令和６年度　大学院理学研究科博士前期課程　入学試験

物質科学専攻　専門科目

問題冊子

注意事項

１．解答開始の合図があるまで、問題冊子・解答冊子の中を見てはいけない。それまで、この注意事項をよく読んでおくこと。

２．監督者の指示があれば、解答冊子の表紙の受験番号欄・氏名欄にそれぞれ自分の受験番号・氏名を書くこと。

３．この問題冊子は、数学 3 問、物理 3 問、化学 3 問、情報 2 問の合計 11 問で構成されている。解答開始の合図の後、まず中を開いてこのことを確認すること。

４．これら 11 問のうちから任意の 3 問を選択して解答すること。ただし、情報理学研究室を第一志望とする受験者については、選択する 3 問のうち、情報 2 問の選択を必須とする。

５．解答冊子は 34 枚（表紙 1 枚、解答用紙 33 枚）からなる。表紙の受験番号欄に自分の受験番号を、氏名欄に自分の氏名を、選択マーク欄には選択した問題に○印を記入すること。

2 枚目以降の解答用紙については以下の指示に従うこと。

(1) どの科目についてもあらかじめ問題番号が指定された解答用紙に解答すること。

(2) 解答した用紙には、受験番号と氏名を記入すること。

(3) 解答用紙の受験番号欄、氏名欄の下にある横線以下に解答すること。解答用紙の余白が足りない場合は裏面を使用しても良い。裏面を使う場合、表の横線以下の部分を使うこと。横線より上の部分に書いた解答は採点されないので注意すること。

６．選択マーク欄に○印を付ける問題は 3 問を越えてはいけない。○印を付けた問題の解答用紙だけが採点の対象となる。なお、○印は試験終了までに記入すること。

７．問題冊子の余白は適宜計算などに使用してよい。

８．解答冊子は、どのページも切り離してはいけない。

９．試験中に、問題冊子や解答冊子の印刷の不明瞭、汚れ、ページの落丁、乱丁などに気がついた場合や、体調が悪くなった場合には、手を挙げて監督者に知らせること。

１０．試験終了後、問題冊子は持ち帰ること。

令和 6 年度　大学院 理学研究科　入学試験

物 質 科 学 専 攻　　専 門 科 目

数学 第 1 問

成分を実数とする 2 次正方行列全体のなすベクトル空間を M_2 とする．$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \in M_2$ とし, 写像 $F : M_2 \to M_2$ を

$$F(X) = AX - XA \quad (X \in M_2)$$

で定義する．また, (i, j) 成分が 1, 他の成分が 0 である 2 次正方行列を E_{ij} と表す．このとき, 次の問いに答えよ.

(1) 写像 F は線形であることを示せ．また, $\{E_{11}, E_{12}, E_{21}, E_{22}\}$ は M_2 の基底であることを示し, この基底に関する線形写像 F の表現行列 B を求めよ.

(2) 線形写像 F の階数を求めよ.

(3) $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}$ のとき, 実対称行列 $B\,{}^tB$ を直交行列 P で対角化せよ．但し, ${}^tB$ は B の転置行列である.

数学 第 2 問

群 G に対し, 集合 $Z(G)$ を

$$Z(G) = \{a \in G : \text{任意の } x \in G \text{ に対し } xa = ax\}$$

で定義する．このとき, 次の問いに答えよ.

(1) $Z(G)$ は G の部分群であることを示せ.

(2) n を 3 以上の整数とし, S_n を n 次対称群とする．このとき, $Z(S_n)$ を求めよ.

数学 第 3 問

次の問いに答えよ.

(1) 数列 $\{a_n\}$ が α に収束するならば, 数列 $\{a_n\}$ はコーシー列であることを示せ.

(2) 級数 $\displaystyle\sum_{n=1}^{\infty} b_n$ が収束するならば, 数列 $\{b_n\}$ は 0 に収束することを示せ.

(3) 級数 $\displaystyle\sum_{n=1}^{\infty} c_n$ は収束しないが数列 $\{c_n\}$ 自身は 0 に収束する, そのような数列 $\{c_n\}$ を一つ挙げよ.

物 質 科 学 専 攻　専 門 科 目

物 理 第 1 問

図 1 − 1 に示すように，真空に置かれた半径 R_1，R_2 $(R_1 < R_2)$ の薄い球殻で構成された同心球殻コンデンサーを考える。球殻の中心からの距離を r，真空の誘電率を ϵ_0 として以下の問に答えよ。

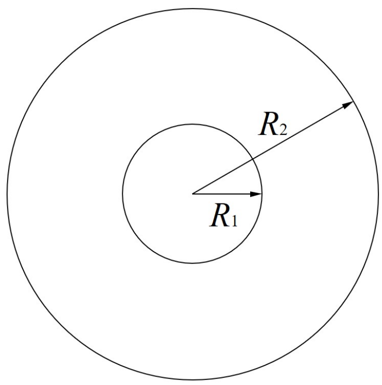


図 1 − 1

問 1　このコンデンサーの内球殻に $+q$，外球殻に $-q$ $(q > 0)$ の電荷を与える。

(1) このとき，両球殻間に生じる電場の大きさ $E_0(r)$ を r，ϵ_0，q を用いて表せ。

(2) 両球殻間の電位差 $\Delta\phi_0$ を ϵ_0，q，R_1，R_2 を用いて表せ。

(3) このコンデンサーの電気容量 C_0 を ϵ_0，R_1，R_2 を用いて表せ。

問 2　次に問 1 で与えた電荷を取り除き，図 1 − 2 に示すようにこの同心球殻コンデンサーの内球殻を接地後，あらたに外球殻に $+q$ の電荷を与えたところ，内球殻に $-q'$ の電荷が誘導された。

(1) 両球殻間に生じる電場の大きさ $E_1(r)$ および外球殻の外側に生じる電場の大きさ $E_2(r)$ を r，ϵ_0，q，q' を用いて表せ。

(2) 両球殻間に生じる静電エネルギー U_1 および外球殻の外側に生じる静電エネルギー U_2 を ϵ_0，q，q'，R_1，R_2 を用いて表せ。ただし，電場 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$ があるとき，空間の単位体積当たりの静電のエネルギーは $u(\boldsymbol{r}) = \dfrac{1}{2}\epsilon_0|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})|^2$ で与えられる。

(3) 内球殻に誘導される電荷 $-q'$ を q，R_1，R_2 を用いて表せ。

[ヒント] この系が安定であるためには全空間に蓄えられる静電エネルギーが最小値になればよい。

(4) 両球殻間の電位差 $\Delta\phi_1$ を ϵ_0，q，R_1，R_2 を用いて表せ。

(5) このコンデンサーの電気容量 C_1 を ϵ_0，R_1，R_2 を用いて表せ。

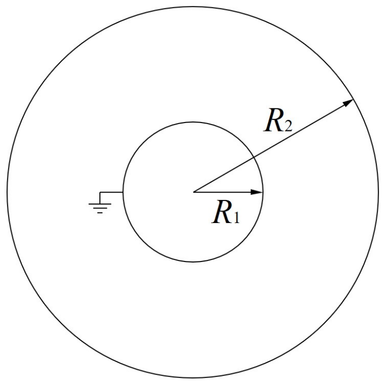


図 1 − 2

物質科学専攻　専門科目

物理第 2 問

電子がもつ軌道角運動量演算子 $\hat{\ell} = (\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y, \hat{\ell}_z)$ について，$\hat{\ell}_z$ と $\hat{\ell}^2$ の同時固有状態を $|\ell, m\rangle$ と書く。ℓ と m はそれぞれ軌道角運動量量子数と軌道磁気量子数である。プランク定数を h，$\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$ とするとき，$\hat{\ell}_z$, $\hat{\ell}^2$, $\hat{\ell}_\pm = \ell_x \pm i\ell_y$ について，以下の式が成り立つ。

$$\langle \ell, m' | \hat{\ell}_z | \ell, m \rangle = m\hbar\delta_{m',m}$$

$$\langle \ell, m' | \hat{\ell}^2 | \ell, m \rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1)\delta_{m',m}$$

$$\langle \ell, m' | \hat{\ell}_\pm | \ell, m \rangle = \hbar\delta_{m',m\pm1}\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm1)} \quad (\text{複号同順})$$

以下，$\ell = 1$ の場合を考える。

問 1 **(1)** $m = 1$ として，$\langle \ell, m' | \hat{\ell}_z | \ell, m \rangle$ $(m' = 1, 0, -1)$ をすべて求めよ。

(2) $\hat{\ell}_z$ の行列表現

$$\begin{pmatrix} \langle \ell, 1 | \hat{\ell}_z | \ell, 1 \rangle & \langle \ell, 1 | \hat{\ell}_z | \ell, 0 \rangle & \langle \ell, 1 | \hat{\ell}_z | \ell, -1 \rangle \\ \langle \ell, 0 | \hat{\ell}_z | \ell, 1 \rangle & \langle \ell, 0 | \hat{\ell}_z | \ell, 0 \rangle & \langle \ell, 0 | \hat{\ell}_z | \ell, -1 \rangle \\ \langle \ell, -1 | \hat{\ell}_z | \ell, 1 \rangle & \langle \ell, -1 | \hat{\ell}_z | \ell, 0 \rangle & \langle \ell, -1 | \hat{\ell}_z | \ell, -1 \rangle \end{pmatrix}$$

を求めよ。

問 2 問 1 と同様にして，

(1) $\hat{\ell}_z^2$ の行列表現を求めよ。

(2) $\hat{\ell}_+$ と $\hat{\ell}_-$ の行列表現を求めよ。

(3) $\hat{\ell}_\pm$ は状態 $|\ell, m\rangle$ をどのように変化させる演算子であるか。簡単に説明せよ。

次に，次式で与えられるハミルトニアンを，1 個の電子の状態 $|\ell, m\rangle$ に作用させる。

$$\mathcal{H} = D\hat{\ell}_z^2 + \mu_B B\hat{\ell}_z$$

ここで，D は $D > 0$ の定数，μ_B はボーア磁子，B は z 方向にかけた静磁場の強さである。

問 3 $B=0$ のとき，このハミルトニアンに対する各状態 $|\ell, m\rangle$ のエネルギー固有値を求めよ。

問 4 $B \geq 0$ とし，状態 $|\ell, m\rangle$ のエネルギー固有値は B の関数としてどう変化するか。エネルギー準位の概略図を用いて説明せよ。

問 5 $B > 0$ とし，**問 4** で求めたエネルギー準位間の遷移を引き起こすために，エネルギー $\hbar\omega$ の電磁波を照射する。この電磁波が電子に与える相互作用のハミルトニアンは $C(\hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_-)\cos\omega t$ （C は定数）と書け，$\hat{\ell}_\pm$ は**問 2(3)** で求めた状態変化を引き起こすものとする。

(1) 遷移が起こり得るのはどの状態と状態の間か。すべて求めよ。

(2) **(1)** の遷移が起こるための条件を求めよ。

物 質 科 学 専 攻　専 門 科 目

物 理 第 3 問

以下のハミルトニアンで記述される一次元調和振動子を考える。

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

この調和振動子が温度 T の熱浴と熱平衡状態にあるものとして，カノニカル分布で扱う。ただし，ボルツマン定数を k_{B}，プランク定数を h，$\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$ とする。

問 1 まず，古典統計力学で扱うことにより，以下の問に答えよ。

(1) 分配関数

$$Z = \frac{1}{h}\int_{-\infty}^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left[-\frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\right]$$

を計算せよ。以下の積分公式を使え。

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \sqrt{\pi}$$

(2) 全エネルギーの平均値 E と比熱 $C = \dfrac{dE}{dT}$ を求めよ。

(3) 運動エネルギーの平均値

$$\langle \frac{p^2}{2m} \rangle$$

を求めよ。

(4) エントロピー S を求めよ。

問 2 次に量子統計力学で扱う。量子力学では，上記の調和振動子のエネルギー準位が

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots)$$

で与えられることを用いて，以下の問に答えよ。

(1) 分配関数 Z を求めよ。

(2) 全エネルギーの平均値 E を求めよ。

(3) 比熱 C を求め，その温度依存性の概形を描け。

物 質 科 学 専 攻　専 門 科 目

化学 第１問

問 1. 次の文章を読み, 以下の問いに答えよ。途中の導出および計算過程を示せ。有効数字を 2 桁とする。なお，R および T をそれぞれ気体定数および温度（25°C）とする。化学種 X の濃度を[X]と表すこととし, 活量係数を 1 とする。$\ln Y = 2.303\log Y$ とし，25°C において $2.303RT = 5.7$ kJ mol^{-1} とする。

次に示すある弱酸（HA）の解離平衡を考える。

$$\mathrm{HA} \rightleftarrows \mathrm{A^-} + \mathrm{H^+} \qquad (1)$$

この反応は水溶液中で進行し，温度と圧力は一定である。この反応の反応ギブズエネルギーΔG は,

$$\Delta G = \mu_{\mathrm{A-}} + \mu_{\mathrm{H+}} - \mu_{\mathrm{HA}} \qquad (2)$$

と表される。ここで，$\mu_{\mathrm{A-}}$，$\mu_{\mathrm{H+}}$および μ_{HA} は，それぞれ A^-，H^+および HA の化学ポテンシャルである。ある化学種 X の化学ポテンシャル μ_{X} は，化学種 X の標準化学ポテンシャル（標準モル生成ギブズエネルギー）μ°_{X} と化学種 X 濃度（[X]）を用いて

$$\mu_{\mathrm{X}} = \mu^{\circ}_{\mathrm{X}} + RT\ln[\mathrm{X}] \qquad (3)$$

と表せる．また，標準反応ギブズエネルギーΔG°は,

$$\Delta G^{\circ} = \mu^{\circ}_{\mathrm{A-}} + \mu^{\circ}_{\mathrm{H+}} - \mu^{\circ}_{\mathrm{HA}} \qquad (4)$$

と表される。

(1) 平衡反応（1）の酸解離定数 K_a を，ΔG°を用いて表せ。

(2) 水溶液中において酢酸は次の平衡状態となる。

$$\mathrm{CH_3COOH} \rightleftharpoons \mathrm{CH_3COO^-} + \mathrm{H^+}$$

酢酸の酸解離定数 pK_a の値を求めよ。酢酸，酢酸イオンおよび水素イオンの標準化学ポテンシャルをそれぞれ−396，−369 および 0 kJ mol^{-1} とする。

(3) 酢酸の共役塩基である酢酸イオンの加水分解反応は,

$$\mathrm{CH_3COO^-} + \mathrm{H_2O} \rightleftharpoons \mathrm{CH_3COOH} + \mathrm{OH^-}$$

であり，この標準反応ギブズエネルギーは 53.0 kJ mol^{-1} である。酢酸の解離反応および酢酸イオン加水分解反応の標準反応ギブズエネルギーを用いて水の自己解離（$H_2O \rightleftharpoons OH^- + H^+$）の平衡定数である水のイオン積を求めよ。

問 2．次の文章を読み，以下の問いに答えよ。(1)，(3)および(4)については，途中の導出過程も示せ。化学種 X の濃度を[X]と表す。光路長を 1（cm）とする。

ブロモチモールブルー（BTB）は，pH6.5－7.5 に変色域をもつ pH 指示薬として利用されている。BTB の酸性化学種を HIn，塩基性化学種を In^-と表すと，水溶液中において BTB は次の平衡状態になる。

$$HIn \rightleftharpoons In^- + H^+ \qquad (1)$$

ここでは，BTB は HIn および In^-以外の化学種にならないこととする．また，この平衡状態における BTB の酸解離定数 K_a は，次の式で表される。

$$K_a = \frac{[H^+][In^-]}{[HIn]} \qquad (2)$$

図 1 に，異なる pH における BTB（濃度 C）水溶液の吸収スペクトルを示す。強い酸性条件下では 433 nm 付近の光が主に吸収され，強い塩基性条件下では 616 nm 付近の光が主に吸収される。その間の領域では両波長領域の光が吸収される。また，pH の増加にともない，433 nm 付近の吸収の減少と，616 nm 付近の吸収の増加が観測される。ここで，433 nm および 616 nm における吸収は，それぞれ 1 種類の化学種に由来するとする。

BTB の全濃度を C とすると

$$C = [HIn] + [In^-] \qquad (3)$$

が成り立つ。ある pH の BTB 水溶液の波長 λ における吸光度 A は次の式で表される。

$$A = \varepsilon_{HIn}(\lambda)[HIn] + \varepsilon_{In^-}(\lambda)[In^-] \qquad (4)$$

ここで，$\varepsilon_{HIn}(\lambda)$および $\varepsilon_{In^-}(\lambda)$は，それぞれ波長 λ における HIn および In^-のモル吸光係数（M^{-1} cm^{-1}）である。例えば，波長 433 nm における HIn のモル吸光係数を $\varepsilon_{HIn}(433)$と表すこととする。

図 2 に，波長 433 nm および 616 nm における吸光度の pH 依存性を示す．両波長における吸光度は，低 pH 領域および高 pH 領域において一定値となる。このとき，低 pH 領域（一定値を示す領域）での吸光度をそれぞれ $A_L(433)$および $A_L(616)$，高 pH 領域（一定値を示す領域）での吸光度をそれぞれ $A_H(433)$および $A_H(616)$とする。

また，①<u>波長 500 nm 付近における吸光度は pH に依存せず同じ値となる</u>。この点を等吸収点という。

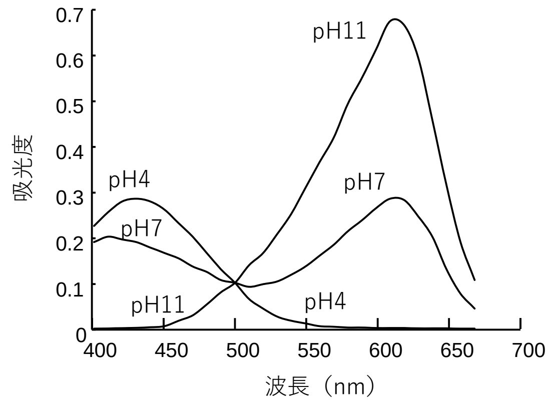


図 1．異なる pH における BTB 水溶液の吸収スペクトル

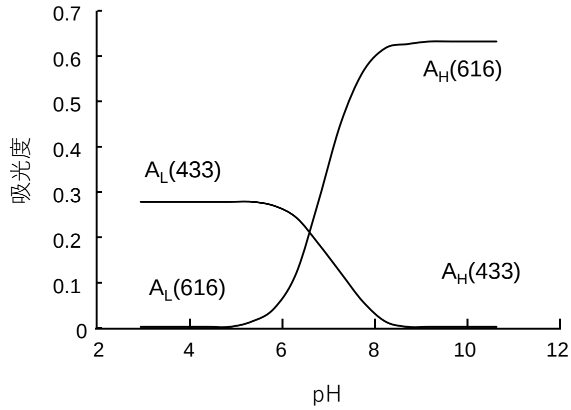


図 2．波長 433 nm および 616 nm における吸光度の pH 依存性

⑴ pH の値が p*K*a の値より n 小さいとき，n を用いて[In⁻]/[HIn]を表せ。

⑵ 以下の文章中の$\boxed{\text{ア}}$～$\boxed{\text{キ}}$に適切な化学種または式を答えよ。

BTB は，強酸性溶液中においてほぼ$\boxed{\text{ア}}$として存在し，強塩基性溶液中においてほぼ$\boxed{\text{イ}}$として存在する。よって，吸光度 $A_L(433)$および吸光度 $A_H(616)$は, それぞれ BTB の全濃度 C を用いて$\boxed{\text{ウ}}$および$\boxed{\text{エ}}$と表せる。これらの吸光度を測定することにより，強酸性溶液中に存在する化学種の波長 433 nm におけるモル吸光係数および強塩基性溶液中に存在する化学種の波長 616 nm におけるモル吸光係数を得ることができる.

さらに，中性領域の BTB 溶液の波長 433 nm および 616 nm の吸光度（それぞれ $A_M(433)$および $A_M(616)$とする）と pH を測定すると，BTB の酸解離定数 K_a を求めることができる。すなわち，それぞれの吸光度は，[HIn]または[In⁻]を用いて，$A_M(433) =$ $\boxed{\text{オ}}$および $A_M(616) =$ $\boxed{\text{カ}}$と表せるため，酸解離定数 K_a は，中性領域の BTB 溶液の水素イオン濃度および上記 4 種類の吸光度を用いて$\boxed{\text{キ}}$と求めることができる。

⑶ 波長 616 nm における吸光度が $A_H(616)/2$ となるときの溶液の pH が, BTB の酸解離定数 pK_a となることを説明せよ。

⑷ 下線部①において，吸光度が等しくなる理由を説明せよ，ただし，波長 500 nm における HIn および In⁻のモル吸光係数が等しいこと（$\varepsilon_{HIn}(500) = \varepsilon_{In^-}(500)$）を示した上で式を用いて説明すること。

物 質 科 学 専 攻　専 門 科 目

化学 第 2 問

問 1.　中心原子に 4 つの原子が結合した分子あるいはイオン(a)–(d)について以下の問いに答えよ。

(a) NH_4^+　　(b) SO_2Cl_2　　(c) $POCl_3$　　(d)ICl_4^-

(1) (a)–(d)のルイス構造を記せ。

(2) (a)–(c)の立体構造について、その対称性をシェーンフリースの点群記号で答えよ。

(3) (d)の立体構造は D_{4h} の対称性をもつ。この理由を説明せよ。

問 2.　金、銀、銅の結晶構造は立方最密充填である。一方、マグネシウムや亜鉛の結晶構造は六方最密充填である。これらの結晶構造について以下の問いに答えよ。

(1) これらの結晶構造がとりうるもっとも高い対称性をもつ結晶格子(ブラベー格子)の名称をそれぞれ答えよ。

(2) これらの構造で単位格子中のすべての原子の位置を○で表し、解答用紙の単位格子の図に描き答えよ。ただし、格子点には必ず原子を置くものとする。

(3) これらの構造における最近接原子の数をそれぞれ答えよ。

(4) (2)で描いた原子のうち、格子点以外の原子の分率座標 (fractional coordinate) をすべて答えよ。解答は(x, y, z) の形式で記せ。答えに分数や平方根が含まれていても良い。

(5) 立方最密充填構造において原子の球が結晶格子に占める体積 (充填率) を計算せよ。導出過程も示せ。

問 3.　以下の表は八面体型 6 配位構造をもつ金属錯体化合物(ア)－(コ)とその磁気モーメント(単位 μ_B)を示したものである。これらについて以下の問いに答えよ。

記号	化合物	μ_B	記号	化合物	μ_B
(ア)	$[Cu(OH_2)_6](SO_4)$	2.0	(カ)	$[Ni(OH_2)_6]Cl_2$	3.3
(イ)	$K_4[Co(CN)_6]$	3.4	(キ)	$K_3[MnF_6]$	5.0
(ウ)	$[Co(NH_3)_6]Cl_2$	1.7	(ク)	$K_3[FeF_6]$	5.9
(エ)	$[Cr(OH_2)_6]Cl_2$	4.9	(ケ)	$K_3[Fe(CN)_6]$	2.3
(オ)	$K_4[Cr(CN)_6]$	3.3	(コ)	$[Zn(NH_3)_6]Cl_2$	0.0

(1) (ア) および (イ) の名称を答えよ。

(2) (ア)は Cu イオンの周りに配位した水分子の 6 つの Cu–O 結合の距離は均等な O_h 対称性をもつ正八面体ではなく、対角の 2 つの距離が他の 4 つに比べて長くなることで、4 回軸方向へ引き伸ばされた構造に変形しており D_{4h} に対称性が低下する。またこの変形により Cu の d 電子のエネルギー準位も変化する。変形前後の d 軌道の電子配置を矢印(↑あるいは↓)を用い、解答用紙のエネルギー準位図に書き入れよ。変形後の各 d 軌道の名称を括弧内に記せ。

(3) (2)の変形効果を何とよぶか答えよ。

(4) (3)の効果が起こる理由を(2)で答えた電子配置を用いて簡単に説明せよ。

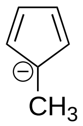
(5) (ア)と異なる数の d 電子をもつ八面体 6 配位錯体でも O_h 対称をとる電子配置における二重縮退軌道に不対電子が 1 つ存在している場合は、(2)の変形効果が強く現れる。このような d 電子の配置をすべて挙げ、変形前の O_h 対称構造のエネルギー準位図の形で答えよ。

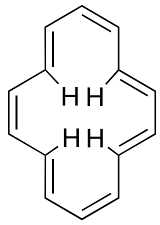
(6) (5)で答えた電子配置に相当するイオンを(イ)－(キ)の中からすべて選び答えよ。

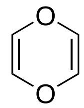
物 質 科 学 専 攻　専 門 科 目

化学 第３問

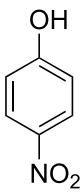
問 1.　次の化学種は芳香族性を示すか否かを答え、その理由を説明せよ。

(a)


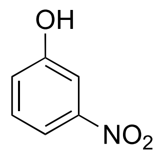
(b)


(c)


問 2.　次の化合物のどちらがより強い酸性を示すかを答え、その理由を説明せよ。



p-ニトロフェノール



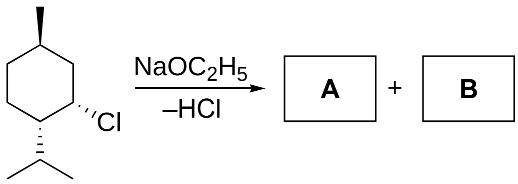
m-ニトロフェノール

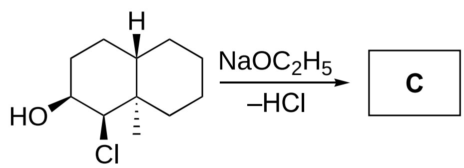
問 3.　下記の式(i)~(iv)において、生成物 **A~D** が得られた。出発物の立体化学の違いに注意して下記の設問に答えよ。

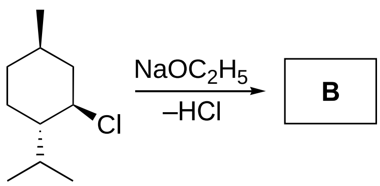
(a)　生成物 **A~D** の構造式をそれぞれ記せ。

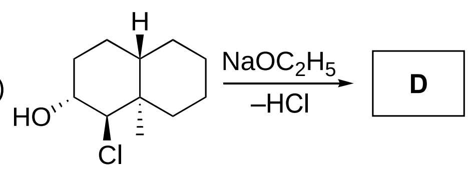
(b)　式(i)において **A** と **B** は混合物として得られた。主生成物は **A** と **B** のうちどちらであるかを理由とともに記せ。

(c)　式(ii)の反応は式(i)に比べて約 200 倍遅い。その理由を立体配座の違いを用いて説明せよ

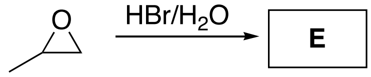
(i)


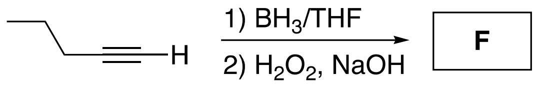
(iii)


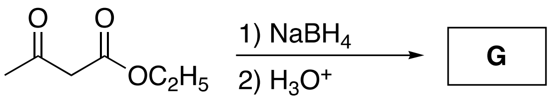
(ii)


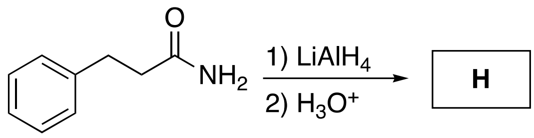
(iv)


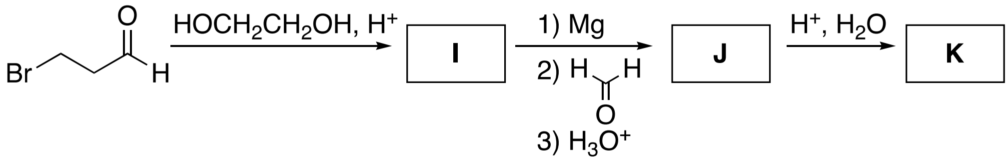
問 4.　以下の反応の主生成物の構造式を記せ。

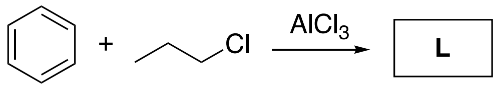
(a) 

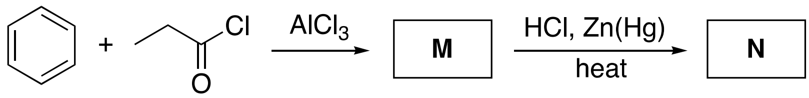
(b) 

(c) 

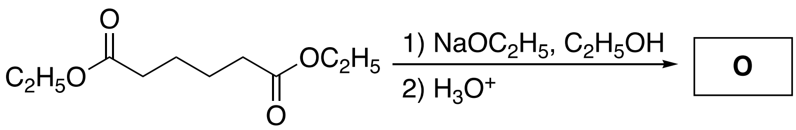
(d) 

(e) 

(f) 

(g) 

問 5.　以下の反応の主生成物を構造式で示し、その反応機構を電子の動きがわかる曲がった矢印を用いて説明せよ。



物 質 科 学 専 攻　専 門 科 目

情報 第１問

問１　以下の行列の固有値と固有ベクトルを求めよ。

(1) $\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$　　　(2) $\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$

問２　微分方程式に関して以下の問いに答えよ。

(1) $\frac{d^2x}{dt^2} + 4\frac{dx}{dt} + 3x = 0$ の一般解を求めよ。

(2) $\frac{d^2x}{dt^2} + 4\frac{dx}{dt} + 3x = \sin(t) + 2\cos(t)$ の一般解を求めよ。

(3) (2)で$x(0) = 1, \frac{dx}{dt}(0) = 0$ のときの解を求めよ。

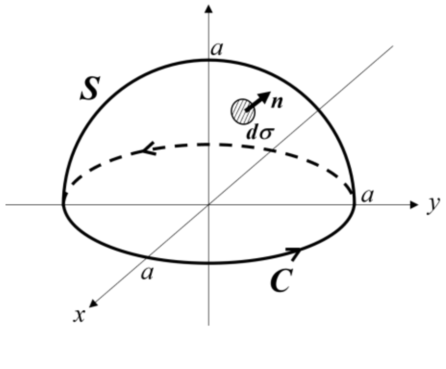
問３　三次元空間内のベクトル$\boldsymbol{V} = (y, 2x, z)$について以下の問いに答えよ。

(1) $\nabla \cdot \boldsymbol{V}$と$\nabla \times \boldsymbol{V}$を求めよ。

(2) 半径aの半球面（$x^2 + y^2 + z^2 = a^2;\ z \geq 0$）を$S$としたとき、次の面積分を求めよ。ただし、$S$上の外向き単位法線ベクトルを$\boldsymbol{n}$、面要素を$d\sigma$とし、原点から遠ざかる方向を外向きとする。

$$\iint_S \nabla \times \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n} d\sigma$$

(3) Sの境界である閉曲線C（$x^2 + y^2 = a^2;\ z = 0;$反時計回り）上での$\boldsymbol{V}$の線積分を求めよ。



令和６年度　大学院　理学研究科　入学試験

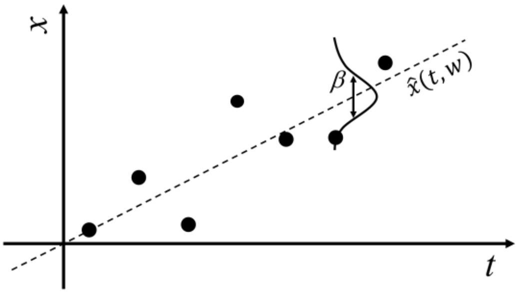
物 質 科 学 専 攻　専 門 科 目

情報第２問

図のように、N回の測定によって、時刻$\boldsymbol{t}=\{t_1,t_2,\cdots,t_N\}$で測定値$\boldsymbol{x}=\{x_1,x_2,\cdots,x_N\}$がそれぞれ得られたとする。この測定データから測定値の傾向を推定したい。測定値xが、曲線$\hat{x}(t,w)$を中心とした正規分布（分散がβ^2）

$$p(x\mid t,w,\beta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\beta^2}}\exp\left[-\frac{\left(x-\hat{x}(t,w)\right)^2}{2\beta^2}\right]$$

に従うと仮定した場合、以下の問いに答えよ。ただし、wは曲線のパラメータとする。



問１　各測定が$p(x\mid t,w,\beta)$から独立に得られたものだと仮定すると、尤度関数は

$$L(w,\beta)=p(\boldsymbol{x}\mid \boldsymbol{t},w,\beta)=\prod_{i=1}^{N}p(x_i\mid t_i,w,\beta)$$

と表される。尤度関数を最大化するwとβの条件を求めよ。

問２　線形モデル$\hat{x}(t,w)=wt$を仮定する。問１の尤度関数を最大化するwを求めよ。

問３　ベイズの定理$p(A|B)\propto p(B|A)p(A)$を用いて、wの事後分布$p(w\mid \boldsymbol{x},\boldsymbol{t},\beta)$を求めよ。ただし、$w$の事前分布を$p(w)$とする。

問４　wの事前分布$p(w)$を正規分布（平均が 0、分散がα^2）と仮定する。

$$p(w\mid\alpha)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha^2}}\exp\left[-\frac{w^2}{2\alpha^2}\right]$$

問２の線形モデルの場合、事後分布$p(w\mid \boldsymbol{x},\boldsymbol{t},\alpha,\beta)$も正規分布に従うことを示せ。ここでは、事前分布が$\alpha$に依存するので、事後分布の条件に$\alpha$を追加している。

問５　問４の事後分布$p(w \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{t}, \alpha, \beta)$が最大となる$w$を求めよ。

問６　問４の事後分布$p(w \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{t}, \alpha, \beta)$を用いて、

$$p(x^* \mid t^*, \alpha, \beta) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(x^* \mid t^*, w, \beta) p(w \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{t}, \alpha, \beta) dw$$

を計算することで、パラメータαとβのもとで任意の時刻t^*での測定値x^*を予測することができる。$p(x^* \mid t^*, \alpha, \beta)$が最大となる$x^*$を求めよ。