問題５　金属材料学

【出題意図】

Ⅰ　金属材料の評価において，引張試験データから応力およびひずみを読み取ることは重要です．また，金属の変形を理解するうえで，すべりを理解することは重要です．本設問では，これらの基礎知識と計算力を問いました．

Ⅱ　金属構造材料を用いるうえで，鉄および鋼は重要であります．このとき，鉄の特性を理解するためには，鉄の同素変態および結晶の特徴を知る必要があります．さらに，合金設計をするうえでは，炭素の固溶量も知らなければいけません．本設問では，純鉄を取り上げ，結晶構造およびその特徴に関する基礎知識を問いました．

Ⅲ　金属材料の合金設計をするうえで，平衡状態図は重要です．本設問では，Al-Si 合金を取り上げ，その平衡状態図に対する理解度を問いました．また，アルミニウム合金の強化機構で，もっとも基本的な時効処理の基礎についても問いました．

【解答例】

Ⅰ

（1）降伏応力： 80 MPa，　引張最大応力： 110 MPa

（2）真応力：　143 MPa，真ひずみ：　ln 1.3

（3）$\dfrac{10\sqrt{6}}{49}$

（4）$\dfrac{60\sqrt{6}}{49}$ MPa

Ⅱ

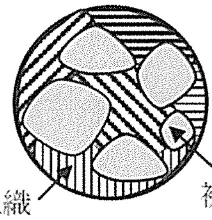
（1）八面体位置：$\left(\dfrac{2\sqrt{3}}{3}-1\right)r$，四面体位置：$\left(\dfrac{4\sqrt{15}}{12}-1\right)r$

（2）八面体位置：$(\sqrt{2}-1)\,r$，四面体位置：$\left(\dfrac{\sqrt{6}}{2}-1\right)r$

（3）高温で安定な鉄の方がより多く炭素を固溶できる。

Ⅲ

（１）



（２） α-Al 相：Si 相 ＝874 : 109

（３） まず，溶体化処理によって過飽和固溶体を作成する．その後，時効処理を施すことで析出物を析出させ，材料強度を向上させる．

問題６　量子物性・材料化学　出題意図・解答例

Ⅰ

＜出題意図＞

混合溶液の基本的な熱力学，活量・活量係数やその溶液のモデルの違い，または状態図との関連の理解度を問いました。

（１）　理想溶液は混合のエンタルピー$\Delta_{\mathrm{mix}}H=0$であり、またランダムに成分Ａと成分Ｂが混ざっているため混合のエントロピーが$\Delta_{\mathrm{mix}}S=-R\left(x_{\mathrm{A}}\ln x_{\mathrm{A}}+(1-x_{\mathrm{A}})\ln(1-x_{\mathrm{A}})\right)$であらわされる溶液であるのに対して、正則溶液は混合のエントロピーは同様であるが混合のエンタルピーが$\Delta_{\mathrm{mix}}H\propto x_{\mathrm{A}}(1-x_{\mathrm{A}})$であらわされる溶液である。

（２）　$\Delta_{\mathrm{mix}}G^{\mathrm{ideal}}=RT\left(x_{\mathrm{A}}\ln x_{\mathrm{A}}+(1-x_{\mathrm{A}})\ln(1-x_{\mathrm{A}})\right)$

（３）　マルグレスの式

（４）　$\Delta_{\mathrm{mix}}G^{\mathrm{reg}}=RT\left(x_{\mathrm{A}}\ln x_{\mathrm{A}}+(1-x_{\mathrm{A}})\ln(1-x_{\mathrm{A}})\right)+\Omega x_{\mathrm{A}}(1-x_{\mathrm{A}})$

（５）　純粋状態のモルギブズエネルギーが等しく，$x_{\mathrm{A}}=0.5$で上部臨界溶解温度が現れたので$\Omega=2RT$となる。よって$\Omega=2RT=2\times 8.31\times 600=9.97\times 10^{3}\mathrm{Jmol^{-1}}$

（６）　$\Omega=2RT$より$\ln\gamma_{\mathrm{A}}=2(1-x_{\mathrm{A}})^2=2\times 0.500\times 0.500=0.500$よって$\gamma_{\mathrm{A}}=e^{0.5}=1.65$，活量は$a_{\mathrm{A}}=0.500\times 1.65=0.825$

Ⅱ

＜出題意図＞

量子力学の典型的な問題です。波動方程式、波動関数、固有値に関する基礎知識を問いました。

（１）

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

（２）井戸の中では$V_0=0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)=E\psi(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$$

$k\equiv\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$とおいて

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)=-k^2\psi(x)$$

この微分方程式の解は

$$\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx$$

境界条件を適用

$$A\cos\frac{kL}{2} + B\sin\frac{kL}{2} = 0$$

$$A\cos\frac{kL}{2} - B\sin\frac{kL}{2} = 0$$

A＝0 で$\sin\frac{kL}{2} = 0$，つまり整数 n を使って，$\frac{kL}{2} = n\pi$
および
B＝0 で$\cos\frac{kL}{2} = 0$，つまり整数 n を使って，$\frac{kL}{2} = \frac{\pi}{2}(2n+1)$
$n = 0$ は波動関数として無意味なので、$k = \frac{n\pi}{L}$として波動関数の解は,

$\psi(x) = A\cos kx$　　（n=1,3,5,......）

$\psi(x) = B\sin kx$　　（n=2,4,6,......）

波動関数を規格化すると

$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2 dx = 1$より

$$A = B = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

したがって

$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\frac{n\pi}{L}x$　　（n=1,3,5,......）

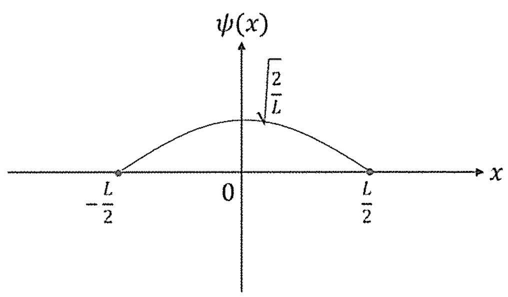
$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi}{L}x$　　（n=2,4,6,......）

対応するエネルギー固有値は,

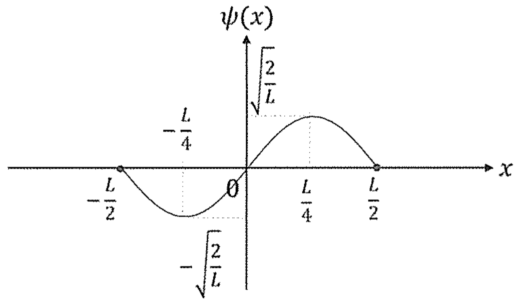
$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$$

（３）

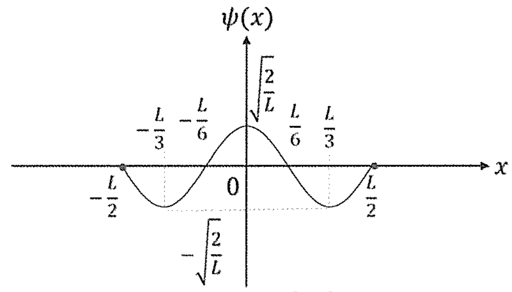
最低



２番目



３番目



（4）$V_0=\infty$の場合の波動関数は井戸の外（$x \leq -\frac{L}{2}$, $\frac{L}{2} \leq x$）では 0 であるが，V_0が有限な大きさの場合は井戸の外でも 0 にならず波動関数が染み出す。

Ⅲ

＜出題意図＞

結晶の構造解析に用いられるＸ線の基本的な性質に関する知識を問いました。

①：電場, ②：磁場, ③：c/λ, ④：hc/λ, ⑤：h/λ, ⑥：特性Ｘ線, ⑦：連続Ｘ線, ⑧：eV, ⑨：$mv^2/2$, ⑩：$\lambda_{min}=hc/eV$, ⑪：粒子性, ⑫：波動性

※①および②は逆の順番でも可。

※⑪および⑫は逆の順番でも可。