お茶の水女子大学大学院
人間文化創成科学研究科

平成３１年度入学試験（８月期）問題

一般選抜用

一般・基礎教育科目

（数学基礎）

理学専攻

数学コース用

時間　９：３０－１１：３０

注意事項

試験開始の合図があるまでこの冊子を開いてはいけません

(1) この冊子は持ち帰ってください．下書き用紙が不足するときや答案用紙を破損したときは手を挙げてください．
(2) 問題１から問題２まですべての問題に対して，それぞれ別の答案用紙に解答してください．答案用紙は裏面を使ってもかまいませんが，そのむねを表面に明記してください．
(3) 印刷の不明瞭な部分，ページの脱落などがあった場合は申し出てください．

問題 1　a, b を $a < b$ を満たす実数とし，$[a,b] \times [0,\infty)$ を定義域とする連続関数 $f : [a,b] \times [0,\infty) \to \mathbb{R}$ を考える．

今，広義積分 $\displaystyle\int_0^\infty f(x,y)dy$ が閉区間 $[a,b]$ 上で一様収束するとする．すなわち，任意の正の実数 ε に対してある実数 $M > 0$ が存在して，$d > M$ となる任意の実数 d と $a \leqq x \leqq b$ となる任意の実数 x について $\displaystyle\left|\int_d^\infty f(x,y)dy\right| < \varepsilon$ となる，とする．

このとき，

(1) x の関数 $\displaystyle\int_0^\infty f(x,y)dy$ が閉区間 $[a,b]$ 上で連続になることを示せ．

(2) 次の等式が成り立つことを証明せよ．

$$\lim_{t\to\infty} \int_0^t \left(\int_a^b f(x,y)dx \right) dy = \int_a^b \left(\int_0^\infty f(x,y)dy \right) dx$$

問題2

(1) 次の問いに答えよ．

(i) $A = (a_{ij})$ を (i, j) 成分が a_{ij} $(1 \leq i, j \leq n)$ である n 次複素正方行列とする．このとき，行列 A の行列式 $\det A$ の定義を述べよ．

(ii) 次の 6 次正方行列 A の行列式を求めよ．計算方法についても説明すること．

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b \\ 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d & 0 \\ e & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & f & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

ここで，a, b, c, d, e, f は複素数とする．

(2) 3 次実正方行列全体の集合 $\mathrm{M}_3(\mathbb{R})$ を通常の行列の和, 実数倍について実ベクトル空間とみなす．3 次実正方行列 S を次で定める:

$$S = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

この S に対し，$\mathrm{M}_3(\mathbb{R})$ の線形部分空間 V を次で定義する:

$$V = \{X \in \mathrm{M}_3(\mathbb{R}) |\ {}^t XS + SX = 0\}.$$

ここで，${}^t X$ は X の転置行列を表す．このとき次の問いに答えよ．

(i) V の基底と次元を求めよ．

(ii) 3 次実正方行列 H を次で定める:

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

このとき，線形写像 $T : \mathrm{M}_3(\mathbb{R}) \to \mathrm{M}_3(\mathbb{R})$ を $T(X) = HX - XH$ で定義する．V の元 X に対し $T(X)$ は V の元となることを示せ．

(iii) (ii) で定めた T を V に制限して得られる V の線形変換を $\tilde{T}$ で表す．$\tilde{T}$ の固有値とそれぞれの固有値に属する固有空間を求めよ．

平成３１年度

人間文化創成科学研究科・博士前期課程

理学専攻・物理科学コース

８月入試問題

基礎科目試験問題

（物理科学に関する基礎科目）

試験時間：９：３０—１２：３０

注意事項

（１）４問すべて解答すること。（各問１００点）

（２）解答は各問あたり１枚の解答用紙に記入すること。（裏面使用可）

（３）答案用紙に問題番号と問題名を記入すること。

（４）監督者の「始め」の合図をするまで、問題冊子を開けないこと。

（５）試験中、用のある場合は挙手をして監督者を呼ぶこと。

1　基礎科目- 力学

以下の問いに答えよ。

バネ定数 k のバネでつながれた質量 m_1 と m_2 の2個の質点が x 軸上を運動する。時刻 t での位置座標をそれぞれ $x_1(t)$ および $x_2(t)$ とする。バネの自然長はゼロとする。

(1) 質点 m_1 と m_2 に作用するばねの力を調べ、質点の運動方程式を求めよ。

(2) 換算質量 μ は $1/\mu = 1/m_1 + 1/m_2$ で与えられる。換算質量と全質量 $M = m_1 + m_2$ を用いて、2個の質点の運動の特徴を議論せよ。
ヒント：　相対座標 $x(t)$ および重心座標 $X(t)$ に対する運動方程式を導け。

$$x = x_1 - x_2\,, \quad X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}$$

(3) 時刻 t における相対座標 $x(t)$ と重心座標 $X(t)$ が与えられたと仮定して、質点の位置座標 $x_1(t)$ と $x_2(t)$ を求めよ。

(4) ベクトル $\boldsymbol{r}(t) = (x_1(t), x_2(t))$ を用いると、2個の質点の運動方程式は以下のように表されることを示せ。

$$-\frac{d^2}{dt^2}\boldsymbol{r} = A\boldsymbol{r}\,, \qquad A = \begin{pmatrix} k/m_1 & -k/m_1 \\ -k/m_2 & k/m_2 \end{pmatrix}$$

(5) 行列 A の特性方程式 $\det(\lambda I - A) = 0$ の解を求めよ。ただし I は2行2列の単位行列である。

(6) 2個の質点の固有振動を求め、その物理的意味を説明せよ。
（ヒント：行列 A の固有値 λ の固有ベクトル $\boldsymbol{u}$ に対して、$\boldsymbol{r}(t) = \boldsymbol{u}\exp(i\omega t)$ と仮定すると、運動方程式を満たす。ただし、$\omega = \sqrt{\lambda}$ である。また、i は虚数単位である。）

2 基礎科目– 電磁気学

電場 $\vec{E}$、磁束密度 $\vec{B}$ のかかる空間の中を電荷 q $(q>0)$ をもつ荷電粒子が速度 $\vec{v}$ で運動するとき、この荷電粒子には次式で与えられるローレンツ力がはたらく。

$$\vec{F}=q\left(\vec{E}+\vec{v}\times\vec{B}\right)$$

以下、系にかかる電磁場および荷電粒子の初期条件として 3 つの場合を考え、その中での荷電粒子の運動について考える。

(1) 系全体に一様な電磁場 $\vec{E}=0$、$\vec{B}=(0,0,B)$ がかかっている。時刻 $t=0$ において荷電粒子は原点にあり、そのときの速度は $\vec{v}=(v_0,0,0)$ とする。

  (i) xy 平面内における荷電粒子の運動方程式を書きなさい。

  (ii) 時刻 t における荷電粒子の位置を求めなさい。

  (iii) 荷電粒子の運動が円軌道を描くことを説明して、円の半径 R および角周波数 ω を求めなさい。

(2) 系全体に一様な電磁場 $\vec{E}=(E,0,0)$、$\vec{B}=0$ がかかっている。時刻 $t=0$ において荷電粒子は原点に静止しているものとする。

  (i) 時刻 t における荷電粒子の位置を求めなさい。

  (ii) 荷電粒子の位置が $x=l$ に到達するまでの時間を求めなさい。

(3) 系全体に一様な電磁場 $\vec{E}=(E,0,0)$、$\vec{B}=(0,0,B)$ がかかっている。時刻 $t=0$ において荷電粒子は原点に静止しているものとする。

  (i) 時刻 t における荷電粒子の速度を求めなさい。

  (ii) 荷電粒子がどのような軌跡をたどって運動するか説明しなさい。

3 基礎科目– 物理数学

1. 虚数単位を i とする（以下の設問でも同様)。$1+i$ の 3 乗根を求めよ。

2. $\mathbf{r} = (x, y, z)$, $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ とし、ベクトル場 $\mathbf{X}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ を定義する。ただし、$\mathbf{A}$ と $\mathbf{k}$ は空間座標に依存しないベクトルとする。このとき、$\nabla\cdot\mathbf{X}(\mathbf{r})$ および $\nabla\times\mathbf{X}(\mathbf{r})$ を計算せよ。

3. 実数 x の関数 $f(x)$ のフーリエ変換を

$$F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(ikx) f(x) \tag{1}$$

と定義する。a を正の実数とするとき $f(x) = \exp(-a\,|x|)$ に対するフーリエ変換 $F(k)$ を求めよ。

4. 次式で与えられる行列 M の固有値 λ_1, λ_2 を求めよ。ただし、$\lambda_1 < \lambda_2$ とする。

$$M = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix} \tag{2}$$

さらに、次式を満たす行列 O を求めよ。

$$O^{-1}MO = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \tag{3}$$

5. 複素数 z に関する複素関数 $g(z) = 1/(z-z_0)^n$ を、複素平面上の点 $z = z_0$ を中心とする半径 ρ の円上を一周する閉じた経路で積分し、結果を示せ。なお、n は正の整数、ρ は正の実数とし、留数定理は既知としないで解答せよ。

4　基礎科目- 量子力学

1次元調和振動子のハミルトニアンを

$$\hat{H}^{(0)} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

と表す。ここで、m は粒子の質量、ω は角振動数、$\hat{x}$、$\hat{p}$ はそれぞれ粒子の位置演算子、運動量演算子である。次の問に答えなさい。

(1) 消滅演算子 $\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}$、生成演算子 $\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}$ を定義する。交換関係 $[\hat{x},\ \hat{p}] = i\hbar$ であることから、$[\hat{a},\ \hat{a}^\dagger] = 1$ であることを示しなさい。さらに、演算子 $\hat{a}$、$\hat{a}^\dagger$ を用いて、ハミルトニアン $\hat{H}^{(0)}$ を表しなさい。

(2) $\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle (n = 0, 1, 2, \cdots)$ として、ハミルトニアン $\hat{H}^{(0)}$ のエネルギー固有値 $E_n^{(0)}$ を求めなさい。

(3) ハイゼンベルグ描像において、時刻 t における消滅演算子を $\hat{a}(t)$、生成演算子を $\hat{a}^\dagger(t)$ とする。$[\hat{a}(t),\ \hat{a}^\dagger(t)] = 1$ であることを示しなさい。

次に、ハミルトニアン $\hat{H}^{(0)}$ に摂動 $f\hat{x}$（ただし、f は実定数）が加わった場合を考える。すなわち、全ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + f\hat{x}$$

となる。ここで、

$$\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$$

を満たすとする。

(4) 摂動展開により、摂動の1次のエネルギー補正 $E_n^{(1)}$ を求めなさい。

(5) 摂動展開により、摂動の2次のエネルギー補正 $E_n^{(2)}$ を求めなさい。

(6) 摂動の2次までの範囲で求めた E_n が厳密であることを、ハミルトニアン $\hat{H}$ を用いて示しなさい。

平成３１年度

人間文化創成科学研究科・博士前期課程

理学専攻・物理科学コース

８月入試問題

専門科目試験問題

（物理科学に関する専門科目）

試験時間：１３：３０—１５：３０

注意事項

（１）４問中２問選択すること。（各問１５０点）
（２）解答は各問あたり１枚の解答用紙に記入すること。
　　（裏面使用可）
（３）答案用紙に選択した問題番号と問題名を記入すること。
（４）監督者の「始め」の合図をするまで、問題冊子を開けないこと。
（５）試験中、用のある場合は挙手をして監督者を呼ぶこと。

1　専門科目- 熱・統計力学

(1) N 個の独立な大きさ 1/2 のスピンからなる物理系が磁場 $\vec{H} = (0, 0, H)$ 中で絶対温度 T の熱平衡状態にある。ただし、H は正、または負の定数である。この系のハミルトニアンは $\mathcal{H} = -MH$ で与えられ、磁化を表す演算子は $M = \mu\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^z$ である。σ_j^z は j 番目のスピンの z 成分のパウリ行列を表し、μ は正の定数である。このような物理系の状態は密度行列 $\rho = e^{-\mathcal{H}/k_BT}/Z$ によって記述できる。Z は分配関数、k_B はボルツマン定数である。

(a) 密度行列 ρ を用いて磁化の平均値 $\bar{M}$ が $\bar{M} = -(\partial F/\partial H)_T$ で与えられることを示せ。ここで、F は物理系のヘルムホルツの自由エネルギーである。

(b) 分配関数 Z とヘルムホルツの自由エネルギー F を求めよ。

(c) 平均値 $\bar{M}$ を計算し、低磁場・高温極限 $(\mu H/k_BT \ll 1)$ での磁化率を求めよ。

(d) 密度行列 ρ を用いて、絶対ゼロ度と高温極限での物理系の状態を求め、それぞれの物理的意味を説明せよ。

(2) 質量 m、角振動数 ω の N 個の 1 次元調和振動子が絶対温度 T の熱平衡状態にある。ゼロ点エネルギーを基準にすれば、このシステムのエネルギーは $E = \hbar\omega\sum_{j=1}^{N}n_j$ で与えられる。ここで、n_j は j 番目の調和振動子の量子数であり、$\hbar$ は換算プランク定数である。

(a) この物理系の分配関数 Z とヘルムホルツの自由エネルギー F を求めよ。

(b) エネルギーの平均値 U とエントロピー S を求めよ。

一方、調和振動子を古典的に扱う場合に、分配関数 Z_c は次の式で与えられる。

$$Z_c = \int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^Nq\,d^Np}{(2\pi\hbar)^N}\,e^{-H_c(q,p)/k_BT}$$

ここで、$H_c(q,p) = \sum_{j=1}^{N}(p_j^2/2m + m\omega^2q_j^2/2)$ である。

(c) 古典的な調和振動子のヘルムホルツの自由エネルギー F_c とエネルギーの平均値 U_c を求めよ。正の数 a に対して次の積分が成り立つ。

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

(d) $U = U_c$ が成り立つための条件を求め、その物理的な意味を説明せよ。

2 専門科目－ 物性 （実験）

電気抵抗について次の問いに答えなさい。

（１） 物質に電場をかけると電子には電場に比例した力がかかるが、その運動はオームの法則に従い等速運動とみなせる。これについて解説せよ。

（２） 金属、半導体、絶縁体の抵抗の温度変化には傾向がある。それをバンド論から論ぜよ。

次に、電気抵抗の測定法に関連する以下の問いに答えなさい。

（３） テスターによる抵抗測定法の原理について述べなさい。

（４） 電気抵抗のより精度の高い測定法として四端子法が挙げられる。この測定法の原理について説明し、精度がより高くなる理由を説明しなさい。

（５） 電気抵抗値から電気伝導率を求める方法について説明しなさい。

（６） (5) の結果を踏まえ、(4) の方法によって、測定の精度を上げるための実験上の工夫を３点以上あげなさい。

3　専門科目– 物性（理論）（その１）

本問題では、Boltzmann 方程式を用い、電磁場下における結晶中の電子運動を考える。

一般的に、結晶中の電子は結晶を構成する原子の周期配列の影響を受け、Bloch 波で表されるエネルギー固有状態をとる。波数ベクトル $\mathbf{k}$ でのエネルギー固有値を $\varepsilon(\mathbf{k})$ とすると、Bloch 波で表される電子状態に関し、速度期待値 $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ は、

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$$

と表される。また電子系に外力 $\mathbf{F}$ が働いた時、

$$\hbar\frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{F}$$

の関係式が成立する。電子の分布関数を $f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)$ として、Boltzmann 方程式は

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathrm{d}\mathbf{r}}{\mathrm{d}t}\cdot\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{\mathrm{d}t}\cdot\frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = -\frac{f-f^0}{\tau(\mathbf{k})}$$

で表される。ここで、$\tau(\mathbf{k})$ は緩和時間、f^0 は平衡状態での f、すなわち Fermi 分布関数である。電子系に外力がかかる場合、Boltzmann 方程式の解として、f は平衡状態からずれた分布関数となる。右辺は散乱の効果を近似的に表しており、時間 τ 程度で電子系が平衡状態に戻る事を示す。

さて、磁束密度 $\mathbf{B}$ のもとで、伝導電子は Lorentz 力 $-e\mathbf{v}\times\mathbf{B}$ を受け、電流と磁束密度の垂直方向に曲げられる。曲げられた電子が試料端に蓄積することで、電流と磁束密度の垂直方向に電場が生じる。これを Hall 効果と呼び、磁束密度を計測するガウスメータの原理となっている。

この Hall 効果を以下の設問を通して定式化しよう。本問題では、電子状態が等方的かつ自由電子的であるとして扱う。また、絶対零度とみなせる系に対して、空間的に一様な外力がかかった際の定常状態を考える。すなわち全設問を通して次の式を仮定してよい。

- $\varepsilon(\mathbf{k}) = \hbar^2\mathbf{k}^2/2m^*$　（m^*：有効質量）.
- $-\mathrm{d}f^0/\mathrm{d}\varepsilon = \delta(\varepsilon-\varepsilon_\mathrm{F})$　（ε_F：フェルミエネルギー）.
- $\partial f/\partial t = 0$ かつ $\partial f/\partial \mathbf{r} = \mathbf{0}$、すなわち $f = f(\mathbf{k})$.

問１　三次元の電子系においてエネルギー ε 以下の状態数 $\Omega(\varepsilon)$ を、スピンの重率を含め、かつ単位体積当たりで定義すると、

$$\Omega(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3\mathbf{k}\,\theta\left(\varepsilon-\varepsilon(\mathbf{k})\right)$$

（次ページにつづく）

とおける。ここで $\theta(x)$ は、$x>0$ で 1、$x\leq 0$ で 0 となる階段関数である。以下の設問に答えよ。

(1) 電子状態密度 $D(\varepsilon)\equiv \mathrm{d}\Omega(\varepsilon)/\mathrm{d}\varepsilon$ を求めよ。
(2) 電子数密度 $n\equiv\int_0^\infty \mathrm{d}\varepsilon f^0(\varepsilon)D(\varepsilon)$ を、$D(\varepsilon_F)$ を用いて表せ。

問 2 x 方向に一様な電場 E_x ががかった定常状態を考える。電流密度を

$$\mathbf{j}\equiv-\frac{2e}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}^3\mathbf{k}\ \mathbf{v}(\mathbf{k})f(\mathbf{k})$$

と定義する。$\tau(\mathbf{k})=\tau(\varepsilon(\mathbf{k}))$（直接 $\mathbf{k}$ には依存しない）、および $v_x(\mathbf{k})^2=\frac{\mathbf{v}(\mathbf{k})^2}{3}$ を仮定し、以下の設問に答えよ。

(1) Boltzmann 方程式を用いて、$f(\mathbf{k})$ を E_x の一次の範囲まで計算し、$f^1(\mathbf{k})\equiv f-f^0=\frac{e\tau}{\hbar}E_x\frac{\partial f^0}{\partial k_x}$ となることを示せ。
(2) 波数空間における Fermi 分布関数の原点のずれを $\delta\mathbf{k}$ として、$f(\mathbf{k})\simeq f^0(\mathbf{k}-\delta\mathbf{k})$ とおいたとき、$f^0(\mathbf{k}-\delta\mathbf{k})$ のテイラー展開の一次と $f^1(\mathbf{k})$ とを比較することで、$\delta\mathbf{k}$ を求めよ。
(3) 平衡状態の場合 $\mathbf{j}=\mathbf{0}$ である。これを電流密度の定義式を用いて説明せよ。
(4) 電気伝導率 $\sigma\equiv j_x/E_x$ を、$\tau_\mathrm{F}\equiv\tau(\varepsilon_\mathrm{F})$ および n を用いて表せ。

問 3 xy 平面内に一様な電場 (E_x,E_y)、および z 方向に一様な磁束密度 B_z がかかった定常状態を考える。問 2 と同じ電子系において、電場および磁束密度の関数としての有効電場 $\mathbf{E}_\mathrm{eff}$ が Hall 効果を誘起するとする。このとき $f^1(\mathbf{k})=\frac{e\tau}{\hbar}\mathbf{E}_\mathrm{eff}\cdot\frac{\partial f^0}{\partial\mathbf{k}}$ で定義される $\mathbf{E}_\mathrm{eff}$ を用い、Boltzmann 方程式を近似的に解くことで、

$$\mathbf{v}\cdot\mathbf{E}=\mathbf{v}\cdot\mathbf{E}_\mathrm{eff}-\frac{e\tau}{m^*}(\mathbf{v}\times\mathbf{B})\cdot\mathbf{E}_\mathrm{eff}$$

の関係式が成立する。$\mathbf{E}_\mathrm{eff}$ は $\mathbf{v}$ に依存しないとして、以下の設問に答えよ。

(1) 有効電場 $\mathbf{E}_\mathrm{eff}$ を E_x、E_y、B_z を用いて記述せよ。
(2) $\omega_\mathrm{c}\equiv eB_z/m^*$ として、伝導率テンソル $\hat{\sigma}$ を求めよ。$\hat{\sigma}$ は以下で定義する。

$$\mathbf{j}=\hat{\sigma}\mathbf{E}\equiv\begin{pmatrix}\sigma_{xx} & \sigma_{xy}\\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy}\end{pmatrix}\mathbf{E}$$

(3) x 方向に電流を流し、y 方向には電流が流れないようにする。y 方向の試料端に蓄積された電荷が y 方向の電場を形成し、Hall 効果が誘起される。$E_y=R_\mathrm{H}B_zj_x$ で定義される Hall 係数 R_H を求めよ。

4 専門科目－ 素粒子・宇宙

次のどちらか１つを解答ください．

(1) ミクロな世界の素粒子の現象は量子力学が記述する．では，
a)古典論では正確に記述できない観測・実験の具体的事例を図や数式を用いて詳述し，
b)量子力学で正確に記述されることを，数式などを用いて説明して下さい．

(2) マクロな世界の宇宙物理の現象は（一般）相対性理論が記述する．では，
a) 非相対性理論では正確に記述できない観測・実験の具体的事例を図や数式を用いて詳述し，
b)相対性理論で正確に記述されることを，数式などを用いて説明して下さい．

平成31年度　お茶の水女子大学大学院
人間文化創成科学研究科（博士前期課程）

理学 専攻 ・ 化学・生物化学コース

8 月 院 試
専 門 科 目 試 験 問 題

試 験 日 ： 平成 30年 8月 23日（木）
試 験 時 間 ： 9時 30分 ～ 12時 00分

【注意事項】

1. 5問中3問選択すること。（各問100点）
2. 解答は各問題分野あたり1枚の答案用紙に記入すること。（裏面使用可）
3. 解答番号欄に、選択した問題分野の番号を記入すること。
4. 監督者が「始め」の合図をするまで、問題冊子を開けない
5. 試験中、用のある場合は挙手をして監督者を呼ぶこと。

1　物理化学

（1）分子構造と化学反応特性に関する以下の問 i)-v) に答えよ。

i)　水素分子の分子軌道は、2つの水素原子上の 1s 軌道の一次結合で表され、軌道エネルギー相関図は、図 1 のように描ける。2つの分子軌道の概形を描き、それらの特徴の違いを説明せよ。

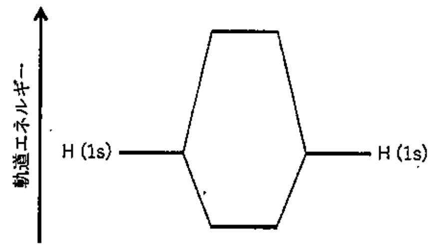


図 1 水素分子の軌道エネルギー相関図

ii)　エチレン分子の π 軌道は、2つの炭素原子上の 2p 軌道の一次結合で表される。図 1 にならって、エネルギー相関図を描き、2つの分子軌道の概形も描け。

iii)　ブタジエン分子の π 軌道は、エチレン分子の π 軌道の一次結合で表される。図 1 にならって、エネルギー相関図を描き、4つの分子軌道の概形も描け。

iv)　*trans*-ジクロロエチレンとブタジエンの Diels-Alder 反応について考える。生成物の構造について、分子軌道の観点から説明せよ。

v)　エチレン分子の二分子反応について考える。熱反応と光反応の場合の違いについて、分子軌道の観点から説明せよ。

（2）ハロゲン化水素（HX）分子の平衡核間距離（r_e）と双極子モーメント（μ）の値を表 1 に示す。H-X 結合のイオン性はそれぞれ何%か。ただし、電子の電荷は $e = 4.8 \times 10^{-10}$ esu（静電単位）であり、デバイ単位と静電単位との関係は、$D = 10^{-18}$ esu・cm である。

表 1 ハロゲン化水素の平衡核間距離（r_e）と双極子モーメント（μ）

	r_e / Å	μ / D（デバイ単位）
HF	0.92	1.83
HCl	1.28	1.11

（次ページへ続く）

（3） 液体 A を n_A モル、液体 B を n_B モル含む非理想溶液のギブズエネルギー G を

$$G = \left(n_A\mu_A^\circ + n_B\mu_B^\circ\right) + RT(n_A \ln x_A + n_B \ln x_B) + C\frac{n_A n_B}{n_A+n_B} \quad ①$$

として近似的に考える。ここで、$\mu_i^\circ\,(i = A, B)$ は純液体 i の化学ポテンシャル、x_i は成分 i のモル分率、C は A-B 分子対に固有な定数、R は気体定数、T は絶対温度である。以下の問 i)-v) に答えよ。

i) 純液体 A, B の混合によりギブズエネルギーはどれだけ変化したか。混合ギブズエネルギー ΔG_{mix} を液体分子の全物質量 $n(= n_A + n_B)$ 、x_A、x_B の関数として表せ。(n_A、n_B は使ってはならない。)

ii) 混合溶液中の成分 i の化学ポテンシャル μ_i を、ギブズエネルギー G の偏微分形として表せ。偏微分の固定変数を明示せよ。

iii) この混合溶液中の各成分の化学ポテンシャル $\mu_i\,(i = A, B)$ を求めよ。

iv) この溶液中の各成分の活量 $a_i\,(i = A, B)$ を求めよ。

v) C=3 のときを考える。混合溶液を作成後、十分に時間が経過したとき、溶液はどのようになるか。$\Delta G_{mix}/(nRT)$ の x_A 依存性を示すグラフを描き、分子 A, B 間に働く分子間相互作用がどのようなものであるか言及しつつ説明せよ。

2　無機化学

(1) 試験管に(a)モール塩 [$(NH_4)_2Fe(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$]を水に溶かしたものを入れ，ここにアンモニア水を加えると灰色の沈殿が生じる。この試験管をよく振りながら穏やかに加熱すると，徐々に強磁性を示す黒色の沈殿の生成がみられる。

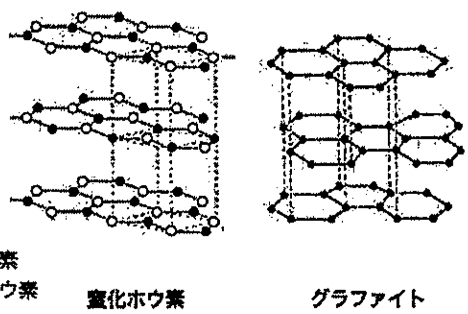
i) 下線(a)の溶液は酸性，中性，アルカリ性のいずれか。判断の理由も記せ。
ii) 文中の波線を付した灰色および黒色の沈殿の組成式を答えよ。

(2)下表に基づき以下の問いに答えよ。
i) NaCl(s)の生成エンタルピー(ΔH_f(NaCl))を表中の記号(ΔH_x: x = 1-8)を用いて表せ。
ii) $2NaCl(s) + F_2(g) \rightarrow 2NaF(s) + Cl_2(g) + \Delta H_0$ とする。ΔH_0を表中の記号(ΔH_x)を用いて表せ。またその数値を求めよ。

				ΔH_x / kJ mol^{-1}
$F_2(g)$	→	$2F(g)$	$+\Delta H_1$	+160
$Cl_2(g)$	→	$2Cl(g)$	$+\Delta H_2$	+248
$Na^+(g) + F^-(g)$	→	$NaF(s)$	$+\Delta H_3$	-894
$Na^+(g) + Cl^-(g)$	→	$NaCl(s)$	$+\Delta H_4$	-768
$F(g)$	→	$F^-(g)$	$+\Delta H_5$	-352
$Cl(g) + e^-$	→	$Cl^-(g)$	$+\Delta H_6$	-348
$Na(s)$	→	$Na(g)$	$+\Delta H_7$	+107
$Na(g)$	→	$Na^+(g) + e^-$	$+\Delta H_8$	+488

(3) 1族元素と2族元素の単体を比較すると，2族元素の方が圧倒的に高い融点を持つ（例えば，Li : 180 °C, Be: 1258 °C）。1族元素と2族元素では，単体の結晶格子が異なることや金属結合の強さについて考察した上で，融点の差が大きい理由について説明せよ。

(4) $(BN)_n$で表すことのできる窒化ホウ素と，炭素の単体の一つであるグラファイトはどちらも，6員環が2次元につながったレイヤーが積層した構造を持つ。しかし，右図のように積層の仕方は異なっており，窒化ホウ素は，ホウ素原子の上下に窒素原子が位置するように，6員環の位置をそろえて積層したパッキング構造をとる。一方，グラファイトでは，各2次元レイヤーは6員環が交互にずれて積層する。この積層構造の違いの理由について説明せよ。



図：窒化ホウ素とグラファイトの積層構造の比較

(5) NaN_3はDMF(ジメチルホルムアミド：極性を持つ有機溶媒)に難溶である。DMF中へ，アジドの溶解を促進するために加える物質として，適切と考えられるものは次の(a)-(c)のうちどれか？理由とともに答えよ。
(a) LiBr　(b) NaBr　(c) KBr

3　有機化学

（１）　次の(i)~ (iv)の各語を、例をあげて 3-5 行程度で説明せよ。

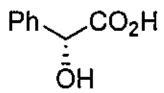
(i) マルコフニコフ則

(ii) 立体特異的反応と立体選択的反応

(iii) ジアステレオマー

(iv) ラジカル連鎖反応

（２）



(-)-Mandelic acid

左に示す(-)-マンデル酸の比旋光度は-158 である。ここに、(-)-マンデル酸と(+)-マンデル酸の混合物がある。この混合物の実測比旋光度は-63.2 であった。これに基づいて次の(i)、(ii)の問いに答えよ。

(i) (-)-マンデル酸は *R* 体、*S* 体のどちらか答えよ。

(ii) 混合物のエナンチオマー過剰率を求めよ。また、混合物中の(-)-マンデル酸、(+)-マンデル酸の割合はいくらか答えよ。

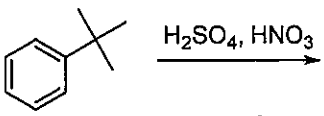
（３）　安息香酸メチル（$C_6H_5COOCH_3$）の以下の(i)、(ii)の２つの条件での加水分解反応の反応機構をそれぞれ示せ。

(i) 酸触媒反応

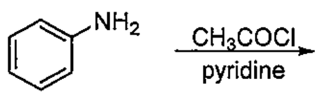
(ii) 水酸化物イオン促進反応

（４）　以下の(i)~ (iv)に示す反応の主生成物は何か記せ。さらに反応機構も示せ。

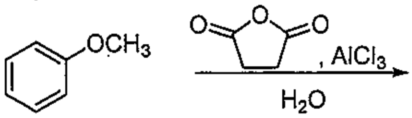
(i)



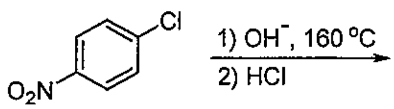
(ii)



(iii)



(iv)



4　生物化学

（１）タンパク質を構成する２０種類のアミノ酸の中から、ア）～カ）に該当するアミノ酸の名称を答え、側鎖を構造式で書け。

ア）プロキラルなアミノ酸

イ）不斉炭素をもつアミノ酸のうち、最も分子量が小さいもの

ウ）ジスルフィド結合を形成するアミノ酸

エ）タンパク質キナーゼによりリン酸化される芳香族アミノ酸

オ）*N*-結合型糖鎖が付加するアミノ酸

カ）水溶液のモル吸光係数（波長 280 nm）が最も大きい値をもつアミノ酸

（２）タンパク質の構造に関して、ア）～オ）の分析方法や測定でわかることを簡潔に答えよ。

ア）エドマン分解

イ）円二色性（CD）分析

ウ）ゲル濾過クロマトグラフィー

エ）ポリアクリルアミドゲル電気泳動

オ）X 線結晶構造解析

（３）脂質や細胞膜に関する以下の文章を読み、問１～４に答えよ。

動物の細胞膜を構成する主な脂質は［①］、［②］、［③］である。［①］は ア) グリセロール、脂肪酸、リン酸、極性基が結合した構造を持つ。［②］はスフィンゴシンと脂肪酸が結合した［④］に糖鎖が結合している。［④］にはじめに結合する糖は主に D-グルコースである。［③］は六員環３つと五員環 1 つが結合した四環骨格の脂質（ステロイド）で、イ) ホルモンの前駆体にもなる。

問１　①～④に当てはまる生体分子の名称を答えよ。

問２　下線ア）の構造を、以下のヌクレオチドの例を参考に模式的に示せ。

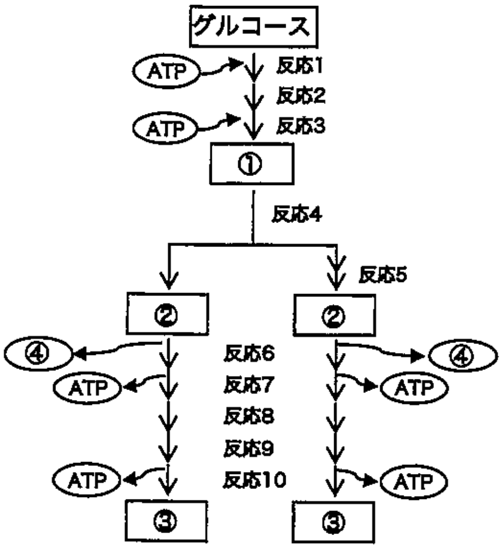
リン酸	—	リボース	—	塩基

例）ヌクレオチド

問３　D-グルコースの構造を Haworth 式と Fischer 投影式で書け。

問４　下線イ）に該当する特定のホルモンの名称を一つあげよ。

（4）解糖系に関する以下の略図と文章中の①～⑥に、最も適切と考えられる物質名や用語を〔　　〕の中から選んで答えよ。同じ語を何度使ってもよい。



解糖系は１０種類の酵素が関わって進む連続的な反応で、１分子のグルコースから２分子の［③］が生成する。解糖系の第一段階（反応 1～５）では、ATP を消費してグルコースから［①］が生じた後、［②］に変換される。第二段階（反応６～１０）は［②］から［③］が生成する過程であり、ATP と［④］が生じる。その後、［③］は好気条件では［⑤］に変換されてクエン酸サイクルに入る。一方、嫌気条件では［⑥］などに変換される。

〔グリセルアルデヒド 3-リン酸、ピルビン酸、グルコース 6-リン酸、フルクトース 1,6-ビスリン酸、ホスホエノールピルビン酸、1,3-ビスホスホグリセリン酸、乳酸、アセチル CoA、NAD^+、NADH、NADPH〕

（5）以下の ア）～ オ）の生体内のしくみから一つを選び、３～５行程度で説明せよ。図も用いてもよい。

ア）ユビキチン-プロテアソームシステムにおけるユビキチン化反応と、プロテアソームの構造とタンパク質分解の過程

イ）ヘモグロビンの構造と酸素結合性の特徴、またそれが生体内における酸素運搬に役立つ理由

ウ）キモトリプシンの活性中心である触媒三残基による加水分解反応機構

エ）小胞体における糖タンパク質の品質管理機構

オ）DNA の複製機構

5　分析化学

（1）　次の各電気化学反応における標準電位 (E^0) を用いて、以下の問いに答えよ。なお、$A + ne^- \rightleftarrows B$ のネルンストの式を、$E = E^0 - (0.06/n) \times \log\{[B]/[A]\}$ とし、Q はベンゾキノン、H_2Q はヒドロキノンを表し、以下の反応以外は起こらないものとする。

$$
\begin{array}{llll}
O_2 + 4H^+ + 4e^- & \rightleftarrows & 2H_2O & E^0 = +1.23\ V \\
Br_2 + 2e^- & \rightleftarrows & 2Br^- & E^0 = +1.09\ V \\
Ag^+ + e^- & \rightleftarrows & Ag & E^0 = +0.80\ V \\
Q + 2H^+ + 2e^- & \rightleftarrows & H_2Q & E^0 = +0.70\ V \\
PtBr_4^{2-} + 2e^- & \rightleftarrows & Pt + 4Br^- & E^0 = +0.58\ V \\
Cu^{2+} + 2e^- & \rightleftarrows & Cu & E^0 = +0.34\ V \\
2H^+ + 2e^- & \rightleftarrows & H_2 & E^0 = 0\ V \\
Zn^{2+} + 2e^- & \rightleftarrows & Zn & E^0 = -0.70\ V
\end{array}
$$

i)　Zn^{2+}、H^+、Cu^{2+}の各イオンをそれぞれ 0.10 M の濃度で含有している 100 mL の混合水溶液に、白金電極を挿入して電気分解した。陰極での生成物を生成する順番に答えよ。

ii)　H_2Q、Br^-、H^+の各化学種をそれぞれ 0.10 M の濃度で含有している 100 mL の混合水溶液に、白金電極を挿入して電気分解した。陽極での生成物を生成する順番に答えよ。なお、電解前の各白金電極の物質量を 1 mol とする。

iii)　Ag^+および Cu^{2+}をそれぞれ約 0.1 M 含有している混合水溶液が 100 mL ある。重量がわかっている白金電極上に電解析出させることによって銀の含有量を正確に決定したい。用いる分析用天秤の感度が 0.1 mg のとき、銀の量を銅から分離して正確に測定できるか。理由とともに答えよ。なお、銀および銅の原子量をそれぞれ 108 および 63.6、$\log 3 = 0.48$ とする。

（2）　酸塩基滴定に用いられる反応に関する以下の問いに答えよ。求め方も記すこと。なお、水のイオン積（K_w）の値を 1.0×10^{-14}、酢酸の酸解離定数（K_a）の値を 1.0×10^{-5}、アンモニアの塩基解離定数（K_b）の値を 1.0×10^{-5} とする。

i)　酢酸の強塩基（OH^-）による酸塩基滴定時における反応式を示せ。

ii)　i)の反応の平衡定数（K）を K_a と K_w を用いて表せ。

iii)　酸塩基滴定では、より精密に測定するために、より大きな K の値が求められる。その理由を 70 字程度で書け。

iv)　塩酸を水酸化ナトリウム水溶液で滴定するときの K の値を求めよ。

v)　アンモニア水溶液を塩酸で滴定するときの K の値を求めよ。

vi)　「緩衝能」について 30 字程度で説明せよ。

vii)　酢酸を水酸化ナトリウム水溶液で半分だけ中和した溶液の緩衝能が最大であることを示せ。

平成31年度　お茶の水女子大学大学院
人間文化創成科学研究科（博士前期課程）

理学　専攻・　情報科学　コース

一　般　入　試
基　礎　科　目　試　験

試　験　日：　平成 30年 8月23日(木)

試　験　時　間：　9時 30分 ～ 12時 00分

【注意事項】

1. 監督者の「始め」の合図があるまで問題冊子を開けないこと。

2. 試験中、用のある場合は手を挙げて監督者を呼ぶこと。

3. 問題にはすべて解答すること。

数　学　基　礎

【問題１】

【１】　関数 $f(x) = x(\log x)^a$ について以下の各問に答えよ．ただし a は正の整数である．

(1) 関数 $f(x)$ の微分 $f'(x)$ を求めよ．

(2) $\lim_{x \to 0} f(x)$ と $\lim_{x \to 0} f'(x)$ を求めよ．

(3) $a = 3$ としたときの曲線 $y = f(x)$ の概形を描け．

【２】　積分 $\iint_D (x-2y)^2 \, dxdy$ の値を求めよ．
ただし $D = \{(x,y) : |x+y| \leq 1, |x-2y| \leq 1\}$ である．

【３】　関数 $f(x,y) = \mathrm{Tan}^{-1} \dfrac{y}{x}$ について以下の各問に答えよ．

(1) $\dfrac{\partial f}{\partial x}$ と $\dfrac{\partial f}{\partial y}$ を求めよ．

(2) 曲面 $z = f(x,y)$ の点 $(x,y,z) = \left(1, -1, -\dfrac{\pi}{4}\right)$ における接平面と法線の方程式を求めよ．

【問題 2】

【1】3×3 の実行列 $A=\begin{pmatrix} a+3 & -4 & -4 \\ 1 & a-2 & -2 \\ 1 & -1 & a-1 \end{pmatrix}$ を考える．このとき，

(1) A が逆行列を持つための a に対する必要十分条件を求めよ．

(2) A の固有値とその固有ベクトルを求めよ．

(3) A を対角化せよ．ただし，対角化に用いた行列等を含め，途中計算も併せて記すこと．

【2】以下の各問に答えよ．

(1) $\mathbb{R}^2$ の線形変換を $T(\boldsymbol{x})=\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 8 \end{pmatrix}\boldsymbol{x}$ とする．$\mathbb{R}^2$ の基底 $\left\{\begin{pmatrix} 6 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -3 \\ 1 \end{pmatrix}\right\}$ に関する T の表現行列を求めよ．

(2) S を，ある $\mathbb{R}^2$ の基底に関する T の表現行列とする．このとき，$\det(S)$ を求めよ．

情　報　基　礎

【問題１】

以下の C 言語で書かれた関数は，double 型の２次元配列で表される行列 a と b の行列積を求めて，その結果を c に入れる関数である．各行の行頭には行番号を付してある．

n はあらかじめ定義されている正の整数定数で，各行列は n 行 n 列である．行列 a の (i,j) 要素（i 行 j 列の要素．ここで i, j はともに 0 以上 n 未満の整数）は a[i][j] に格納されている．(行列 b, c も同様とする.)

```
1  void mul (double a[n][n], double b[n][n], double c[n][n]) {
2    int i, j, k;
3    double v;
4
5    for (i = 0; i < n; i++) {
6      for (j = 0; j < n; j++) {
7        v = 0;
8        for (k = 0; k < n; k++) {
9          /* 行列積の (i, j) 要素を求めるために v を更新する */
10       }
11       c[i][j] = v;
12     }
13   }
14 }
```

このプログラムについて，以下の問いに答えよ．

(1) このプログラムの 9 行目では，行列積の (i,j) 要素の値を，変数 v を順次，更新していくことで求めたい．このプログラムの 9 行目に書くべきプログラムを示せ．

(2) この関数を呼び出すと，プログラムの 9 行目は正確に何回，実行されるか．n を使って表せ．

(3) 行列 a と b がともに上三角行列（$j < i$ であるような (i,j) 要素はすべて 0 であるような行列）であった場合，その行列積も上三角行列になる．関数 mul と同様だが上三角行列同士の行列積を求める関数で，0 であることがわかっている要素に対する計算を省くような関数 mul2 を書け．その際，結果の行列を格納する配列 c は，あらかじめすべて 0 に初期化されていると仮定して良い．

(4) mul2 において，(i,j) 要素（ただし $i \leq j$）を求めるためには，正確に何回，かけ算を行うか．i, j を使って表せ．

(5) mul2 において，行列積 c を求めるためには，正確に何回，かけ算を行うか．n を使って表せ．

(6) mul2 の計算量を n を使って表せ．

【問題２】

以下の手順により，CPU 内部の 32 ビット加算回路を設計する．各問いに答えなさい．

(1) 入力を X と Y，和の出力を S，桁上げを C として 1 ビットの半加算器（Half Adder）HA を設計する．この半加算器の真理値表を書きなさい．また真理値表を元に，S と C をそれぞれ X と Y の論理式で表しなさい．

(2) 論理演算子の記号を用い，半加算器 HA の論理回路図を示しなさい．

(3) 入力を X_i と Y_i，下位ビットからの桁上がりを C_{i-1}，和の出力を S_i，上位ビットへの桁上げを C_i として 1 ビットの全加算器（Full Adder）FA_i を設計する．この全加算器の真理値表を書きなさい．また真理値表を元に，S_i と C_i をそれぞれ X_i と Y_i と C_{i-1} の論理式で表しなさい．

(4) S_i と C_i の論理式を変形して簡単化し，全加算器 FA_i の論理回路図を示しなさい．その際，全加算器の論理回路図内に，HA と表示された箱の半加算器を含めても構わない．

(5) 全加算器を 32 個並べて構成された 32 ビット加算回路の概略を描きなさい．ただし各々の入力，出力，桁上げと桁上がりがどのように接続されているかわかるように示しなさい．全加算器は FA_1〜FA_{32} と表示された箱で示せば良い．

(6) 加算回路は CPU の中の何と呼ばれる部分に含まれているか，英語の名称とその略称を答えなさい．