

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  $0.74 \text{ \AA}$  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に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)	
-----	--	-----	--

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載る(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。

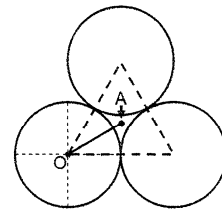


図1

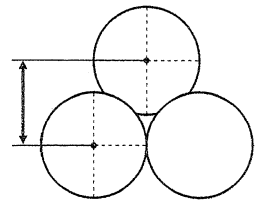


図2

解答欄

(1)			
(2)			
(3)	<table style="width: 100%; border: none;"> <tr> <td style="width: 50%; border: none;">稠密六方構造：</td> <td style="width: 50%; border: none;">面心立方構造：</td> </tr> </table>	稠密六方構造：	面心立方構造：
稠密六方構造：	面心立方構造：		

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  $0.5 \text{ nm}$  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)		(2)	
(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)

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。

