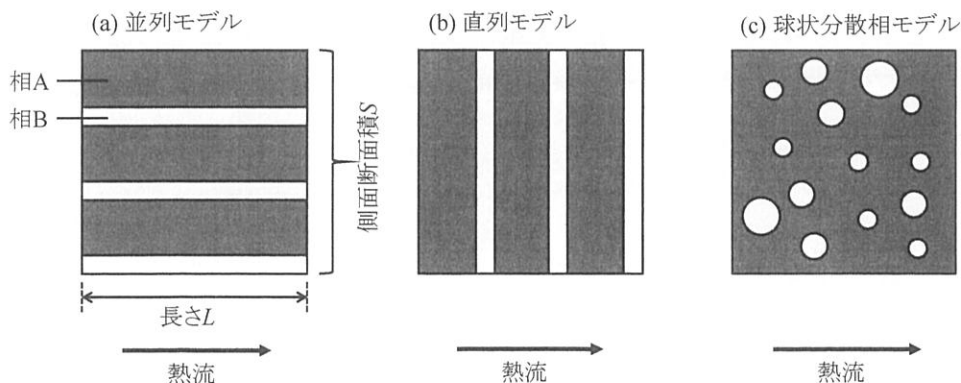


図3 複合材料のモデル (奥行き省略).

材料基礎学 A

[問2] 文中の(ケ), (コ)に入る最も適切な語句を{ }内から選べ.

[問3] 下線部㊤㊦に関し, 相 A (熱伝導率 λ_A , 体積分率 $V_A = 1 - V_B$) と相 B (熱伝導率 λ_B , 体積分率 V_B) からなる複合材料を考える. 材料全体の熱流方向の長さを L , 熱流方向に垂直な断面積を S とする.

- (a) 図 3 (a) のように, 相 A と相 B が熱流の方向に対して平行 (並列モデル) に配置されている. このとき, 両相にかかる温度差 ΔT と長さ L は共通であり, 温度勾配 $\Delta T/L$ も共通である. 全熱流量は各相の熱流量の和となる. 有効熱伝導率 $\lambda_{\text{eff}}^{(a)}$ を, λ_A , λ_B , V_B を用いて表す式を導出せよ.
- (b) 図 3 (b) のように, 相 A と相 B が熱流の方向に対して垂直 (直列モデル) に配置されている. このとき, 定常状態で各相を流れる熱流束は共通であり, 全温度差 ΔT_{total} は各相の温度差 (ΔT_A , ΔT_B) の和となる. 材料全体の有効熱伝導率 $\lambda_{\text{eff}}^{(b)}$ を, λ_A , λ_B , V_B を用いて表す式を導出せよ.
- (c) $\lambda_A = 30 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$, $\lambda_B = 0.03 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ としたとき, 内部構造による有効熱伝導率の違いを比較したい. 並列モデルおよび直列モデルを仮定した場合の有効熱伝導率 $\lambda_{\text{eff}}^{(a)}$, $\lambda_{\text{eff}}^{(b)}$ の概形を曲線で解答欄に示せ. また, 下線部㊤に関し, 図 3 (c) のように, 相 A の内部に完全に孤立した球状の相 B が均一に含まれている複合材料を考える. 前述の Maxwell-Eucken の式を用いて, 代表点として $V_B = 0, 0.1, 0.2$ のそれぞれの場合についてこの複合材料の有効熱伝導率 $\lambda_{\text{eff}}^{(c)}$ の値を求め, それらの値をもとに $\lambda_{\text{eff}}^{(c)}$ の概形を曲線で示せ.

2027年度（令和9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. 受験番号・氏名を解答冊子の※印の箇所に記入すること.
3. 問題冊子は表紙と白紙1枚のほかに 13 ページである.
4. 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.
5. 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]

電解質水溶液における酸-塩基平衡や酸化還元平衡を考察したいとき、開いた系の状態図を用意しておくことが役立つことが多い。これに関する《文章A》と《文章B》を読み、問に答えよ。温度はすべて 298 K とし、必要に応じて表 1 と表 2 にまとめる熱力学データ、ならびに以下の諸値を使え。

$$\text{気体定数 } R = 8.314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \quad \text{Faraday 定数 } F = 9.649 \times 10^4 \text{ C mol}^{-1}$$

表 1 酸化-還元対の標準電極電位 E° (温度 298 K)

反 応	$E^\circ / \text{V vs. SHE}$
$\text{O}_2(\text{g}) + 4\text{H}^+(\text{aq}) + 4\text{e}^- = 2\text{H}_2\text{O}(\text{liq})$	+1.229
$\text{Pb}^{2+}(\text{aq}) + 2\text{e}^- = \text{Pb}(\text{s})$	-0.126
$2\text{H}^+(\text{aq}) + 2\text{e}^- = \text{H}_2(\text{g})$	0

aq : 水溶液中の溶存化学種 liq : 液体 g : 気体 s : 固体
SHE : 標準水素電極

表 2 化学種の標準化学ポテンシャル μ° (温度 298 K)

化学種	状態	$\mu^\circ / \text{kJ mol}^{-1}$
Pb	s	0
PbO_2	s	-218.0
H^+	aq	0
H_2	g	0
O_2	g	0
H_2O	liq	-237.2

aq : 水溶液中の溶存化学種 liq : 液体 g : 気体 s : 固体

《文章A》

次のページの図 1 は弱酸である二塩基酸 H_2A (分析濃度 (ア) mol L^{-1}) の主変数図 (一部省略) である。横軸は pH (水素イオン指数), 縦軸は化学種の濃度 C (単位 mol L^{-1}) の常用対数である。この水溶液では H_2A , HA^- , A^{2-} が互いに平衡しており、そこには 2 つ酸解離平衡

(イ)

(1)

および

材料基礎学 B

(ウ)

(2)

が存在する．反応 (1) と反応 (2) の酸解離平衡定数をそれぞれ K_{a1} および K_{a2} (ただし $K_{a1} > K_{a2}$) とすると，それらは (エ) および (オ) であることを図から読み取ることができる．

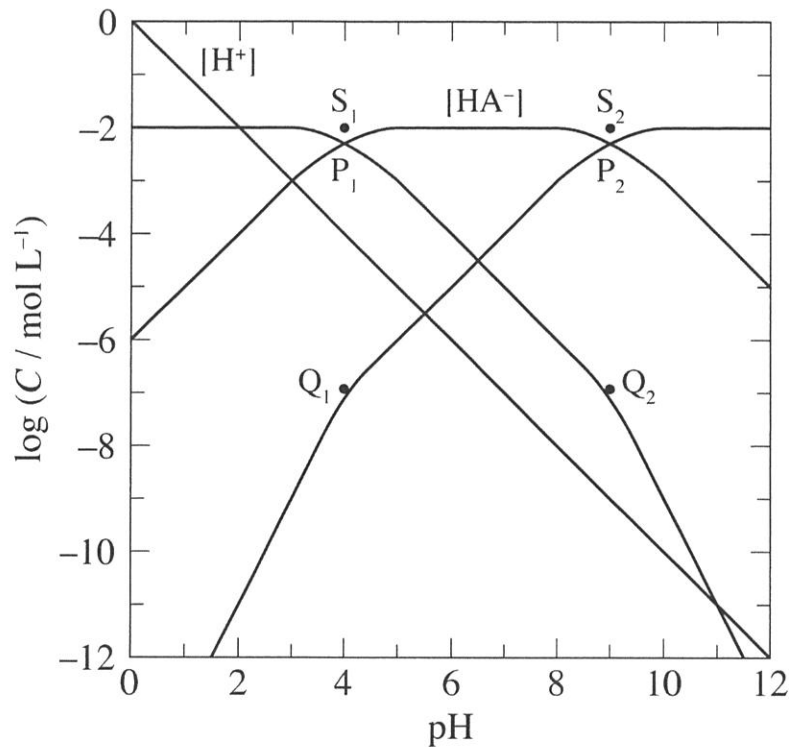


図 1

濃度 (ア) mol L^{-1} の Na_2A (2 当量の Na^+ イオンと 1 当量の A^{2-} イオンからなる塩) を純水に溶かしたときに得られる水溶液の pH を考えてみよう．化学種 X ($\text{X} = \text{H}^+, \text{OH}^-, \text{Na}^+, \text{H}_2\text{A}, \text{HA}^-, \text{A}^{2-}$) の濃度を $[\text{X}]$ (単位 mol L^{-1}) で表すことにすると，この系の物質収支 (mass balance) を表す式として

(カ)

(3)

(キ)

(4)

の 2 つが得られる．また，電荷均衡 (charge balance) を表す式は

(ク)

(5)

となる．これらの等式 (3)～(5) に加え，平衡定数 K_{a1} および K_{a2} を与える 2 つの等式，ならびに水の自己プロトリス定数を表す等式の合計 6 つの等式が得られるので，これを解くこと

材料基礎学 B

で $[H^+]$ を求めることができる。 $[H^+]$ が求まれば pH がわかる。しかし、このような計算は非常に煩雑になる。

一方、プロトン均衡 (proton balance) の式を考えることで、主変数図から目的の pH を読み取ることができる。 Na_2A を純水に溶かしたときのプロトン均衡式は

$$\boxed{\hspace{10em}} \quad (\text{ケ}) \quad (6)$$

である。この関係が成り立つ点を図から読み取れば、求めたい pH が $\boxed{(\text{コ})}$ であることがたちどころにわかる。

問1 解答用紙の主変数図に濃度 $[OH^-]$ を表す線を定規を使って描き加えよ。

問2 文中の (ア), (エ), (オ), (コ) について適切な数値を入れよ。(コ) は小数第1位まで答えよ。

問3 文中の (イ) と (ウ) に入る適切な平衡反応式を答えよ。

問4 文中の (カ) ~ (ケ) に入る適切な等式を答えよ。

問5 純水に溶解させる Na_2A の濃度を $\boxed{(\text{ア})} \text{ mol L}^{-1}$ より小さくした場合、溶液の pH は $\boxed{(\text{コ})}$ に比べて大きくなるか、変わらないか、小さくなるか答えよ。

《文章B》

次のページの図2は Pb-H₂O 系の Pourbaix 図 (温度 298 K) である。溶存化学種の活量を 1 として描画されている。図中の平衡線①と②は、半電池反応

$$\boxed{\hspace{10em}} \quad (\text{サ}) \quad (7)$$

および



をそれぞれ表している。反応 (7) の標準電極電位は $\boxed{(\text{シ})} \text{ V vs. SHE}$ である。したがって、反応 (7) と反応 (8) を組み合わせて



のような電池を構成した場合、その標準起電力は $\boxed{(\text{ス})} \text{ V}$ となる。

さて、電池 (9) とよく似た電池として、G. Planté により発明された鉛蓄電池 (lead-acid

材料基礎学 B

battery) がある. 酸性電解液 ($\text{pH}=0$) を用いた鉛蓄電池の起電力は約 2.1 V であり, 上記の (ス) V よりも {(セ) 貴である, 卑である, 大きい, 小さい}. これは, 酸の主成分が {(ソ) 硝酸, 過塩素酸, 硫酸, ヘキサフルオロケイ酸} であり, それによって放電生成物が難溶性の鉛(II)塩となるよう電池が設計されているためである. この難溶性塩の共存によって, 電解液中の $\text{Pb}^{2+}(\text{aq})$ の活量が 1 から大きく変わっており, その結果として起電力が約 2.1 V となっている. この 2.1 V と上記の (ス) V の差からは, 電解液中の $\text{Pb}^{2+}(\text{aq})$ の活量が約 (タ) であると概算される. この活量値は, 上で述べた難溶性の鉛(II)塩について市販のデータ集に記載されている溶解度積 (温度 298 K) が {(チ) 2×10^{16} , 2×10^8 , 2×10^{-8} , 2×10^{-16} } であることとも矛盾がない.

問6 文中の (サ) に入る適切な反応式を答えよ.

問7 文中の (シ), (ス), (タ) に入る適切な数値を答えよ. 必要に応じて表1と表2に記載の熱力学データを使い, (シ) と (ス) については小数第2位まで計算せよ. また, (タ) については, 「 10^4 」や「 10^{-2} 」のようにそのオーダーのみを答えよ.

問8 文中の (セ), (ソ), (チ) に入る最も適切な語や数値を { } 内から選べ.

問9 図2に示されるように, 鉛蓄電池は, 水のいわゆる電位窓よりも広い起電力をもつ. これが可能になっている理由を述べよ.

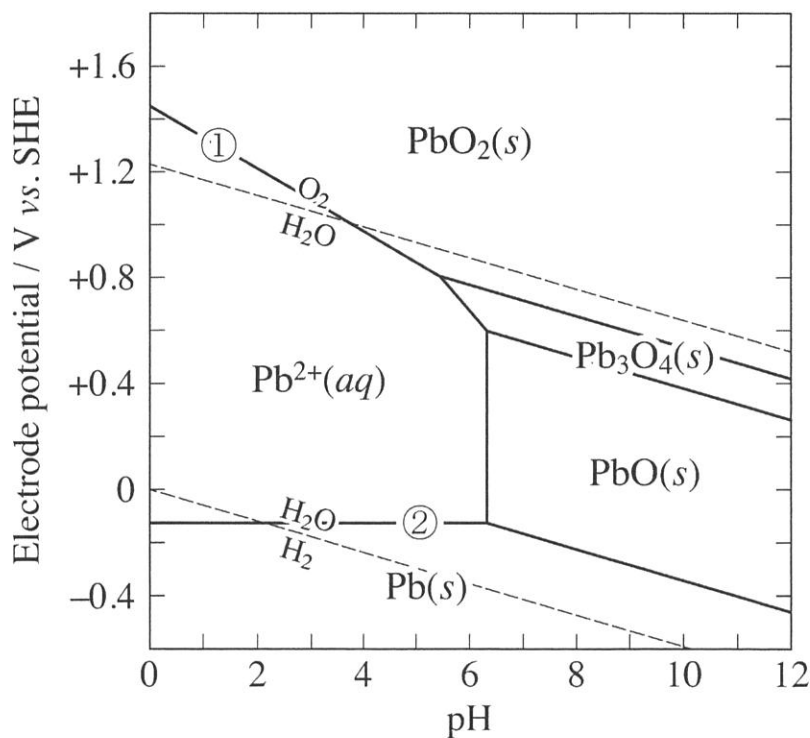


図2

材料基礎学 B

[問題 2]

《文章 A》, 《文章 B》を読み, 問 1~6 に答えよ。

《文章 A》

A, B 2 種類の原子が 1 : 1 の原子数比で立方格子を形成する A-B 二元系合金について考える。
この合金では以下の条件が成り立っているとする。

1. 原子が立方格子の頂点および体心位置をとる体心立方構造の原子配列をしている。
2. A, B 原子数はそれぞれ N , 総原子数は $2N$ である。 N は極めて大きな巨視的な数である。
3. 原子間相互作用は最近接原子間のみに働き, AA, BB, AB 最近接原子間に働く原子間相互作用エネルギーをそれぞれ J_{AA} , J_{BB} , J_{AB} と書く。 J_{AA} , J_{BB} , J_{AB} 間には

$$J = \frac{J_{AA} + J_{BB}}{2} - J_{AB} > 0 \quad (1)$$

の関係が成り立っており, 最近接原子位置を異なる原子種が占めた方がエネルギーが低い。

4. 格子振動や熱膨張などは無視でき, 内部エネルギーは原子間相互作用エネルギーの総和で決まる。

3, 4 の条件から, 内部エネルギーの最も低い構造は全ての最近接位置を異なる原子種が占める構造である。 (a) 体心立方構造の頂点位置の最近接は体心位置であるため, その構造は頂点, 体心位置をそれぞれ A 原子のみ, B 原子のみが占めた(あるいはその逆に, 頂点, 体心位置をそれぞれ B 原子のみ, A 原子のみが占めた)秩序状態の構造(秩序構造)である。対照的に, 頂点, 体心位置を A, B 原子がランダムに占有した無秩序状態の構造(無秩序構造)の内部エネルギーは高くなる。その一方, 原子配置の状態数を考えると, 秩序構造では少なく, 無秩序構造では極めて多い。従って, 低温では秩序構造が, 高温では無秩序構造が熱力学的に安定となる。この構造変化がどのように起こるかを以下で考察する。

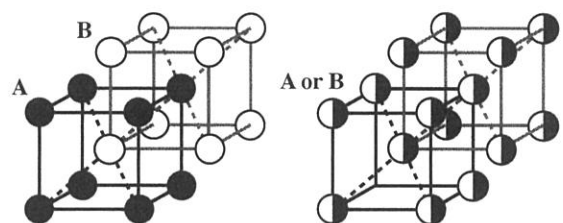


図 1. A-B 二元系合金の (左) 秩序状態, (右) 無秩序状態の構造。

まず, 構造変化を定量的に評価するために, 以下で定義される秩序変数 M を導入する。

$$N_1^A = \frac{N}{2} (1 + M), \quad N_1^B = \frac{N}{2} (1 - M), \quad N_2^A = \frac{N}{2} (1 - M), \quad N_2^B = \frac{N}{2} (1 + M) \quad (2)$$

材料基礎学 B

ここで, $N_1^{A \text{ (or B)}}$, $N_2^{A \text{ (or B)}}$ はそれぞれ, 頂点位置を占める A (or B) の原子数, 体心位置を占める A (or B) の原子数である. 秩序変数 M は -1 から 1 の値をとる秩序の度合いを表現する変数であり, $M = +1$ (or -1) は頂点, 体心位置をそれぞれ A (or B) 原子のみ, B (or A) 原子のみが占める完全な秩序構造を, $M = 0$ は頂点, 体心位置を A, B 原子が半分ずつ占める無秩序構造を, M が 0 から ± 1 の間は頂点, 体心位置を A, B 原子が部分的に偏って占有する不完全な秩序構造を表している. N が巨視的な数であるため, M を以下では近似的に連続変数とみなす.

秩序変数が M のときの内部エネルギー $U(M)$ を計算する. 条件 3, 4 および下線部 (a) から, 頂点位置とその最近接体心位置を AA, AB, BA, BB 原子対が占める最近接原子対の格子全体での総数 N_{AA} , N_{AB} , N_{BA} , N_{BB} が分かれば $U(M)$ を求めることができる. これらを正確に求めることは困難であるため, (b) ある体心位置を A, B 原子が占める確率 p_A , p_B はそれぞれ, その最近接頂点位置を占める原子の種類に関わらず, 全体心位置を A, B 原子が占める割合に等しいと近似する. すると, 式 (2) より, $p_A =$, $p_B =$ となる. ある頂点位置の最近接体心位置数は であるので, N_{AA} , N_{AB} , N_{BA} , N_{BB} はそれぞれ,

$$\begin{aligned} N_{AA} &= N_1^A \times \text{ア} \times \text{ウ}, & N_{AB} &= N_1^A \times \text{イ} \times \text{ウ} \\ N_{BA} &= N_1^B \times \text{ア} \times \text{ウ}, & N_{BB} &= N_1^B \times \text{イ} \times \text{ウ} \end{aligned} \quad (3)$$

となり, 合金系の内部エネルギーは以下のように求まる.

$$U(M) = \text{エ} \quad (4)$$

次に, 秩序変数が M のときのエントロピー $S(M)$ を計算する. 秩序変数が M となる状態数 $W(M)$ は, N 個の頂点および体心位置に式 (2) の数の A, B 原子を配置する場合の数なので,

$$W(M) = \text{オ} \quad (5)$$

となる, ここで, Y が大きいときに成り立つスターリングの公式 $\ln Y! \approx Y \ln Y - Y$ を使用すると, エントロピー $S(M)$ はボルツマン定数 k_B を使って, 以下のように求まる.

$$S(M) = \text{カ} \quad (6)$$

式 (4) の $U(M)$, 式 (6) の $S(M)$ から, 下線部 (b) の近似のもとで得られる温度 T , 秩序変数 M の自由エネルギー $F(T, M)$ は

$$F(T, M) = \text{キ} - T \times \text{ク} \quad (7)$$

材料基礎学 B

となる. 温度 T での熱平衡状態はこの $F(T, M)$ の M に関する極小条件で決まる. まず, $F(T, M)$ の M に関する極値条件から温度 T における M の熱平衡値の候補を決める関係式

$$M = \boxed{\text{キ}} \quad (8)$$

が求まる. (c) 式 (8) の右辺と左辺を秩序変数 M を変数とする関数として描いたグラフを見ると, 式 (8) の右辺 $\boxed{\text{キ}}$ の $M = 0$ での傾きから, 式 (8) の解は $T \geq T_c = \boxed{\text{ク}}$ では $M = 0$ の1つであり, $T < T_c$ では $M = 0, \pm M_0$ ($M_0 \neq 0$) の3つとなることが分かる. これらの式 (8) の解が $F(T, M)$ の極小値をとっているかは, 次の不等式で判定できる.

$$\boxed{\text{ケ}} > 0 \quad (9)$$

(d) $M = 0$ の解は $T > T_c$ では条件 (9) を満たしているが, $T < T_c$ では満たしていない. 一方, $T < T_c$ の $M = \pm M_0$ の解は条件 (9) を満たしている. つまり, 熱平衡状態の秩序変数 M は $T \geq T_c$ では常に0, $T < T_c$ ではゼロでない値を持つことが分かり, A, B 原子の位置占有の秩序化が $T = T_c$ で起こることを示している. これは相転移であり, このような A-B 二元系合金の構造変化を秩序-無秩序相転移と呼ぶ.

T_c 近傍の秩序変数の温度依存性を計算する. T_c 近傍では M_0 は小さいと考えられるので, 式 (8) の右辺 $\boxed{\text{キ}}$ を M の3次までで展開して計算すると,

$$M_0 = \boxed{\text{コ}} \quad (10)$$

と求まり, 秩序変数 M は T_c で0から連続的に変化することが分かる.

問1 $\boxed{\text{ア}} \sim \boxed{\text{コ}}$ を数値, または, $N, M, J_{AA}, J_{BB}, J_{AB}, J, k_B, T, T_c$ の中から必要なものを用いて表した適切な式で埋めよ. ただし, $\boxed{\text{ク}}$ には T_c を用いてはいけない.

問2 下線部(c)にある, 式(8)の右辺の曲線の概形を, 解答欄のグラフ中に描け. ただし, グラフ中には式(8)の左辺の直線が既に描かれている.

問3 問2で描いたグラフの概形と式(9)の不等式を基に, 下線部(d)を示せ.

材料基礎学B

《文章B》

《文章A》で議論したA-B二元系合金の秩序-無秩序相転移はX線回折実験により観測できる。まず、結晶のX線回折一般について考える。本文章中の記号の定義は以下の通りである。

位置ベクトル： $\vec{r}$ 基本並進ベクトル： $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 格子点の位置ベクトル： $\vec{r}_p$ 単位胞内の原子 j の位置ベクトル： $\vec{r}_j$ 単位胞内の原子数： n 結晶内の単位胞の数： N 単位胞内の原子 j の原子散乱因子： f_j 散乱ベクトル： $\vec{k}$

ただし、散乱ベクトルは、X線の波長を λ 、入射X線方向、散乱X線方向の単位ベクトルを $\vec{s}_0, \vec{s}_1$ 、入射X線、散乱X線の波数ベクトルを $\vec{k}_0 = 2\pi\vec{s}_0/\lambda, \vec{k}_1 = 2\pi\vec{s}_1/\lambda$ として、 $\vec{k} = \vec{k}_1 - \vec{k}_0$ と定義される。また、虚数単位は i とする。

単位胞に n 個の原子が配置され、 N 個の単位胞が並んだ結晶のX線回折について考える。図2のように結晶中の原子位置 $\vec{r}$ を格子点の位置ベクトル $\vec{r}_p$ ($p = 1, \dots, N$)と単位胞内の原子位置ベクトル $\vec{r}_j$ ($j = 1, \dots, n$)に分けると、結晶からのX線の散乱 $F_s(\vec{k})$ は、以下のように、並進対称性に起因した散乱と単位胞内の原子配置に起因した散乱の寄与に分けることができる。

$$F_s(\vec{k}) = \left(\sum_{p=1}^N \boxed{\text{サ}} \right) \times \left(\sum_{j=1}^n \boxed{\text{シ}} \right) \quad (11)$$

まず、結晶の並進対称性に起因した散乱を考える。 $\vec{r}_p$ は整数 n_1, n_2, n_3 を用いて $\vec{r}_p = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ と表すことができ、 $\sum_{p=1}^N \boxed{\text{サ}}$ についての散乱が回折として観測される条件(回折条件)は、整数 h, k, l を用いて、

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{k} = 2\pi h, \quad \vec{a}_2 \cdot \vec{k} = 2\pi k, \quad \vec{a}_3 \cdot \vec{k} = 2\pi l \quad (12)$$

と書くことができる。新たに3つのベクトル $\vec{a}_1^*, \vec{a}_2^*, \vec{a}_3^*$ を導入して、散乱ベクトルを $\vec{k} = h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^* + l\vec{a}_3^*$ のように表すことにする。この散乱ベクトル $\vec{k}$ を回折条件に代入すると、3つのベクトルが満たすべき条件は、

$$h\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_1^* + k\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2^* + l\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_3^* = 2\pi h \quad (13)$$

$$h\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_1^* + k\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_2^* + l\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3^* = 2\pi k \quad (14)$$

$$h\vec{a}_3 \cdot \vec{a}_1^* + k\vec{a}_3 \cdot \vec{a}_2^* + l\vec{a}_3 \cdot \vec{a}_3^* = 2\pi l \quad (15)$$

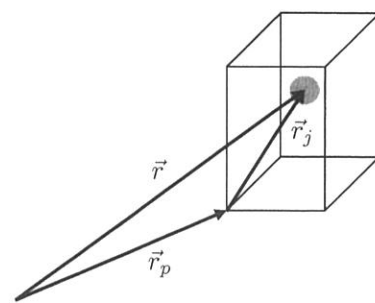


図2. 単位胞と位置ベクトル
 $\vec{r} = \vec{r}_p + \vec{r}_j$ の模式図。

材料基礎学 B

となる。この条件 (13), (14), (15) は, $\vec{a}_1^*, \vec{a}_2^*, \vec{a}_3^*$ を $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ を使って以下のように定義すれば満たすことができる。

$$\vec{a}_1^* = \boxed{\text{ス}} \quad (16)$$

$$\vec{a}_2^* = \boxed{\text{セ}} \quad (17)$$

$$\vec{a}_3^* = \boxed{\text{ソ}} \quad (18)$$

このベクトルは $\boxed{\text{タ}}$ の基本並進ベクトルと呼ばれる。

次に, 単位胞内の原子配置に起因した散乱から回折条件を考える。単位胞内 j 番目の原子位置ベクトル $\vec{r}_j$ を基本並進ベクトルを基底ベクトルとして表した $\vec{r}_j = x_j \vec{a}_1 + y_j \vec{a}_2 + z_j \vec{a}_3$, 散乱ベクトルを $\vec{k} = h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^* + l\vec{a}_3^*$ とおいて $\boxed{\text{シ}}$ を h, k, l, x_j, y_j, z_j を用いて表すと,

$$\sum_{j=1}^n \boxed{\text{チ}} \quad (19)$$

となる。これを構造因子といい, この構造因子がゼロ以外の値をとることが回折条件となる。

具体的な例として, 《文章 A》で議論した, A-B 二元系合金の構造因子を計算してみよう。A, B 原子の原子散乱因子を f_A, f_B とすると, 頂点位置と体心位置の平均の原子散乱因子 f_1, f_2 は秩序変数 M を使って

$$f_1 = \boxed{\text{ツ}} \quad (20)$$

$$f_2 = \boxed{\text{テ}} \quad (21)$$

と書け, 構造因子は $\boxed{\text{ト}}$ となる。従って, 例えば, 面指数 $\boxed{\text{ナ}}$ の構造因子は無秩序構造ではゼロであるが, 秩序構造ではゼロでない値となり, この回折の有無によって秩序-無秩序相転移を観測することができる。

問 4 $\boxed{\text{サ}} \sim \boxed{\text{ト}}$ について, 適切な語句や数値, 数式を答えよ。

問 5 散乱ベクトル $\vec{k} = h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^* + l\vec{a}_3^*$ が (hkl) 面に対し垂直であることを証明せよ。また, 散乱ベクトルの大きさ $|\vec{k}|$ が (hkl) 面間隔 d_{hkl} と $d_{hkl} = 2\pi/|\vec{k}|$ の関係にあることを証明せよ。なお, 証明は結晶系に依存しない形で行うこと。

問 6 $\boxed{\text{ナ}}$ に当てはまる面指数を一つ答えよ。

材料基礎学 B

[問題3]

物質の電氣的性質に関する以下の《文章A》および《文章B》を読み、それぞれの間に答えよ。

《文章A》

金属の電子状態を考える際の出発点として、自由電子気体モデルをとりあげる。十分に大きい1辺の長さが L の立方体の形状をもつ金属を考え、その端で周期的境界条件を課すと、規格化された波動関数は

$$\phi(x, y, z) = \sqrt{\frac{1}{\text{ア}}} \exp\{i(k_x x + k_y y + k_z z)\} \quad (1)$$

と書ける。ここで i は虚数単位、 x, y, z は座標(3次元直交座標系)、 k_x, k_y, k_z は波数ベクトルの各方向成分(実数)である。金属立方体の辺の方向が x, y, z 方向に一致しているとすると、周期的境界条件より、 k_x, k_y, k_z は の整数倍となることが要請される。

式(1)の波動関数のエネルギー固有値 E はポテンシャルエネルギーを0としたシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \phi(x, y, z) = E \phi(x, y, z) \quad (2)$$

を解くことで $E = \text{ウ}$ と求められる。ここで $\hbar$ はディラック定数、 m は電子の質量である。物質の電子物性を考える際にはエネルギー ε にどれだけ電子を収容できるかを表した状態密度関数

$$D(\varepsilon) = \frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon} \quad (3)$$

を考えることが重要である。ここで $N(\varepsilon)$ はエネルギー ε 以下に収容できる電子の数である。これを自由電子気体モデルに当てはめよう。式(1)の波動関数で表される状態にスピナップ、スピンドアウンの2個の電子が収容可能であることに注意すると、状態密度関数は ε の関数として と求められ、 $D(\varepsilon)$ は ε の 乗に比例する。

残念ながら一部の金属を除き、多くの金属では自由電子気体モデルはその電子物性を説明するのに十分でない。それは多くの金属中では、その電子状態を考えると、正に帯電したイオンが形成するポテンシャルエネルギーを考慮する必要があるからである。それでも

材料基礎学 B

ポテンシャルエネルギーが小さい場合、電子状態密度関数は自由電子のそれでおおよそ近似できるが、ブリルアンゾーン境界ではエネルギーギャップが形成され、これに伴って電子状態密度関数も複雑なものとなる。

図1のような単純立方構造（格子定数 a ）をもつ仮想的な金属を考える。電子状態密度を考える際にブリルアンゾーン境界が問題になるかどうかは、電子数に依存する。簡単のため、空格子近似を使って検討しよう。空格子近似ではフェルミ面は球と考えることができるが、その半径 k_F は電子数に依存する。電子数が一原子あたり $\boxed{\text{カ}}$ 個のとき、 k_F を半径とする球が第一ブリルアンゾーン境界に接する。金属がこれより多くの電子数を持てば、フェルミ面が第一ブリルアンゾーン境界より外側に存在するようになり、占有された電子状態を検討する際、ブリルアンゾーン境界の影響を考える必要が出てくる。さらに電子数が十分に多くなると、第一ブリルアンゾーン内の状態は全て電子で占有される。第一ブリルアンゾーン内に収容できる電子数は一原子あたり $\boxed{\text{キ}}$ 個である。

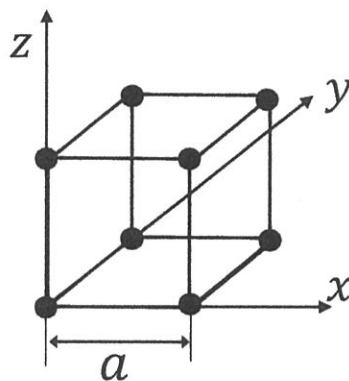


図1: 単純立方構造の仮想的な金属の模式図

問1 空欄 $\boxed{\text{ア}}$ ~ $\boxed{\text{エ}}$, $\boxed{\text{カ}}$ を適切な数式で埋めなさい。 $\boxed{\text{オ}}$, $\boxed{\text{キ}}$ を適切な数値で埋めなさい。

問2 下線部 ~~~~~ に関して実際の金属において自由電子気体モデルを使ってその電子物性が一番よく説明できる物質を次の括弧の中から1つ選べ。 {Ag, Al, Co, Fe, Na}

材料基礎学 B

《文章 B》

結晶性の複合酸化物の誘電分極に関して、以下で構成するモデルに基づいた考察を進める。

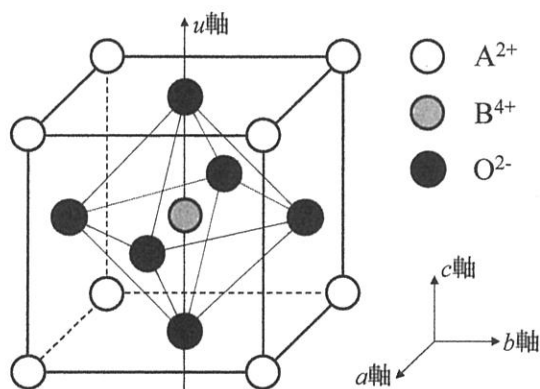


図 2: ABO_3 の単位胞の模式図および B^{4+} の変位軸 u

図 2 は、格子定数 $a = b \neq c$ の正方晶系において、頂点位置を 2 価の陽イオン A^{2+} 、体心位置を 4 価の陽イオン B^{4+} 、面心位置を -2 価の酸化物イオン O^{2-} が占有している組成式が ABO_3 の単位胞の模式的な構造を示している。この単位胞に以下のような条件を課したモデル（以下、「ABO モデル」と呼ぶ）を構成する。

条件 1. 格子定数 a と c は共に温度 T のみの関数であり、ある温度 T_g を用いて軸比 r は

$$r = \frac{c}{a}, \quad (r-1) \propto (T_g - T) \quad (4)$$

という関係で与えられる。以降は常に、 $0 < T < T_g$ となる条件を考える。

条件 2. 単位胞の体積 Ω は T に依らず一定である：

$$a^2 \cdot c = \Omega \quad (\text{一定}) \quad (5)$$

したがって、温度 T の低下に対して格子定数 a は { (あ) 増加する, 減少する, 不変である } ことがわかる。

まず外部電場がゼロの場合を考えよう。ABO モデルでは、 A^{2+} および O^{2-} は常に図 2 で示された頂点および面心位置を保つ。一方で B^{4+} の取る位置は、単位胞の体心位置を通る c 軸に平行な直線上に沿った次式のポテンシャルエネルギー曲線 V の最小点で与えられるとする：

材料基礎学 B

$$V(u) = \alpha(k-r)u^2 + \beta u^4 \quad (6)$$

ここで α, β および k は共に正の実定数, u については体心位置 $u=0$ を基準として $u>0$ が c 軸の正方向と対応している.

以上の設定の下で, B^{4+} の最安定位置が $u=0$ の場合, 単位胞中の正電荷と負電荷の重心位置は等しいため, 自発分極は起こらない. これをふまえると, ABO モデルが B^{4+} の変位に起因して自発分極するための条件は { (い) $k=r$, $k>r$, $k<r$ } で与えられることが分かる. 自発分極する条件下では, 正の値をとる B^{4+} の最安定位置: $u_0 = \text{ (う) }$ だから, 電気素量を e とすると, この単位胞での電気双極子モーメントの大きさ $M = \text{ (え) }$ となる. 自発分極の大きさ P_0 は単位体積あたりの M だから, 外部電場ゼロにおける ABO モデルでの自発分極の大きさは, 温度 T の低下に対して { (お) 増加する, 減少する, 不変である }.

次に自発分極した ABO モデルに対して, c 軸の正方向と平行に正の外部電場 $F(>0)$ を印加した場合を考える. このとき, 電気双極子モーメント $\tilde{M}$ と電場 F との相互作用 $-\tilde{M}F$ を単位胞の体積 Ω で割ったものが, 電場によって付加的に B^{4+} が感じるポテンシャルエネルギーであるとしよう. すなわち, B^{4+} が感じるポテンシャルエネルギー $\tilde{V}$ は以下のように表される:

$$\tilde{V}(u) = \alpha(k-r)u^2 + \beta u^4 - \frac{\tilde{M}F}{\Omega} \quad (7)$$

この条件下では, B^{4+} の最安定位置は u が { (か) 正, 負, ゼロ } の場合である. この最安定位置 $\tilde{u}$ が, 外部電場ゼロの場合の最安定位置 u_0 と比較して微小な差

$$\tilde{u} = u_0 + \delta u, \quad \left| \frac{\delta u}{u_0} \right| \ll 1 \quad (8)$$

であったとしよう. このとき, $|d| \ll 1$ に対して $(1+d)^f \simeq 1+fd$ という近似を用いれば, $F>0$ における分極の大きさ P_F と外部電場ゼロでの分極の大きさ P_0 の差: $P_F - P_0 = \text{ (き) }$ と求められ, これは常に正となることがわかる.

問3 空欄 (う) , (え) および (き) に入る数式を, $r, \Omega, k, \alpha, \beta, e$ および F の中から必要なものを用いて表せ.

問4 選択肢 { (あ) }, { (い) }, { (お) } および { (か) } に入る適切な数式または語句を選択せよ.

2027年度（令和9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 : 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. 受験番号・氏名を解答冊子の※印の箇所に記入すること.
3. 問題冊子は表紙と白紙1枚のほかに 5 ページである.
4. 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.
5. 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]

3×3 実対称行列 A を

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & -1 \\ 2 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & 4 \end{pmatrix}$$

とする。以下の問に答えよ。ただし、 O は 3×3 零行列、 I は 3×3 単位行列とする。

問 1 任意の実対称行列において、異なる固有値に対する固有ベクトルは互いに直交する。これを証明せよ。

問 2 以下の (1), (2), (3) に答えよ。

(1) A の固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ ($\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_3$) を全て求めよ。

(2) 各固有値 λ_i ($i = 1, 2, 3$) に対する固有ベクトル $\boldsymbol{x}_i$ を求めよ。

(3) 各固有ベクトル $\boldsymbol{x}_i$ ($i = 1, 2, 3$) に対する正規直交基底

$$\boldsymbol{u}_i = \begin{pmatrix} p_i \\ q_i \\ r_i \end{pmatrix}$$

を求めよ。ただし、 p_i は正の実数とする。

(次頁に続く)

工業数学

問3 問2で求めた正規直交基底 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3$ を用いて, 3×3 正方行列 P_i を以下のように定める.

$$P_i = \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^T \quad (i = 1, 2, 3)$$

ただし, $\mathbf{u}_i^T$ は $\mathbf{u}_i$ の転置を表す. 以下の (1), (2) に答えよ.

(1) 以下の式が成り立つことを示せ.

$$P_i P_j = \begin{cases} P_i & (i = j) \\ O & (i \neq j) \end{cases}, \quad P_1 + P_2 + P_3 = I$$

(2) 行列 P_i と実数 a_i を用いることで, 行列 A を

$$A = \sum_{i=1}^3 a_i P_i$$

と表せる. a_1, a_2, a_3 を求めよ.

問4 行列 A の指数関数を次の無限級数で定義する.

$$e^A \equiv \sum_{m=0}^{\infty} \frac{A^m}{m!} = I + A + \frac{1}{2!} A^2 + \frac{1}{3!} A^3 + \cdots$$

このとき, $e^A = e P_1 + e^3 P_2 + e^6 P_3$ と表せることを示せ.

問5 3×3 実正方行列 X が $XA = AX$ を満たすとする. このとき, 実数 b_i を用いて,

$$X = \sum_{i=1}^3 b_i P_i$$

と表せることを示せ.

工業数学

[問題 2]

関数 $f(x)$ のフーリエ変換 $F(k) = \mathcal{F}[f(x)]$ を

$$F(k) = \mathcal{F}[f(x)] \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(-ikx) dx$$

で定義する。ただし、 x および k は実数、 i は虚数単位である。以下に現れる積分はすべて絶対収束するものとし、必要な積分順序の交換を行ってよいものとする。このとき、以下の問に答えよ。また、必要に応じて次のガウス積分公式を用いてよい。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (a > 0)$$

問 1 分散 σ^2 を有する規格化ガウス関数

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \quad (\sigma > 0)$$

のフーリエ変換 $G(k) = \mathcal{F}[g(x)]$ を求めよ。

問 2 2つの関数 $f_1(x)$, $f_2(x)$ の合成積 $(f_1 * f_2)(x)$ を

$$(f_1 * f_2)(x) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f_1(x-y)f_2(y) dy$$

で定義する。 $f_1(x)$, $f_2(x)$ のフーリエ変換をそれぞれ $F_1(k)$, $F_2(k)$ とするとき、

$$\mathcal{F}[(f_1 * f_2)(x)] = F_1(k)F_2(k)$$

が成り立つことを示せ。

(次頁に続く)

工業数学

問 3 n を 2 以上の整数とし, n 個の関数 $f_1(x), f_2(x), \dots, f_n(x)$ のフーリエ変換をそれぞれ

$$F_j(k) = \mathcal{F}[f_j(x)] \quad (j = 1, 2, \dots, n)$$

とする. このとき, n 個の関数の合成積 $(f_1 * f_2 * \dots * f_n)(x)$ を

$$\begin{aligned} & (f_1 * f_2 * \dots * f_n)(x) \\ & \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f_1(x - y_2 - \dots - y_n) f_2(y_2) \dots f_n(y_n) dy_2 \dots dy_n \end{aligned}$$

で定義する. この n 個の関数の合成積のフーリエ変換を $F_1(k), F_2(k), \dots, F_n(k)$ を用いて表せ. ただし, 導出過程も示すこと. なお, 合成積の結合則 $(f_a * f_b) * f_c = f_a * (f_b * f_c) = f_a * f_b * f_c$ は認めてよい.

問 4 n を 2 以上の整数とし, $\sigma_j > 0$ ($j = 1, 2, \dots, n$) とする. 分散 σ_j^2 を有する n 個の規格化ガウス関数

$$g_j(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_j} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_j^2}\right)$$

の合成積

$$h(x) = (g_1 * g_2 * \dots * g_n)(x)$$

を考える.

(1) $h(x)$ のフーリエ変換 $H(k) = \mathcal{F}[h(x)]$ を求めよ.

(2) (1) の結果と問 1 の結果を比較し, $h(x)$ が分散 σ_{eff}^2 を有する規格化ガウス関数 $g_{\text{eff}}(x)$ と一致するとしたとき, σ_{eff}^2 を σ_j を用いて表せ.

工業数学

[問題 3]

摩擦のない力場を考える．力場 $\mathbf{F}$ における質点 m の運動は

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = m \frac{d^2 \mathbf{r}(t)}{dt^2}$$

で与えられる．ただし， t は時刻， $\mathbf{r}(t)$ は質点 m の位置である．

いま，3次元デカルト座標系で，力場 $\mathbf{F}_1 = -\nabla \phi_1$ で定義されるポテンシャル

$$\phi_1 = -x^2 - \frac{1}{2}y^2 + \frac{3}{2}z^2$$

が存在する空間 V_1 を考える．この空間 V_1 の位置 $\mathbf{r}$ に質点 m を置く．このとき，以下の問に答えよ．なお，ベクトルの表記においては基底ベクトルを記述せず，成分のみを記述すること (例： $\mathbf{F} = (1, 2, 3)$)．

問 1 力場 $\mathbf{F}_1$ を求めよ．また， ϕ_1 のラプラシアン $\nabla^2 \phi_1$ を求めよ．

問 2 質点 m を初期位置 $\mathbf{r}(0) = (0, 0, a)$ (ただし $a \neq 0$) から時刻 $t = 0$ に静かに放した (すなわち $\left. \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right|_{t=0} = (0, 0, 0)$)．このとき，時刻 t における位置 $\mathbf{r}(t)$ を求めよ．

問 3 質点 m を初期位置 $\mathbf{r}(0) = (b, 0, 0)$ (ただし $b \neq 0$) から時刻 $t = 0$ に静かに放した．このとき，時刻 t における位置 $\mathbf{r}(t)$ を求めよ．

問 4 原点 $(0, 0, 0)$ が安定平衡点ではない理由を説明せよ．ただしここで，「安定平衡点」とは，その点における力場がゼロベクトルであり，かつ周囲のポテンシャルがその点よりも必ず高くなっている点と定義する．なお，問 1 から問 3 の結果を参考にして良い．

次に，同じく 3次元デカルト座標系で，ポテンシャル

$$\phi_2 = -x^2 y + y z^2$$

が存在する空間 V_2 を考える．このとき，以下の問に答えよ．

問 5 空間 V_2 内に安定平衡点が存在するなら，その位置を示せ．存在しないなら，その理由を述べよ．