

科目 構造・性質系-1-A

受験番号 _____

氏名 _____



科目 構造・性質系-1-A



※解答は、点線より下に記入すること。

(注：この用紙の問題への解答はこの面のみとし、裏面にはしないこと。)

問題1 2つの水素原子が互いに近づいた時のエネルギー変化を考える。水素原子間の平衡原子間距離は 0.74 \AA である。以下の問いに答えよ。

(1) 電子のスピンの平行及び反平行な時、原子間距離の関数としてエネルギー変化の概略を描け。なお、無限遠方におけるエネルギーを 0 とする。

(2) 両者のエネルギー変化の違いが生じる原因を量子力学的観点から説明せよ。

解答欄

| | | | |
|-----|--|-----|---|
| (1) | | (2) | <p>(例) パウリの排他律により同じ量子状態の電子は互いに避け合う。このため、スピンが平行な場合、水素原子間の中心付近で電子が少なくなり、結合に寄与しなくなる。</p> |
|-----|--|-----|---|

問題2 原子半径 r の原子が最稠密構造をとった。以下の問いに答えよ。なお、平方根は小数にしなくて良い。

(1) 図1は最稠密面における原子配列の一部を描いている。原子の接触している所には隙間ができる。原子の中心 O から隙間の中心 A までの距離 (実線 OA の長さ) を求めよ。導出過程も示すこと。

(2) 最稠密面の重なりを考えた時、次の原子面の原子は隙間の上に乗る (図2は図1に原子を重ね、横から見ている)。層間距離 (両端矢印の長さ) を求めよ。導出過程も示すこと。

(3) 最稠密面を重ねた時、稠密六方構造および面心立方構造の1周期の長さを求めよ。

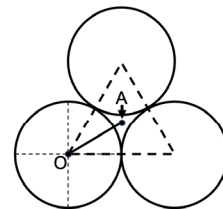


図1

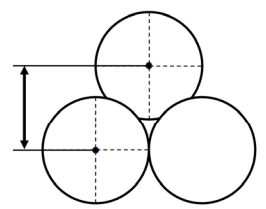


図2

解答欄

| | |
|-----|--|
| (1) | <p>$2\sqrt{3}r/3$ (導出過程は略)</p> |
| (2) | <p>$2\sqrt{6}r/3$ (導出過程は略)</p> |
| (3) | <p>稠密六方構造：$4\sqrt{6}r/3$ 面心立方構造：$2\sqrt{6}r$ ($6\sqrt{6}r/3$ も可)</p> |

科目 構造・性質系-1-B

受験番号

氏名

科目 構造・性質系-1-B

※解答は、点線より下に記入すること。

(注：この用紙の問題への解答はこの面のみとし、裏面にはしないこと。)

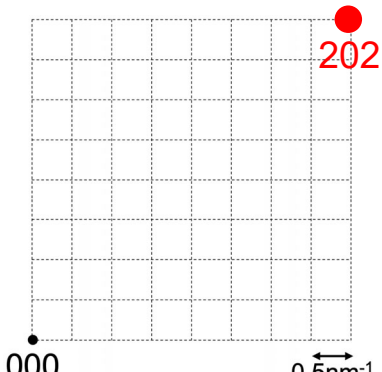
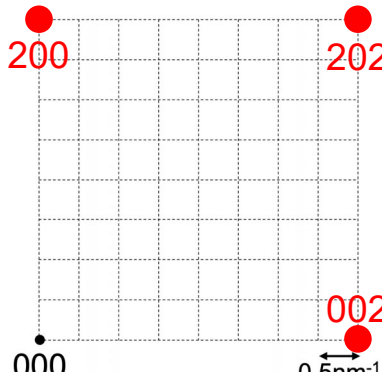
問題 以下の問いに答えよ。なお、構造因子の計算では反射指数を hkl とすること。

(1) ダイヤモンド型構造は、立方晶の対角線に沿って $1/4$ ずれた2つの面心立方格子に原子を配列した構造である。原子散乱因子を f として構造因子を計算し、出現則、消滅則が分かる形にせよ。導出過程も示すこと。

(2) ダイヤモンド型構造の2つの面心立方格子の一方を A 原子、もう一方を B 原子が占めると、閃亜鉛鉱型構造になる。A 原子の原子散乱因子を f_A 、B 原子の原子散乱因子を f_B として構造因子を計算し、出現則、消滅則が分かる形にせよ。導出に際しては、(1) の解答を参照にしても良い。

(3) 電子線の Ewald 球は非常に大きいため、電子回折実験では逆格子空間のある面を切った逆格子点の並びが得られる。格子定数が 0.5 nm のダイヤモンド型構造、閃亜鉛鉱型構造を持つ結晶がある。[010]方向から電子線を入射したときの回折図形を描き、全ての反射に指数をつけよ。なお、実格子の大きさを a とした時、その逆格子の大きさを $1/a$ と定義する。強度については考慮しなくて良い。

解答欄

| | | | |
|-----|---|--|--|
| (1) | <p>F を構造因子, n を整数とする。 ア) h, k, l が偶奇混合の時: $F = 0$ イ) h, k, l が偶奇非混合, かつ $h+k+l=4n$ の時: $F = 8f$ $h+k+l=4n+1$ の時: $F = 4f(1+i)$ $h+k+l=4n+2$ の時: $F = 0$ $h+k+l=4n+3$ の時: $F = 4f(1-i)$ (導出過程は略)</p> | (2) | <p>F を構造因子, n を整数とする。 ア) h, k, l が偶奇混合の時: $F = 0$ イ) h, k, l が偶奇非混合, かつ $h+k+l=4n$ の時: $F = 4(f_A+f_B)$ $h+k+l=4n+1$ の時: $F = 4(f_A+if_B)$ $h+k+l=4n+2$ の時: $F = 4(f_A-f_B)$ $h+k+l=4n+3$ の時: $F = 4(f_A-if_B)$ (f_A と f_B は逆でも良い) (導出過程は略)</p> |
| (3) | <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; display: inline-block;">ダイヤモンド</div>  | <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; display: inline-block;">閃亜鉛鉱</div>  | |

| | |
|----|------------|
| 科目 | 構造・性質系-2-A |
|----|------------|

受験番号 _____

氏名 _____

| |
|--|
| |
|--|

| | |
|----|------------|
| 科目 | 構造・性質系-2-A |
|----|------------|

| |
|--|
| |
|--|

※解答は、点線より下に記入すること。

(注：この用紙の問題への解答はこの面のみとし、裏面にはしないこと。)

問題 多結晶合金の結晶粒径と機械的性質との関係について、転位運動に関連させて説明せよ。
(図表を用いて説明しても良い)

解答例

多結晶合金の塑性変形では、すべり（転位運動）が結晶粒界を超えると、結晶粒界は転位運動の障害物として作用する。隣り合う結晶粒の方位は異なっているため、転位が隣の粒に侵入するには運動の方位を変える必要があり、方位差が大きくなるほど困難になる。また、結晶粒界では原子配列が乱れているため、すべり面は1つの粒から他の粒へと連続していない。細かい結晶粒を持つ多結晶合金は、転位運動の障害となる結晶粒界が多いため、粗大粒を持つそれよりも硬く強度がある。

多結晶合金の降伏応力 σ_Y と結晶粒径 d との間にはホール-ペッチの式が実験的に見出されている。

$$\sigma_Y = \sigma_i + k_y d^{1/2}$$

ここで σ_i は単結晶の平均降伏強度であって、結晶粒界強化以外のすべての強化機構によって決まる。また、 k_y は結晶粒界が降伏強度を高める効果を表すパラメーターである。つまり、結晶粒径が小さくなると降伏強度が増加することを示している。ただし、結晶粒径が極端に小さいもしくは非常に粗大な場合、この式には当てはまらないこともある。結晶粒径微細化は多くの合金において強度だけでなく、靱性も向上させることもある。また、多結晶合金を使用する環境がクリープ変形を起こすような高い温度の場合、結晶粒径が小さいと粒界すべりが助長され超塑性変形をすることがある。

科目 構造・性質系-2-B

受験番号

氏名

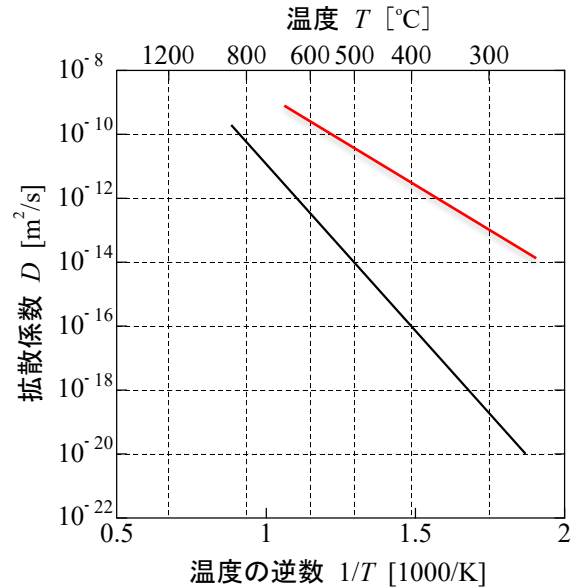
科目 構造・性質系-2-B

※解答は、点線より下に記入すること。

(注：この用紙の問題への解答はこの面のみとし、裏面にはしないこと。)

問題 面心立方構造を有する金属 A 中の原子 A の拡散係数 (自己拡散係数) の温度依存性を図に示す。以下の問いに答えよ。

- (1) 時間 t の間に原子が拡散によって移動する距離 (拡散距離) は \sqrt{Dt} の程度である (D は拡散係数)。773 K で 1 時間の加熱保持を行った場合の原子 A の拡散距離を求めよ。なお、単位は $[\mu\text{m}]$ とすること。
- (2) (1) と同じ距離の拡散を 673 K で生じさせるために必要な加熱時間を求めよ。なお、単位を記すこと。
- (3) 金属 A 中における侵入型原子 X の拡散を考える。原子 X の拡散係数の温度依存性の概略を図中に描け。そのように描いた理由を含めて原子 X の拡散機構について説明せよ。



(1) $\sqrt{Dt} = \sqrt{10^{-14} \times 3600} = 6 \times 10^{-6} \text{ m} = 6 \mu\text{m}$

(2) $\sqrt{10^{-14} \times 3600} = \sqrt{10^{-16} \times t}$ より, $t = 360000 \text{ s} = 100 \text{ h}$

(3) 侵入型原子 X は格子間機構によって拡散するために、空孔機構による拡散係数よりも大きくなり、さらに拡散の活性化エネルギーは原子空孔の生成エネルギーの分だけ小さくなるのでアレニウスプロットの傾きは空孔機構による拡散に比べて緩やかになる。