

2026 年度（令和 8 年度）大学院工学研究科（博士前期課程）
専門試験問題
(物理工学系 材料機能プログラム)

注 意 事 項

1. 試験開始の指示があるまで、この問題冊子を開いてはいけません。
2. 問題は、1 ページから 9 ページまであります。解答用紙は、3 枚あります。ページの脱落等に気付いたときは、手をあげて監督者に知らせてください。
3. 下記表の問題を全て解答してください。1題につき解答用紙1枚を使用して解答してください。解答用紙の追加配付はありません。

問題番号	出題科目
11	量子物性
12	材料物理化学
13	金属材料学

4. 監督者の指示に従って、問題番号、志望プログラム及び受験番号を 3 枚の解答用紙の該当欄に必ず記入してください。
5. 計算用紙は、問題冊子の白紙ページを利用して下さい。
6. 解答用紙の裏にも解答を記入する場合には、表と上下を逆にして記入してください。
7. 机の上には、受験票、黒の鉛筆・シャープペンシル、消しゴム、鉛筆削り及び時計（計時機能だけのもの）以外の物を置くことはできません。
8. コンパス及び定規等は、使用できません。
9. 時計のアラーム（計時機能以外の機能を含む。）は、使用しないでください。
10. スマートフォン、携帯電話、ウェアラブル端末等の音の出る機器を全て机の上に出し、それらの機器のアラームを解除してから、電源を切り、かばん等に入れてください。
11. 試験終了まで退室できません。試験時間中に用がある場合は、手をあげてください。
12. 試験終了後、この問題冊子は持ち帰ってください。

問題 1.1 量子物性

設問すべてについて解答すること。プランク定数には、 \hbar あるいは $\hbar = h/2\pi$ を必要に応じて用いよ。

I 図 1 に示す一次元井戸型ポテンシャル中の粒子の束縛状態について、次の（1）～（4）の問いに答えよ。粒子の質量を m とし、ポテンシャル $V(x)$ は以下のとおりとする。

$$V(x) = 0 \quad \left(-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \right)$$

$$V(x) = V_0 \quad \left(x \leq -\frac{L}{2}, \quad \frac{L}{2} \leq x \right)$$

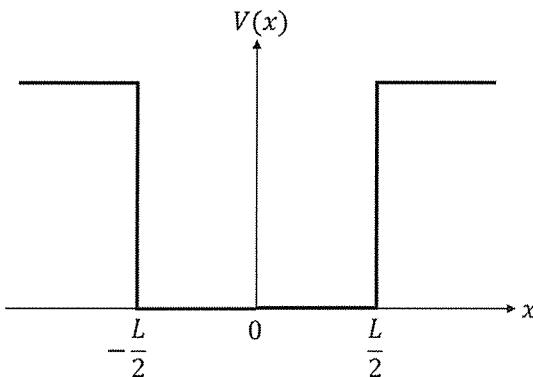


図 1

(1) この粒子のシュレディンガーアルゴリズム (時間を含まない) を記せ。波動関数を $\psi(x)$ 、エネルギー一固有値を E とせよ。

(2) $V_0 = \infty$ の場合に、シュレディンガーアルゴリズムを解いて粒子の波動関数とエネルギー一固有値を求めよ。導出過程も示すこと。ただし、波動関数は規格化せよ。以下の境界条件を使え。

$$\psi\left(\pm\frac{L}{2}\right) = 0$$

(3) 図 2 を解答用紙に書き写して、(2) で求めた $V_0 = \infty$ の場合の波動関数の形状を、エネルギーが最も低いものから順に 3 番目まで、できるだけ正確に記入せよ。適宜、特徴的な点の座標の値も図に記入せよ。1 番目～3 番目の波動関数を、それぞれ個別の図に示すこと。

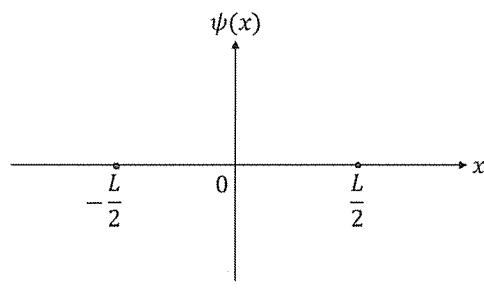


図 2

(4) (3) で示した $V_0 = \infty$ の場合の波動関数は、 V_0 が有限な大きさの場合と比べて、どのような点が異なるか述べよ。

II 以下の文章を読んで、次の（1）～（4）の問い合わせに答えよ。電子の質量は m 、文章中の金属結晶の電子数密度は n とする。

金属結晶中を運動する電子のエネルギーは、問題Iの一次元井戸型ポテンシャルを三次元に拡張した箱型ポテンシャルを使って求めることができる。このとき、結晶を構成する原子が作る周期的なポテンシャルは考えず、箱の内部のポテンシャルはゼロとする。また、箱型ポテンシャルは図3に示すように一辺の長さが L の立方体形状であり、箱の外のポテンシャルは無限大とする。以下に示す x 、 y 、 z の三方向の周期的境界条件を適用してシュレディンガ一方程式を解けば、電子の波動関数 $\varphi(x, y, z)$ とエネルギー固有値 E を求めることができる。

$$\varphi(x, y, z) = \varphi(x + L, y, z) = \varphi(x, y + L, z) = \varphi(x, y, z + L)$$

- (1) 電子波の波数ベクトル $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ を用いて、電子のエネルギー固有値 E を示せ。
- (2) 電子のとり得る波数ベクトルは、三次元の波数空間において単純立方格子の格子点として表される。波数空間で最隣接にある格子点どうしの間隔を示せ。
- (3) 絶対零度において電子がとる最大の波数（フェルミ波数）の大きさと、その電子のエネルギー（フェルミエネルギー）を、問題文中に使われている記号を使って示せ。
- (4) この金属は、格子定数 a の単純立方格子の格子点にそれぞれ同一元素の一価の陽イオンが配置された構造をとるとする。第1ブリュアンゾーンには最大何個の電子を配置することができるか。問題文中に使われている記号を使って解答せよ。

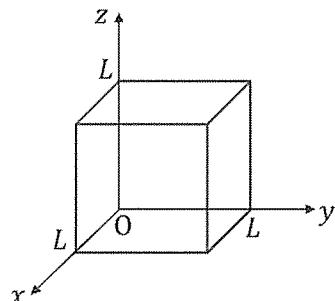


図3

III 以下の文章を読んで、次の（1）～（8）の問い合わせに答えよ。

図4は真性半導体（または固有半導体）のエネルギーバンドを模式的に示している。電子のエネルギーを ε 、波数を k とする。価電子帯の頂上と伝導帯の底は同じ波数(i)（この場合は $k = 0$ ）にある。価電子帯と伝導帯の波数 k におけるエネルギーを、それぞれ $\varepsilon_v(k)$ 、 $\varepsilon_c(k)$ と表す。価電子帯の頂上のエネルギーは E_V で、伝導帯の底のエネルギーは E_C である。 E_V と E_C の間には電子状態が存在しない(ii)。価電子帯の電子の一部は伝導帯に熱励起され、伝導電子となる。このとき価電子帯には正孔が生成する。伝導帯の電子数密度 n は、伝導帯の状態密度 $g_c(\varepsilon)$ とフェルミ分布関数 $f(\varepsilon)$ を使って次式のように表される。

$$n = \int_{E_C}^{\infty} g_c(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \quad ①$$

$$f(\varepsilon) = \left(\exp\left(\frac{(\varepsilon - \varepsilon_F)}{k_B T}\right) + 1 \right)^{-1} \quad ②$$

ここで ε はエネルギー、 ε_F はフェルミエネルギー、 k_B はボルツマン定数、 T は温度である。価電子帯の正孔数密度 p も同様に価電子帯の状態密度 $g_v(\varepsilon)$ とフェルミ分布関数を用いて表される。伝導帯と価電子帯の状態密度は、それぞれ以下の式で表されるとする。 A は正の定数である。

$$g_c(\varepsilon) = A\sqrt{\varepsilon - E_C} \quad (\varepsilon \geq E_C) \quad ③$$

$$g_v(\varepsilon) = A\sqrt{E_V - \varepsilon} \quad (\varepsilon \leq E_V) \quad ④$$

式①に式②、③を代入し積分して温度 T での伝導帯の電子数密度 n を求めることができる(iii)。このとき、比較的低温において積分範囲内のエネルギーでは $\varepsilon - \varepsilon_F \gg k_B T$ であることを使って、フェルミ分布をマクスウェル分布で近似できる。温度 T における真性キャリア密度 $n_i(T)$ は、 $np = (n_i(T))^2$ から求められる。

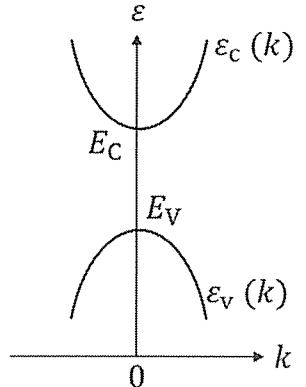


図4

(1) 下線部(i)で示した特徴をもつ半導体の呼称を記せ。また、そのような特徴を有する化合物半導体の物質名を一つ記せ。

(2) 下線部(ii)に記述されている E_V と E_C の間のエネルギー領域の呼称を記せ。

(3) 伝導帯の電子の有効質量 m_e を、 $\varepsilon_c(k)$ を用いて示せ。

(4) 解答用紙に図5を書き写して、 $T = 0$ と $T > 0$ の場合のフェルミ分布関数の形状を記入せよ。

温度による違いが分かるように工夫すること。縦軸にフェルミエネルギー ε_F の位置を記入せよ。

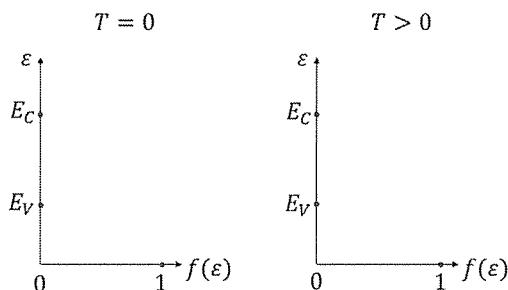


図5

(5) 下線部(iii)に記述されている計算を実施して電子数密度 n を求めよ。次の関係を使ってよい。

$$\int_0^\infty \sqrt{x} \exp(-x) dx = \sqrt{\pi}/2$$

(6) 僮電子帯の正孔数密度 p は $g_v(\varepsilon)$ と $f(\varepsilon)$ を用いて①式と同様に次式で表すことができる。この式の(ア)～(ウ)に入る適当な数値、数式、あるいは記号を示せ。

$$p = \int_{\boxed{(\text{イ})}}^{\boxed{(\text{ア})}} \boxed{(\text{ウ})} d\varepsilon$$

(7) 僮電子帯の正孔数密度 p を(5)と同様に計算して求めよ。真性半導体では $n = p$ であることを利用して、フェルミエネルギー ε_F を E_V と E_C を用いて表せ。

(8) 真性キャリア密度は、 $n_i(T) = \sqrt{np} \propto T^\alpha \exp\left(-\frac{\beta}{k_B T}\right)$ で示されるように、温度 T に依存することを導出できる。この式の α 、 β に入る適当な数値あるいは数式を示せ。

問題 1 2 材料物理化学

設問すべてについて解答すること。ただし、温度は T/K 、ガス定数は $R/JK^{-1}mol^{-1} = 8.31$ とする。
また、解答に際して以下の数値を適宜用いても良い。

$$\ln 2 = 0.690, \ln 3 = 1.10, \ln 5 = 1.61, e = 2.72, e^{1/2} = 1.65, e^{1/3} = 1.40$$

※ e は自然対数の底（ネイピア数）である

I 蒸気圧を無視できるある元素A, BからなるA – B二元系の完全混合溶液がある。以下の問いに答えよ。ただし、Aのモル分率を x_A とする。

- (1) 代表的な溶液モデルとして理想溶液と正則溶液がある。理想溶液に対して正則溶液の違いを説明せよ。
- (2) A – B二元系が理想溶液であったとき、混合のギブズエネルギー $\Delta_{mix}G^{\text{ideal}}$ を示せ。
- (3) A – B二元系が正則溶液であったときは成分Aの活量係数 γ_A は以下の式で表される。式の名称を記せ。

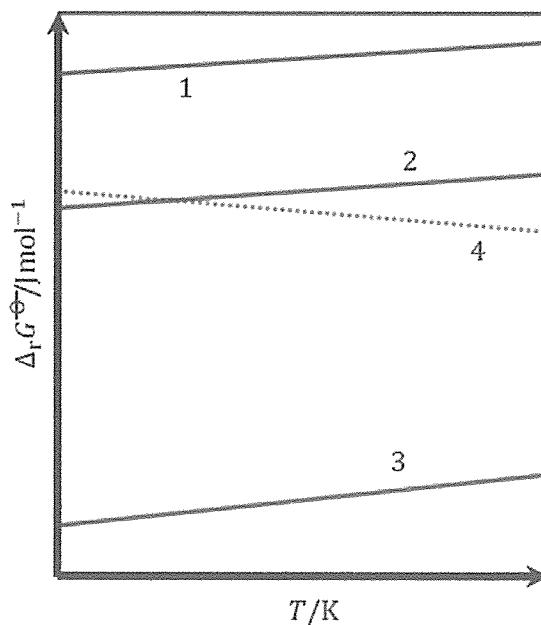
$$\ln \gamma_A = \frac{\Omega}{RT} (1 - x_A)^2$$

ただし、 $\Omega/Jmol^{-1}$ は定数

- (4) A – B二元系が正則溶液であったとき、混合のギブズエネルギー $\Delta_{mix}G^{\text{reg}}$ を Ω を使って示せ。
- (5) A – B二元系の正則溶液において各成分の純粋状態のモルギブズエネルギーが等しいとする。様々な濃度の溶液を高温から冷却したら $x_A = 0.500, T/K = 600$ において、この溶液が2つの液相に相分解する上部臨界溶解温度が現れることがわかった。この溶液の Ω を有効数字3桁で求めよ。
- (6) この溶液が $x_A = 0.500, T/K = 600$ のとき、成分Aの活量 a_A を有効数字3桁で求めよ。

II 酸化物生成の反応の標準反応ギブズエネルギー $\Delta_r G^\ominus / \text{J mol}^{-1}$ を温度の関数として示した図にエリンガム図がある。エリンガム図は酸化物生成のし易さを図的に比較できる図である。下の図の実線 1～実線 3 は Fe が FeO に、Al が Al₂O₃ に、Cu が Cu₂O に酸化するいずれかの標準反応ギブズエネルギーをある温度範囲で示している。また、図中破線 4 は C が CO に酸化する標準反応ギブズエネルギー（ただし、CO の活量は “1”）を示す。以下の問いに答えよ。

- (1) 図に示されている各標準反応ギブズエネルギーは温度に対して 1 次の関数に近い。その理由を述べよ。
- (2) 図中の実線 1～実線 3 で示される反応について、それぞれ反応式を記せ。
- (3) エリンガム図が酸化のし易さを図的に示すことができる理由およびそのことに対する各線の意味を述べよ。
- (4) 図中実線 2 は破線 4 と交差している。交点の温度に対する意味を述べよ。



エリンガム図

問題 1.3 金属材料学

設問すべてについて解答すること。

I 次の文章を読んで空欄 (①) ~ (⑫) に入る数式、語句を記せ。

数 10 kV の高い電圧(以下、管電圧)を陰極(フィラメント)と金属陽極(ターゲット)の間にかけた際、陰極から引き出された電子がターゲットに高速で衝突する場合に X 線が発生する。X 線とは空間の(①)と(②)が互いに直交しながら空間を伝搬する波の一種である。光の速度を c , プランク定数を h , 波長を λ とするとき, X 線の振動数は(③), エネルギーは(④), 運動量は(⑤)と記述することができる。ターゲットに用いた金属固有の波長をもつ強い強度の X 線を(⑥)と呼び, 主に粉末 X 線回折測定による結晶構造解析に用いられる。一方, 強度は(⑦)に比べ 1/100 程度ではあるが幅広い波長に強度をもつ X 線を(⑧)と呼び, 主にラウエ測定による単結晶試料の構造および方位解析に用いられる。

管電圧を上昇させた際には、(⑨)は全体的な X 線強度が増大するとともにその短い波長の限界(短波長端 : λ_{\min})は波長の短い側に移動する。この波長と管電圧の関係性を求めてみる。電子の電荷を e , 電極間の電圧を V とすると, ターゲットに衝突する際の電子の運動エネルギー K_E は(⑩)で与えられる。また, 電子の運動エネルギー K_E は衝突直前の電子の速度 v と電子の質量 m を使うと(⑪)で与えられる。ターゲットに衝突した電子がその運動エネルギーを全て失い X 線に変換される場合に, 最大のエネルギーの X 線が発生する。この時の X 線の波長を λ_{\min} とすると λ_{\min} と V との間には(⑫)の関係式が成り立つ。X 線の特徴として、(⑬)と(⑭)の 2 つの性質を持つことが知られており, これを光の二重性と呼ぶ。

II 透過法による X 線回折測定では、試料に入射した X 線がどれだけ試料内で吸収されるかを考慮する必要がある。次の（1）～（4）の問い合わせについて答えよ。なお、解答には自然対数、根号(ルート)は残してもよい。

- (1) 強度 I_0 の X 線を物質表面に照射し、この X 線が均質物質中を透過するとき、X 線強度の減少率は物質内を通過した距離 x に比例することが一般的に知られている。この際の比例定数は物質中の X 線の線吸収係数 μ が用いられる。X 線が通過した距離 x とその距離における物質中の X 線の強度 $I(x)$ との関係式を求めよ。なお、計算の過程についても記述すること。
- (2) (1) の結果を用いて、透過 X 線量を半減するのに必要な厚さ（半価層）を求めよ。
- (3) 特定のエネルギーを持つ X 線に対する単体物質の質量吸収係数を κ 、密度を ρ とする。この物質の線吸収係数 μ と質量吸収係数、密度との間の関係式を求めよ。
- (4) 特定のエネルギーを持つ X 線を照射した際のチタン酸ストロンチウム (SrTiO_3) 粉末試料における半価層を求めよ。この粉末試料はチタン酸ストロンチウムが体積の 80 % を占めており、残りは空気である。チタン酸ストロンチウムの密度は d とする。必要に応じて、各元素の原子番号、原子量、このエネルギーの X 線における質量吸収係数の値は以下の表の値を利用せよ。なお空气中における X 線の吸収は無視できるとする。

	原子番号	原子量	質量吸収係数
Sr	38	a	x
Ti	22	b	y
O	8	c	z

III 原子量 M (g/mol)の原子で構成された格子定数 a (m)を持つ面心立方構造の物質を考える。次の(1)～(9)の問い合わせについて答えよ。必要ならアボガドロ数 N_A (個/mol), 円周率 π を用いててもよい。なお、解答には根号(ルート)は残してもよい。

- (1) この物質の密度(g/m³)を与えられた量で答えよ。
- (2) 最近接原子および第2近接原子までの距離(m), 配位数を答えよ。
- (3) 剛体球を仮定した場合, 原子1個当たりの半径(m)を答えよ。
- (4) この物質の充填率を答えよ。
- (5) 四面体および八面体サイトにおける空隙のそれぞれの取り得る最大の半径(m)を答えよ。

この物質に対して粉末X線回折測定を行った。

- (6) この物質の構造因子 F_{hkl} を求めよ。構成する原子の原子散乱因子は f とする。 F_{hkl} は一般に以下の式で表される。ただし, h, k, l はミラー指数, f_j は単位格子中の j 番目の原子の原子散乱因子, x_j, y_j, z_j は j 番目の原子の座標, π は円周率, i は虚数単位である。

$$F_{hkl} = \sum_j f_j \exp[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)]$$

- (7) 回折が観測されないミラー指数の組合せとして, $h^2+k^2+l^2$ の値の小さい順番に4つ述べよ。なお, 等価な指数は代表的なものを1つ記し, 等価でない指数がある場合は全て記述すること。
- (8) 回折が観測されるミラー指数の組合せとして, $h^2+k^2+l^2$ の値の小さい順番に4つ述べよ。なお, 等価な指数は代表的なものを1つ記し, 等価でない指数がある場合は全て記述すること。
- (9) 回折が観測される場合, 構造因子の2乗で示される $|F_{hkl}|^2$ の計算結果を記述せよ。なお, h, k, l の組合せによって $|F_{hkl}|^2$ が異なる場合, 場合を分けて詳しく記述すること。