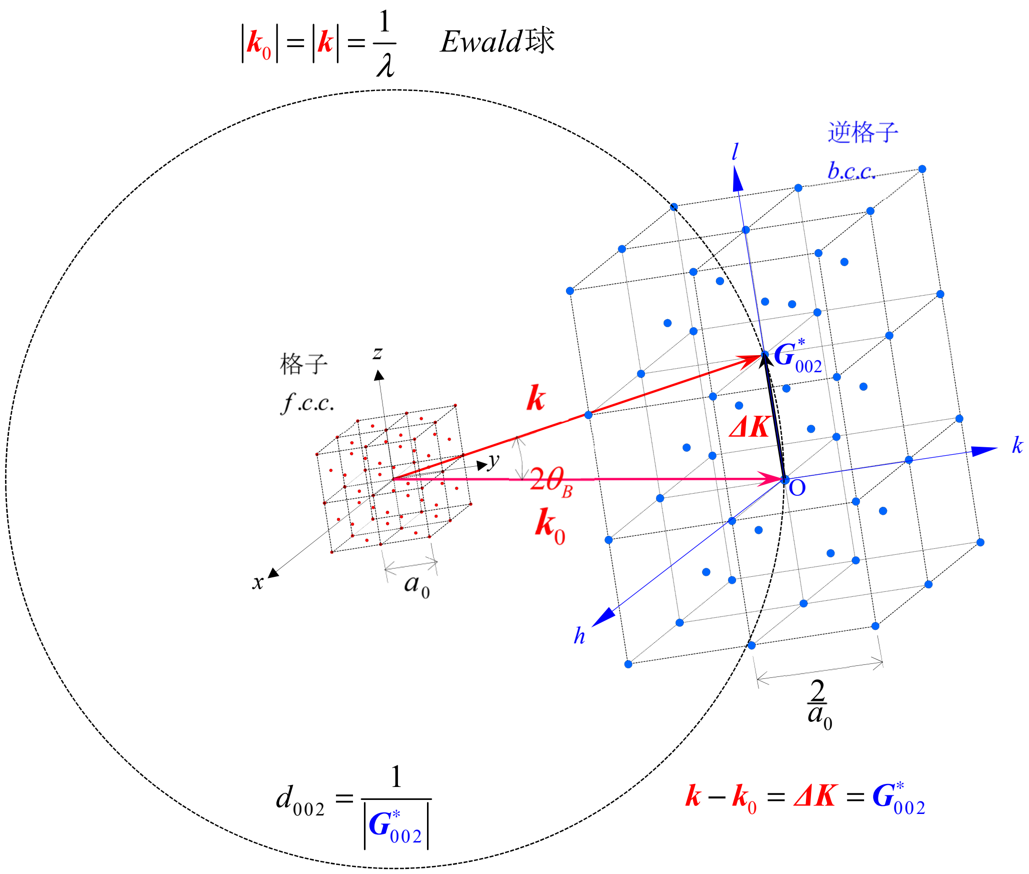
2024 年 前期　月曜 3 限　13:00-14:30　201 講義室

固体構造解析学



先進工学部マテリアル創成工学科

石黒 孝

ishiguro@rs.tus.ac.jp

講義予定　（　朱書きの日付は振替休日　）

1	4/15	基本数学	スカラー　ベクトル　行列　行列式　微分　積分
2	4/22	波の数理	ピタゴラス→三角関数→複素数→オイラー（指数関数）
3	4/29	波の位相	→位相→波
4	5/6	波の重ね合わせ	フーリエ変換
5	5/13	いろいろな結晶	
6	5/20	対称性　点群	32 点群
7	5/27	ブラベー格子　格子と逆格子	１４ブラベー格子　逆格子の定義
8	6/3	結晶構造　空間群　回折条件	２３０空間群
9	6/10	逆空間における回折条件	エバルドの作図
10	6/17	トムソン散乱　原子散乱因子	1 原子からの回折波
11	6/24	結晶構造因子　ラウエ関数	単位胞からの回折波　結晶からの回折波
12	7/1	結晶構造因子の計算	単位胞からの回折波の計算例
13	7/8	X 線の発生	
14	7/15	回折実験	
15	7/29	達成度評価試験	

※　全てのレポートは word で作成し、pdf ファイルに変換して提出すること
手書きを撮影またはスキャンし、それを word に貼り付けて pdf に変換したものは評価対象としない

本講義におけるすべてのレポートの提出について　厳守項目

1　レポートは word で作成すること。**手書きレポートは評価しない**（0 点とする）
word の行間はホーム→段落で 1 行とすること。
word のレイアウト→余白→狭いとすること。
word の挿入→ヘッダ→　学籍番号　氏名　を記入すること
ファイル名は　**学籍番号　氏名　科目名　XX 回目レポート**　とすること

2　word で作成したファイルを pdf に変換したものを提出すること。（剽窃チェツクをおこなうため）
手書きした文章、式、図、グラフを撮影またはスキャンして word に貼り付け、pdf に変換したものは原則として、認めない。（どんなに立派なレポートでも 0 点とする）

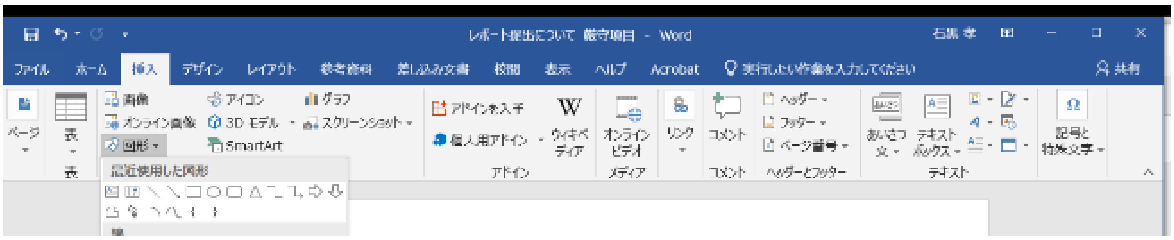
3　計算では、単なる算数をやっているのではないので、先ず必要な変数の定義を記述し、それら変数の記号を用いて式を立てること。（算数をやった場合は、答えの数字が正解でも、例外なく減点する）
式を変形して、求める物理量を示し、これに単位付きで数値を代入して答えを求めること。（答えに単位も忘れずに！）
例　長方形の面積：S、縦の長さ: $a=2[m]$、横の長さ：$b=3[m]$ とすると

$$S=ab=2[m]\times3[m]=6[m^2]\quad //$$

4　式は 3 文字程度のインデントを取った左寄せで書き始め、式変形する場合は改行した後、＝（イコール）の位置が同じくなるようにすること。（中央揃えはみにくい！！）

5　式変形は論理展開であり、極めて重要である。よって、必要に応じて“=”の理由を付記すること！
断片的な式だけ、単語だけを並べたのでは文脈は伝わらない。
式変形は理系の“文章”である。理科大生として、ちゃんとした文章が書ける人になること！！

6　図を描くときには、原則として word で挿入→図形を使って描くこと。



7　当然のことであるが、レポートは自分で解答すること。剽窃チェックで一致率を過去に遡って確認できるので、単にコピペで作成したレポートはわかってしまう。これはカンニングと同じである。クラスに提供した者、写した者がいる場合、両者は 0 点となる。

8　過去レポートを含め、他者のレポートを写してはいけない。**部分的にも写してはいけない！！**
自分で考え、自分の言葉、自分で確認・理解した式を用いて書くこと。
※　問題にもよるが、剽窃チェックで一致度が(50〜60)%以上の場合は、0 点もしくは%分得点を減じる。

今からおよそ 135 億年前、いわゆる「ビックバン」によって、物質、エネルギー、時間、空間が誕生した。私たちの宇宙の根本を成すこれらの要素の物語を「物理学」という。

物質とエネルギーは、この世にあらわれてから 30 万年ほど後に融合し始め、原子と呼ばれる複雑な構造体を成し、やがてその原子が結合して分子ができた。原子と分子とそれらの相互作用の物語を「化学」という。

およそ 38 億年前。地球と呼ばれる惑星の上で特定の分子が結合し、格別大きく入り組んだ構造体、すなわち有機体（生物）を形作った。有機体の物語を「生物学」という。

そしておよそ 7 万年前、ホモ・サピエンスという種に属する生物が、なおさら精巧な構造体、すなわち文化を形成し始めた。そうした人間文化のその後の発展を「歴史」という。

歴史の道筋は、三つの重要な革命が決めた。約 7 万年前に歴史を始動させた認知革命、約 1200 年前に歴史の流れを加速させた農業革命、そしてわずか 500 年前に始まった科学革命だ。三つ目の科学革命は、歴史に終止符を打ち、何か全く異なる展開を引き起こす可能性が十分にある。本書ではこれらの三つの革命が、人類をはじめ、この地上の生きとし生けるものにどのような影響を与えてきたのかという物語を綴っていく。

ユヴァル・ノア・ハラリ著　　サピエンス全史　より

レヴィ・ストロースは何が人間の主体的行動を規定すると考えたのでしょうか。
世界は人間なしに始まり、人間なしに終わる
何が人間の主体的行動を規定すると考えたのでしょうか。
自由な人間も人間の主体的な行動も実は存在しない。人間は社会の構造の中で、そこに染まって生きるのであると、彼は考えました。常に進歩があるわけではない。先進国ばかりではなく、未開の社会もあるし、人間は社会に合わせて生きていくことしかできないという考え方です。このような思想は、「構造主義」と呼ばれています。ちなみに、構造主義の本質は方法論にあって、研究対象の構造、すなわち構成要素を取り出し、その要素間の関係を整理統合することで研究対象を総合的に理解しようというものです。
「社会の構造が人間の意識をつくる。完全に自由な人間なんていない」
このような構造主義の考え方は、今日では自然科学的にも正解に近いとされています。レヴィ・ストロースは多くの未開社会を研究し、その観点から文明社会を批判する過程で、社会の構造が人間の意識を作ることに気づいたのだと思います。

山口治明著　哲学と宗教全史　より

ブリコラージュ　　*cf*　　アンガージュマン

※　自然科学・工学の言葉は数学である。数学は論理的展開を記述する言葉である。言葉の学びは手で文字を書くことである。これにとって必須な、アルファベット・ギリシャ文字を書く練習を自分で十分に練習すること。

基礎数学の公式

三角関数

$$\sin(\alpha+\beta)=\sin\alpha\cos\beta+\cos\alpha\sin\beta\,,\qquad \cos(\alpha+\beta)=\cos\alpha\cos\beta-\sin\alpha\sin\beta \tag{1}$$

微分 $$\frac{d\sin\theta}{d\theta}=(\sin\theta)'=\cos\theta\,,\quad \frac{d\cos\theta}{d\theta}=(\cos\theta)'=-\sin\theta \tag{2}$$

Euler の公式

ファインマンは“人類の至宝”　“This is our jewel”と呼んだ！

$$e^{i\theta}=\cos\theta+i\sin\theta \tag{5}$$

ピタゴラスの定理から　$\cos^2\theta+\sin^2\theta=1$

これを因数分解して　$(\cos\theta+i\sin\theta)(\cos\theta-i\sin\theta)=e^{i\theta}e^{-i\theta}$

ここで $\begin{cases}\cos\theta+i\sin\theta\equiv e^{i\theta}\\ \cos\theta-i\sin\theta\equiv e^{i\theta}\end{cases}$ $\rightarrow$ $\therefore \begin{cases}\dfrac{e^{i\theta}+e^{-i\theta}}{2}=\cos\theta\\ \dfrac{e^{i\theta}-e^{-i\theta}}{2i}=\sin\theta\end{cases}$

※　複素平面で幾何学的に $\equiv$ を考察してみよ！

博士の愛した数式：　$e^{i\pi}+1=0$　　（オイラーの等式）

https://www.youtube.com/watch?v=OoOs9ojv9jo

https://www.youtube.com/watch?v=xu7weRx4RzA

https://www.youtube.com/watch?v=rYf8I-D-oo0

Taylor 展開

$$\begin{aligned}f(x)&=f(a)+\frac{f'(a)}{1!}(x-a)+\frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2+\cdots+\frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n+\cdots\\&=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n=\sum_{n=0}^{\infty}\left.\frac{f^{(n)}(x)}{n!}\right|_{x=a}(x-a)^n\end{aligned} \tag{6}$$

※　$a=0$ の場合を特に Maclaurin 展開と呼ぶ。

$$f(x)=f(0)+\frac{f'(0)}{1!}x+\frac{f''(a)}{2!}x^2+\cdots+\frac{f^{(n)}(a)}{n!}x^n+\cdots$$

スカラー量とベクトル量

書き方　　a　はスカラー

　　　　　$\boldsymbol{a}$　はベクトル　　あるいは　$\vec{a}$　がベクトル

行ベクトルと列ベクトル　　$(x_1, x_2, x_3, \cdots)$　が行ベクトル row vector　　$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$　が列ベクトル column vector

行列と行列式　　例えば　$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$　が行列 matrix　　$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}$　が行列式 determinant

３行３列の行列を列ベクトルに演算する計算

$$\mathrm{A}\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}b_1 + a_{12}b_2 + a_{13}b_3 \\ a_{21}b_1 + a_{22}b_2 + a_{23}b_3 \\ a_{31}b_1 + a_{32}b_2 + a_{33}b_3 \end{pmatrix}$$

問１　$\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$　に対する下記の変換例を示せ

$\boldsymbol{r}$ を反転

$\boldsymbol{r}$ を恒等変換

$\boldsymbol{r}$ を z 軸周り $\boldsymbol{\theta}$ 回転

$\begin{pmatrix} X \\ 0 \\ z \end{pmatrix}$ を z 軸周り $\boldsymbol{\theta}$ 回転

問2　O − xyz 直交座標系においてそれぞれの軸の単位ベクトルを $\boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$ とする。

$\boldsymbol{a}$ 、 $\boldsymbol{b}$ の x, y, z 成分をそれぞれ a_x, a_y, a_z 、 b_x, b_y, b_z とし、 $\boldsymbol{a}$ ， $\boldsymbol{b}$ のなす角を θ とする。

(1)　$\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}$ を図示せよ。

(2)　$\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$ の絶対値(大きさ) $|\boldsymbol{a}|$, $|\boldsymbol{b}|$ を求めよ。

$|\boldsymbol{a}| =$　　　　$|\boldsymbol{b}| =$

(3)　内積 $\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}$ を成分表示で示せ。

$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} =$

(4)　θ を求めよ。

(5)　外積 $\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ の成分表示を求めよ。

$\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b} =$

(6)　$\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ の意味を図示し、 $|\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}|$ が $\boldsymbol{a}$ ， $\boldsymbol{b}$ を二辺とする平行四辺形の面積 S に等しいことを示せ。

(6)　$\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ を用いて θ を求めよ。

(7)　$\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$ に対して独立な $\boldsymbol{c}$ を考え、それらを稜とする平行六面体を考える。その体積 Ω が $(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{c}$ で与えられることを図を用いて証明せよ。

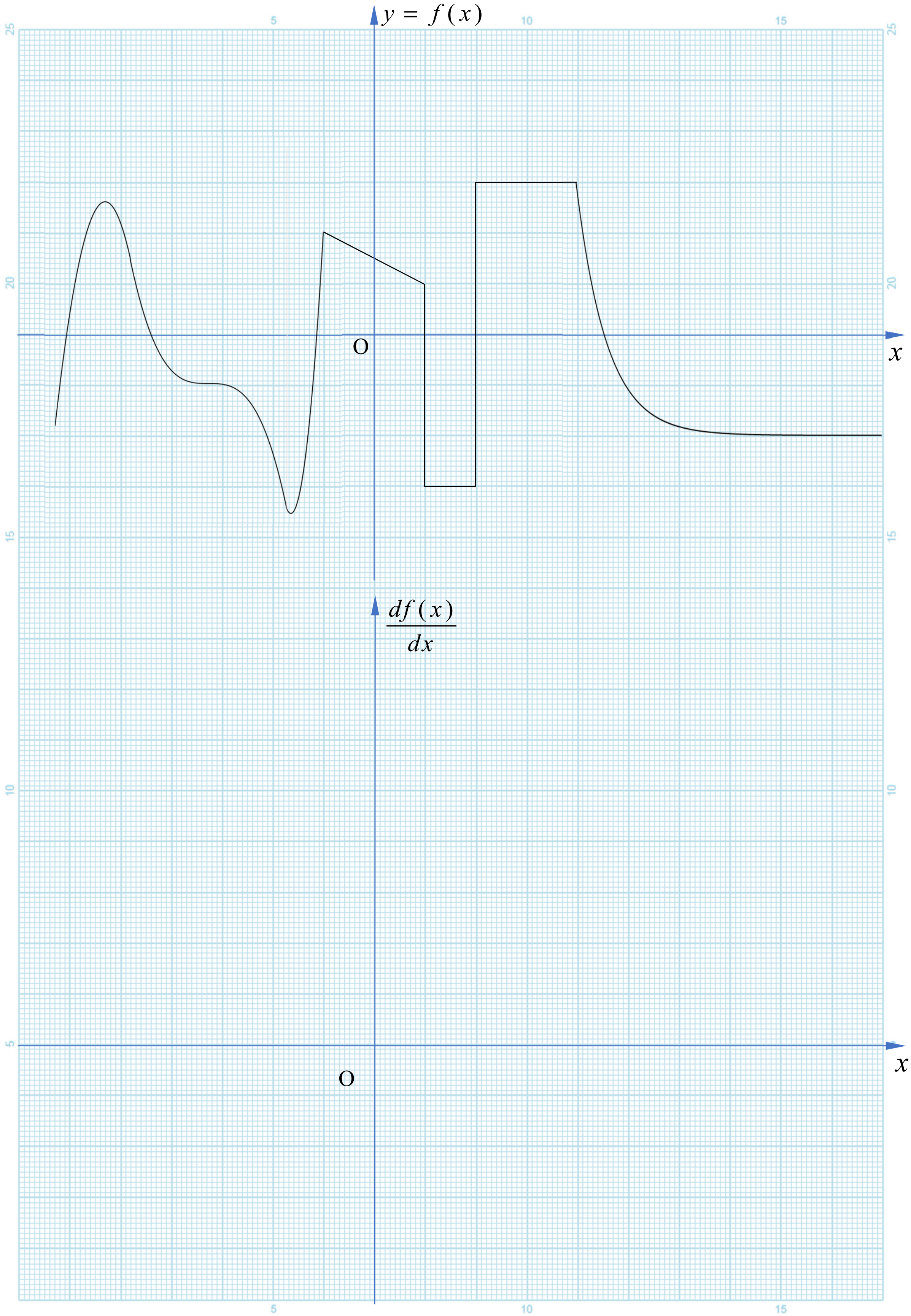
※　よくある間違い　$\dfrac{|\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{a}|}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}=\dfrac{1}{\boldsymbol{b}}=\dfrac{1}{b}$　←こんな無茶苦茶な約分はできない。ベクトルの逆数は無い。

問3　原点を中心に半径 $r=|\boldsymbol{r}|$ で $\mathrm{O}-xy$ 面内で円運動をしている質点の運動量が $\boldsymbol{p}=\begin{pmatrix}p_x\\p_y\end{pmatrix}$ で与えられるときの角運動量ベクトル $\boldsymbol{L}=\begin{pmatrix}L_x\\L_y\\L_z\end{pmatrix}$ を求めよ。そして $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{L}$ の幾何学的関係が分かるように図示せよ。

問4　微分の意味　積分の意味　を確認する。先ずはじめに、x 目盛り 1 ㎜ごとに縦軸 0.1 ㎜の精度で $f(x)$ の値を読取り、excel に入力せよ。このデータを基に、微分、積分を数値計算し、グラフを作図し、グラフエリア、プロットエリアを塗りつぶしなしとして、(1), (2)の該当する座標に貼り付けよ。

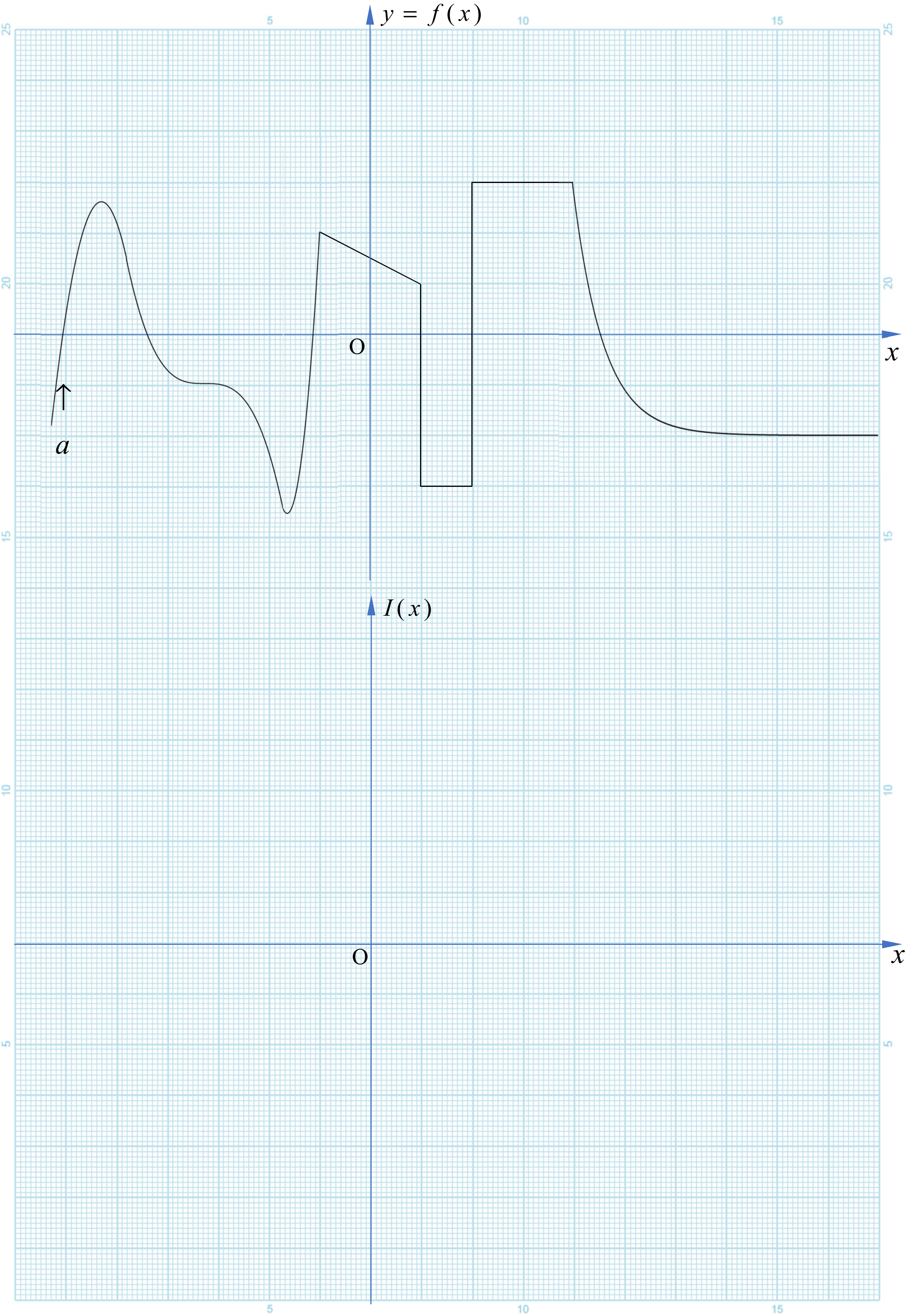
※　課題提出では pdf に変換し、計算、作図に用いた excel ファイルと合わせて upload せよ。

(1)　$\dfrac{dy}{dx}$ を図示せよ。近接する x 座標 2 点により求めた傾きは、近接する x 座標点の中点の値とする。



（2） $I(x)=\int_a^x f(x)\,dx$ を図示せよ。

区分求積法により計算すること。作図においては近接 x 座標点の中点の座標を用いよ。



おまけ

対数

$$\log_a x = y \quad \Leftrightarrow \quad a^y = x \qquad \log x + \log y = \log xy, \quad \log x - \log y = \log \frac{x}{y}$$

自然対数の底　$\lim_{h \to 0}(1+h)^{\frac{1}{h}} = e$

または，$\lim_{h \to \infty}\left(1+\frac{1}{n}\right)^n = e = 2.7182818284\cdots$　（e は自然対数の底）　(6)

底の変換　$\log_a b = \dfrac{\log_c b}{\log_c a}$

$\therefore$　$\log x \equiv \log_{10} x = \dfrac{\log_e x}{\log_e 10} = \dfrac{\log_e x}{2.302585093\cdots}$　常用対数

または　$\ln x \equiv \log_e x = \dfrac{\log_{10} x}{\log_{10} e} = \dfrac{\log_{10} x}{0.434294482\cdots}$　自然対数　(7)

対数の微分　$\dfrac{d \ln x}{dx} = \dfrac{1}{x}$、　$\dfrac{d \log_a x}{dx} = \dfrac{1}{x}\log_a e = \dfrac{1}{\log_e a}\cdot\dfrac{1}{x}$　(8)

※　log あるいは ln は Iog あるいは In ではない！！

$1+2+3+4+5+6+7+8+\cdots\cdots = -\dfrac{1}{12}$　Euler

※　証明は、大栗先生の超弦理論入門　大栗博司　講談社ブルーバックス　を参照