

2024年度

東京大学大学院 工学系研究科  
マテリアル工学専攻  
入学試験問題

マテリアル工学基礎

2023年8月30日（水） 10:00 ~ 12:00

受験番号(Examinee No.)

- 注意事項 -

- 1) 試験時間は120分である。
- 2) 解答用紙に受験番号と氏名を記入すること。
- 3) 問題は4問ある。この中から2問を選択して解答すること。3問以上解答した場合は全問無効となる。
- 4) 1問につき1枚の解答用紙を使用し、選択した問題の番号を丸で囲むこと。解答用紙の表面だけで書ききれない場合には、裏面を使用してよい。
- 5) 日本語または英語で解答すること。
- 6) この問題冊子にも受験番号を記入すること。
- 7) この問題冊子は持ち帰らないこと。

(計算用紙)

(計算用紙)

(計算用紙)

(計算用紙)

## 【第1問】熱力学・速度論

1. 圧力，温度，および組成のみで状態を記述できる系を考える。以下の問いに答えよ。

(1)  $c$  個の成分を含む相が平衡状態にあるとき， $i$  番目の成分の化学ポテンシャル  $\mu_i$  は①で定義される。

$$\mu_i \equiv \left( \frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{P, T, n_j (j \neq i)} \quad \text{①}$$

ここで， $G$  は相のGibbsエネルギー， $P$  は圧力， $T$  は温度， $n_i$  は相に含まれる  $i$  番目の成分のモル数である。このとき，②を導出せよ。

$$VdP - SdT - \sum_{i=1}^c n_i d\mu_i = 0 \quad \text{②}$$

ここで， $V = \left( \frac{\partial G}{\partial P} \right)_{T, n_i (i=1, \dots, c)}$  は相の体積， $S = - \left( \frac{\partial G}{\partial T} \right)_{P, n_i (i=1, \dots, c)}$  は相のエントロピーである。

(2) 次に定温，定圧下で平衡状態にある，成分 A と成分 B からなる二元系溶体を考える。この溶体は全組成範囲で安定である。この溶体の1 mol あたりのGibbsエネルギーが  $G'$  で与えられるとき，A の化学ポテンシャル  $\mu_A$  および B の化学ポテンシャル  $\mu_B$  を  $G'$  および  $x_B$  を用いてそれぞれ導出せよ。ここで， $x_B$  は B のモル分率を表す。

(3) 図1に(2)で考えた二元系溶体の  $G'$  の曲線が示されている。このとき，曲線上の点 K における  $\mu_A$  および  $\mu_B$  は(2)の結果より図を用いてどのように決定されるか。図1を解答用紙に描き写したうえでその図上に求め方を図示せよ。

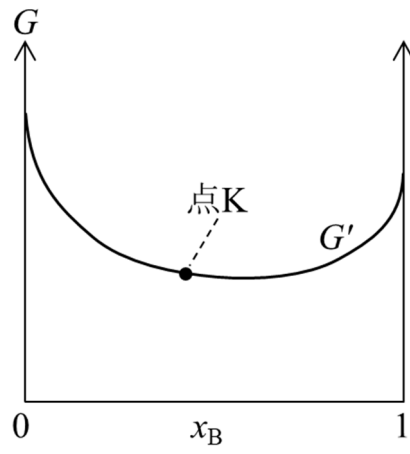


图1

具体的な溶体として、1 atm, 1100 K で平衡状態にある 90.0 mol%Cu-10.0 mol%Zn 融体を考える。

1 atm, 1100 K において、Cu-Zn 融体中の Cu の活量係数  $\gamma_{\text{Cu}}$  は融体の Zn のモル分率  $x_{\text{Zn}}$  を用いて③で表される。

$$\log_e \gamma_{\text{Cu}} = -0.500x_{\text{Zn}}^2 \quad \text{③}$$

ここで、 $\gamma_{\text{Cu}}$  は純粋な液体を基準とする Cu の活量  $a_{\text{Cu}}$  と Cu のモル分率  $x_{\text{Cu}}$  を用いて  $\gamma_{\text{Cu}} = a_{\text{Cu}} / x_{\text{Cu}}$  の関係により定義される。

(4) この融体の  $a_{\text{Cu}}$  を有効数字 3 桁で求めよ。

(5) ②の関係をj用いて、③から この融体の  $\log_e \gamma_{\text{Zn}}$  を  $x_{\text{Zn}}$  の関数として求めよ。

ここで、 $\gamma_{\text{Zn}}$  は Cu-Zn 融体中の Zn の活量係数であり、純粋な液体を基準とする Zn の活量  $a_{\text{Zn}}$  を用いて  $\gamma_{\text{Zn}} = a_{\text{Zn}} / x_{\text{Zn}}$  の関係により定義される。

(6) この融体の Zn 蒸気圧を有効数字 3 桁で求めよ。なお、1 atm, 1100 Kにおける純粋な Zn の蒸気圧は 0.421 atm である。



2. 物質が出入りしない閉じた系の容器があり、この容器の内部は常に所定の温度と圧力に保持されている。この容器に気体 **A** を充填する。**A** は単独では安定な物質であるが、固体触媒 **X** と接触すると、気体 **P** を生成する一次不可逆反応  $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{P}$  (反応速度定数  $k_1$ )、および、気体 **Q** を生成する一次不可逆反応  $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{Q}$  (反応速度定数  $k_2$ ) の 2 つの並発反応を生じる。以下の問いに答えよ。必要であれば、気体定数  $R = 8.31 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$  を用いよ。

(1) **A** のみが充填された容器に **X** を投入した時刻を  $\tau = 0$  とする。このとき、時刻  $\tau = t$  における **A**, **P**, および **Q** のモル分率  $x_A$ ,  $x_P$ , および  $x_Q$  を、 $k_1$ ,  $k_2$ , および  $t$  を用いてそれぞれ表せ。

(2) この 2 つの並発反応の反応速度定数はいずれも Arrhenius 型の温度依存性を示す。また、2 つの反応速度定数の比  $k_1/k_2$  は 400 K で 2.72, 800 K で 1.00 である。反応  $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{P}$  の活性化エネルギーを  $E_1$ , 反応  $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{Q}$  の活性化エネルギーを  $E_2$  とするとき、その差  $E_2 - E_1$  ( $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$ ) を有効数字 3 桁で求めよ。

(3) 600 K に保持された **A** のみを充填した容器に **X** を入れた。 $x_A = 1.00 \times 10^{-2}$  になったとき、 $x_Q$  を有効数字 3 桁で求めよ。

## 【第2問】 組織学

1. A-B二元系固溶体合金 $\alpha$ の相分離について考える。この固溶体の温度 $T$ における1モルあたりのGibbsエネルギーは正則溶体近似を用いると以下の式で表せる。

$$G = G_A^\circ x_A + G_B^\circ x_B + RT(x_A \log_e x_A + x_B \log_e x_B) + \Omega x_A x_B \quad \text{①}$$

ただし、 $G_A^\circ$ 、 $G_B^\circ$ はそれぞれ純粋なA、Bの1モルあたりのGibbsエネルギー、 $x_A$ 、 $x_B$ はそれぞれ成分A、Bのモル分率、 $R$ は気体定数、 $\Omega$ は相互作用パラメータであり正の定数とする。図1にA-B二元系の状態図を示す。以下の問いに答えよ。

- (1) 図1中の破線をスピノーダル曲線と呼び、 $x_B$ に関する①の二階偏導関数を用いて導出される。スピノーダル曲線を表す $T$ と $x_B$ との関係式を導出せよ。
- (2) 相分離が起こる上限の温度 $T_C$ を、 $\Omega$ および $R$ を用いて示せ。
- (3)  $\Omega = \frac{8}{3}RT_1$ のとき、温度 $T_1$ でスピノーダル分解による相分離が起きる $x_B$ の下限値 $x_{s1}$ および上限値 $x_{s2}$ を求めよ。
- (4) 実線と破線で挟まれた領域と、破線の内側の領域とで起きる相分離過程の違いについて100字程度で説明せよ。

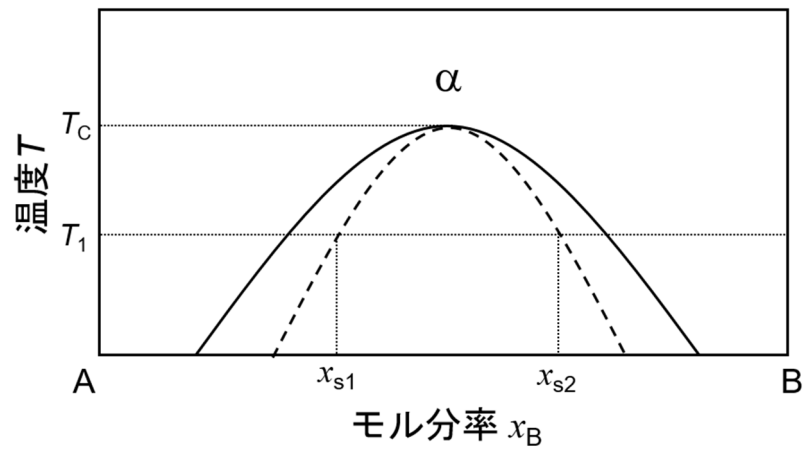


図1

2. 図2の状態図で示されるC-D二元系共晶合金の微細組織形成について考える。以下の問いに答えよ。

- (1) 図2に示す質量分率 $X_1$ の合金が温度 $T_1$ において平衡状態にあるとき、合金中の $\alpha$ 相の質量割合 $W_\alpha$ を、 $X_{1\alpha}$ 、 $X_{1L}$ および $X_1$ を用いて示せ。
- (2) 図2に示す質量分率 $X_1$ 、 $X_E$ および $X_2$ の合金を $T_0$ から平衡を保ちながらゆっくり冷却した場合を考える。 $T_1$ 、 $T_E$ 直上、および $T_E$ 直下における各合金の微細組織の模式図を描き、各図の特徴について合計200字程度で説明せよ。

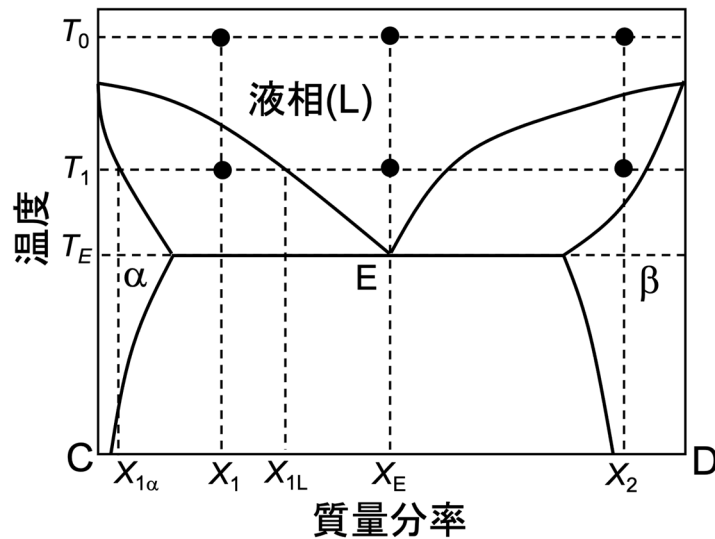


図 2

(計算用紙)

## 【第3問】材料物性学

1. 貴ガスの2原子間のvan der Waals力を表すポテンシャルは、①のLennard-Jones型ポテンシャル $V(r)$ で近似できる。

$$V(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad \text{①}$$

ここで、 $\varepsilon$ はポテンシャルの深さ、 $r$ は原子間距離、 $\sigma$ は $V(r) = 0$ になる距離であり、 $V(r)$ の概形が図1に示されている。以下の問いに答えよ。

- (1)  $V(r)$ が最小となる原子間距離 $r^*$ を $\sigma$ を用いて表せ。
- (2) 原子間距離の変位( $\Delta r = r - r^*$ )が小さい場合、van der Waals力により結合している貴ガス2原子間のポテンシャルは図1の破線に示した調和振動子ポテンシャル  $V(r) = V(r^*) + k(r - r^*)^2/2$  で近似できる。ここで、 $k$ はばね定数である。この場合、 $V(r)$ は①を $r^*$ 近傍でTaylor展開することで得られる。 $k$ を $\varepsilon$ 、 $\sigma$ を用いて表せ。
- (3) 一般に、van der Waals結合している貴ガスは、低温において結晶となる。結晶構造として体心立方格子と面心立方格子のいずれが安定か、30字程度で理由とともに述べよ。

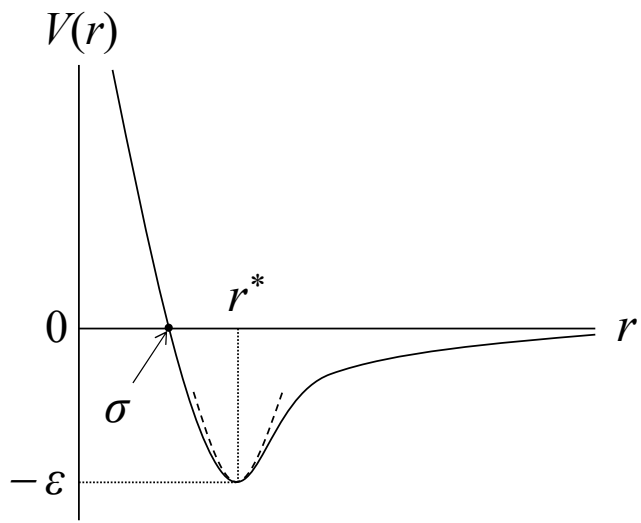


图1

2. 一次元のSchrödinger方程式②に従い、エネルギー $E$ 、質量 $m$ の $x$ 方向のみに運動出来る粒子を考える。

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \varphi = E\varphi \quad \textcircled{2}$$

$\varphi$ は粒子の波動関数、 $\hbar$ はPlanck定数を $2\pi$ で割ったものである。この粒子は、図2に示すような幅が $d$ 、深さが $V_0$ の一次元井戸型ポテンシャル内に束縛されている ( $-V_0 < E < 0$ )。

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0) \\ -V_0 & (0 \leq x \leq d) : \text{領域I} \\ 0 & (x > d) : \text{領域II} \end{cases} \quad \textcircled{3}$$

このとき、領域I及び領域IIにおける波動関数は、以下のように与えられる。

$$\varphi = \begin{cases} A \sin k_I x & (0 \leq x \leq d) : \text{領域I} \\ B \exp(-k_{II} x) & (x > d) : \text{領域II} \end{cases} \quad \textcircled{4}$$

ここで $A$ 、 $B$ は定数であり、 $k_I > 0$ かつ $k_{II} > 0$ である。以下の問いに答えよ。

- (1) 領域Iにおけるエネルギー $E_I$ を $k_I$ 、 $\hbar$ 、 $m$ 、 $V_0$ を用いて、領域IIにおけるエネルギー $E_{II}$ を $k_{II}$ 、 $\hbar$ 、 $m$ を用いてそれぞれ表せ。
- (2) (1)の結果を用いて、 $k_I^2 + k_{II}^2$ を $\hbar$ 、 $m$ 、 $V_0$ を用いて表せ。
- (3)  $x = d$ における境界条件を用いて、 $k_I$ と $k_{II}$ の関係を求めよ。
- (4)  $\alpha = k_I d$ 、 $\beta = k_{II} d$ とする。 $\alpha\beta$ 平面上で(2)、(3)で求めた2つの方程式の表す図を考えることで、束縛状態が少なくとも1つ存在するための $V_0$ における条件を求めよ。
- (5) 束縛状態が1つ存在する際の確率密度 $|\varphi|^2$ の概形を $x = 0$ 、 $x = d$ の境界での違いを明確にして描け。



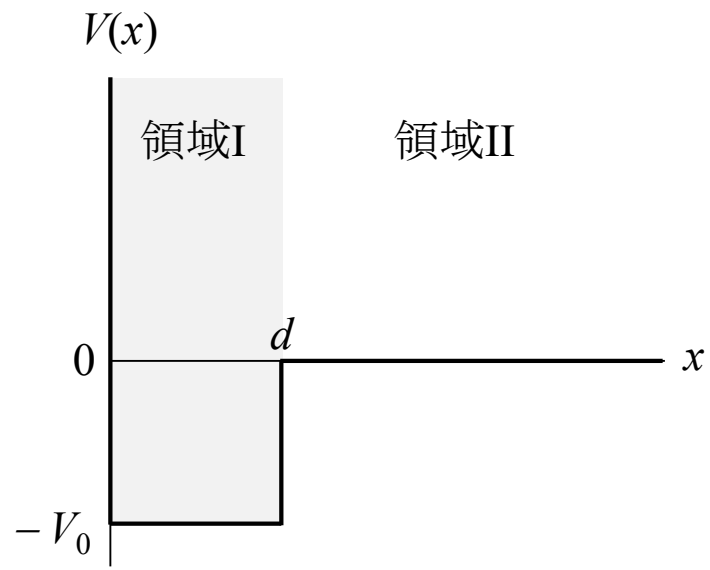


図2

## 【第4問】材料力学

材料の弾性定数が等方的であると仮定し、以下の問いに答えよ。

なお、バーガースベクトルを  $\mathbf{b}$ 、転位線の方をを表す単位ベクトルを  $\mathbf{t}$  としたとき、応力  $\boldsymbol{\sigma}$  のもとで転位が受ける単位長さあたりの力  $\mathbf{F}$  は、次式で与えられる。

$$\mathbf{F} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \times \mathbf{t} \quad \text{①}$$

また、直交座標系  $(x_1, x_2, x_3)$  の  $x_3$  軸に沿った、バーガースベクトルが  $x_1$  軸に平行な刃状転位が作る応力場  $\boldsymbol{\sigma}_{\text{edge}}$  は、次式で与えられる。

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{edge}} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \begin{pmatrix} -\frac{x_2(3x_1^2 + x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & \frac{x_1(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & 0 \\ \frac{x_1(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & \frac{x_2(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2\nu x_2}{x_1^2 + x_2^2} \end{pmatrix} \quad \text{②}$$

ここで、 $b$  はバーガースベクトルの大きさ、 $\mu$  は材料の剛性率、 $\nu$  はポアソン比である。

図1に示すように直交座標系  $(x_1, x_2, x_3)$  に、純銅の立方体の単結晶が置かれている。各面は  $x_1, x_2, x_3$  軸に直交し、それぞれのミラー指数は  $(1\bar{2}1)$ ,  $(10\bar{1})$ ,  $(111)$  である。この単結晶に、応力成分のうち  $\sigma_{23} = \sigma_{32}$  だけが有意であるように、外部応力を付加することを考える。なお、ここでは  $x_i$  軸に垂直な平面に作用する  $x_j$  軸方向の応力成分を  $\sigma_{ij}$  と表記する。

(1) この条件下での主すべり系の指数を答えよ。

(2) 主すべり系の刃状転位に作用する単位長さあたりの力  $\mathbf{F}^{\text{ext}}$  を  $\sigma_{23}$  と  $b$  を用いて求めよ。

次に、図2に示すように、 $x_1$ 軸に平行な一対の異符号の刃状転位を考える。転位1と転位2のバーガスベクトルはそれぞれ  $\mathbf{b}_1 = [0, b, 0]$ ,  $\mathbf{b}_2 = [0, -b, 0]$  であり、転位線の方法は  $\mathbf{t}_1 = \mathbf{t}_2 = [1, 0, 0]$  である。また、転位1は $x_1$ 軸上に固定され、転位2は転位1のすべり面から距離  $d$  だけ離れたすべり面上を摩擦なく自由に移動できるものとする。

(3) 転位2が $(0, x_2, d)$ を通るとき、転位1が作る応力場が転位2に及ぼす単位長さあたりの力  $\mathbf{F}^{\text{int}}$  を  $\mu, \nu, b, d, x_2$  を用いて求めよ。また、その $x_2$ 軸方向の成分  $F_2^{\text{int}}$  の概形を  $x_2$  の関数として図示し、転位2が安定して存在できる点を示せ。

(4)  $|F_2^{\text{int}}|$  の最大値を  $\mu, \nu, b, d$  を用いて求めよ。

変形した結晶では、しばしば異符号の刃状転位からなる双極子が形成される。いま、図1の単結晶内の主すべり系で、すべり面が互いに距離  $d$  だけ離れた異符号の刃状転位の双極子が一対形成されているとする。

(5) この双極子を分解するために必要な応力成分  $\sigma_{23}$  の条件を求めよ。

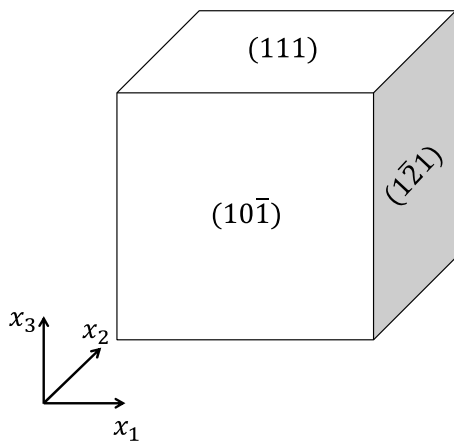


図 1

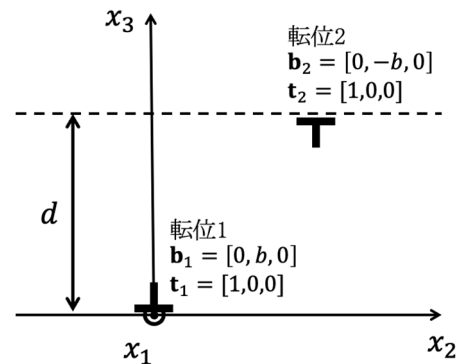


図 2

(計算用紙)

(計算用紙)

(Calculation Sheet)

(Calculation Sheet)

## 【Problem 1】 Thermodynamics and Kinetics of Materials

1. Consider a system whose state can be described by pressure, temperature, and compositions only. Answer the following questions.

(1) When a phase containing  $c$  components is in equilibrium, the chemical potential of the  $i$ th component,  $\mu_i$ , is defined by ①,

$$\mu_i \equiv \left( \frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{P, T, n_j (j \neq i)} . \quad \text{①}$$

Here,  $G$  is the Gibbs energy of the phase,  $P$  is pressure,  $T$  is temperature, and  $n_i$  is the mole number of the  $i$ th component contained in the phase. Derive ②,

$$VdP - SdT - \sum_{i=1}^c n_i d\mu_i = 0 , \quad \text{②}$$

where  $V = \left( \frac{\partial G}{\partial P} \right)_{T, n_i (i=1, \dots, c)}$  is the volume of the phase, and  $S = - \left( \frac{\partial G}{\partial T} \right)_{P, n_i (i=1, \dots, c)}$  is the entropy of the phase.

(2) Next, consider a binary solution composed of component A and component B in equilibrium under constant temperature and constant pressure. This solution is stable at the whole composition range. When the Gibbs energy per 1 mol of this solution is given as  $G'$ , derive  $\mu_A$  and  $\mu_B$  by using  $G'$  and  $x_B$ . Here,  $\mu_A$  and  $\mu_B$  are the chemical potentials of A and B, respectively, and  $x_B$  is the mole fraction of B.

(3) Figure 1 shows the  $G'$  curve of the binary solution considered in (2). How can  $\mu_A$  and  $\mu_B$  at the point K on the curve be determined by using the figure, based on the result of (2)? Copy Figure 1 on the answer sheet and draw its method on the figure.



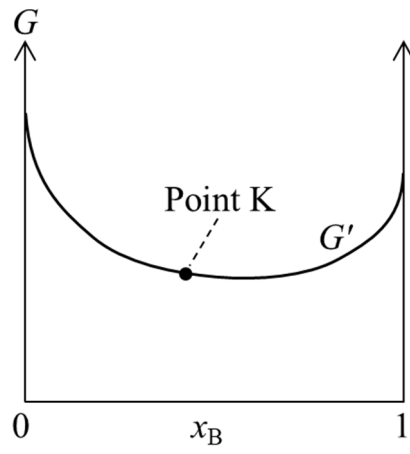


Figure 1

As an example solution, consider the 90.0 mol%Cu-10.0 mol%Zn liquid in equilibrium under 1 atm at 1100 K.

The activity coefficient of Cu in the Cu-Zn liquid,  $\gamma_{\text{Cu}}$ , is expressed as ③ by using the mole fraction of Zn in the liquid,  $x_{\text{Zn}}$ , under 1 atm at 1100 K,

$$\log_e \gamma_{\text{Cu}} = -0.500x_{\text{Zn}}^2 . \quad \text{③}$$

Here,  $\gamma_{\text{Cu}}$  is defined by the relationship  $\gamma_{\text{Cu}} = a_{\text{Cu}} / x_{\text{Cu}}$ , using the activity of Cu relative to its pure liquid,  $a_{\text{Cu}}$ , and the mole fraction of Cu,  $x_{\text{Cu}}$ .

- (4) Calculate  $a_{\text{Cu}}$  of this liquid with three significant digits.
  
- (5) Answer  $\log_e \gamma_{\text{Zn}}$  of this liquid as a function of  $x_{\text{Zn}}$  from ③ by using the relationship ②. Here,  $\gamma_{\text{Zn}}$  is the activity coefficient of Zn in the Cu-Zn liquid and defined by the relationship  $\gamma_{\text{Zn}} = a_{\text{Zn}} / x_{\text{Zn}}$ , using the activity of Zn relative to its pure liquid,  $a_{\text{Zn}}$ .
  
- (6) Calculate the Zn vapor pressure of this liquid with three significant digits. Note that the vapor pressure of pure Zn under 1 atm at 1100 K is 0.421 atm.

2. There is a container of the closed system into which no substance enters or exits, and the inside of this container is always maintained at predetermined temperature and pressure. Now, gas **A** is filled in this container. While **A** is a stable substance alone, two parallel reactions, the first-order irreversible reaction producing gas **P**,  $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{P}$  (reaction rate constant  $k_1$ ), and the first-order irreversible reaction producing gas **Q**,  $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{Q}$  (reaction rate constant  $k_2$ ), proceed by contacting with solid catalyst **X**. Answer the following questions. If necessary, use the gas constant  $R = 8.31 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$ .

- (1) Let  $\tau = 0$  be the time when **X** is put into the container filled with **A** only. Express  $x_{\mathbf{A}}$ ,  $x_{\mathbf{P}}$ , and  $x_{\mathbf{Q}}$  at  $\tau = t$  by using  $k_1$ ,  $k_2$ , and  $t$ . Here,  $x_{\mathbf{A}}$ ,  $x_{\mathbf{P}}$ , and  $x_{\mathbf{Q}}$  are the mole fractions of **A**, **P**, and **Q**, respectively.
- (2) Both reaction rate constants of these two parallel reactions show the Arrhenius-type temperature dependence. Further, the ratio of two reaction rate constants,  $k_1 / k_2$ , is 2.72 at 400 K and 1.00 at 800 K. Calculate the difference,  $E_2 - E_1$  ( $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$ ), between the activation energy of the reaction  $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{P}$ ,  $E_1$ , and the activation energy of the reaction  $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{Q}$ ,  $E_2$ , with three significant digits.
- (3) **X** was put into the container filled only with **A** and maintained at 600 K. Calculate  $x_{\mathbf{Q}}$  when  $x_{\mathbf{A}}$  reached  $x_{\mathbf{A}} = 1.00 \times 10^{-2}$  with three significant digits.

## 【Problem 2】 Structure of Materials

1. Consider the phase separation in the A-B binary solid solution alloy  $\alpha$ . The Gibbs energy of the solid solution per mole at temperature  $T$  can be expressed by the following equation using the regular solution approximation.

$$G = G_A^\circ x_A + G_B^\circ x_B + RT(x_A \log_e x_A + x_B \log_e x_B) + \Omega x_A x_B, \quad \textcircled{1}$$

where  $G_A^\circ$  and  $G_B^\circ$  are the Gibbs energies per mole of pure A and B, respectively,  $x_A$  and  $x_B$  are the mole fractions of the components A and B, respectively,  $R$  is the gas constant, and  $\Omega$  is the interaction parameter of a positive constant. Figure 1 shows the phase diagram of the A-B binary system. Answer the following questions.

- (1) The dashed line in Figure 1 is called the spinodal curve, which is derived using the second-order partial derivative of  $\textcircled{1}$  with respect to  $x_B$ . Derive an equation for the relationship between  $T$  and  $x_B$ , which represents the spinodal curve.
- (2) Show the upper limit temperature  $T_C$  at which phase separation occurs, using  $\Omega$  and  $R$ .
- (3) In the case of  $\Omega = \frac{8}{3}RT_1$ , obtain the lower limit  $x_{s1}$  and the upper limit  $x_{s2}$  of  $x_B$  where the phase separation by the spinodal decomposition occurs at temperature  $T_1$ .
- (4) Explain the difference in the phase separation process occurring in the region between the solid and dashed curves and the region inside the dashed curve in about 60 words.

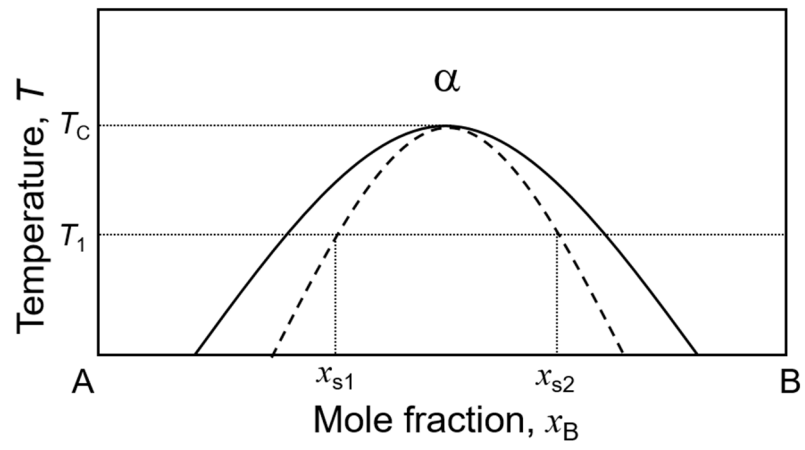


Figure 1

2. Consider the microstructure formation of the C-D binary eutectic alloy shown in the phase diagram in Figure 2. Answer the following questions.

(1) Show the mass proportion of phase  $\alpha$  in the alloy,  $W_\alpha$ , when the alloy with mass fraction  $X_1$  shown in Figure 2 is in equilibrium at temperature  $T_1$ , using  $X_{1\alpha}$ ,  $X_{1L}$ , and  $X_1$ .

(2) Consider the case where alloys with mass fractions  $X_1$ ,  $X_E$ , and  $X_2$  shown in Figure 2 are cooled slowly from  $T_0$  while maintaining equilibrium. Draw schematic images of the microstructure of each alloy at  $T_1$ , just above  $T_E$ , and just below  $T_E$ , and explain the characteristics of each image in about 120 words in total.

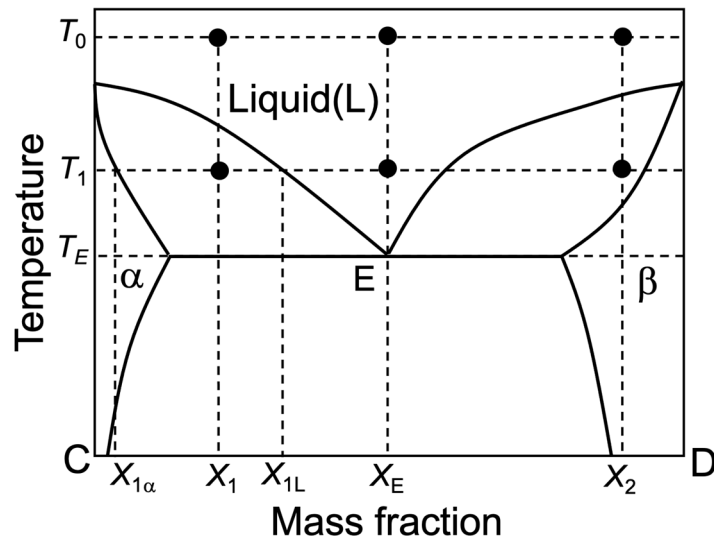


Figure 2

(Calculation Sheet)

### 【Problem 3】 Properties of Materials

1. The potential representing the van der Waals force between two noble gas atoms can be approximated by the Lennard-Jones type potential  $V(r)$  in the following equation,

$$V(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad \textcircled{1}$$

where  $\varepsilon$  is the potential depth,  $r$  is the interatomic distance, and  $\sigma$  is the distance at which  $V(r) = 0$ .  $V(r)$  is schematically illustrated in Figure 1. Answer the following questions.

- (1) Express the interatomic distance  $r^*$  that minimizes  $V(r)$  using  $\sigma$ .
- (2) When the displacement of the interatomic distance ( $\Delta r = r - r^*$ ) is small, the potential between two noble gas atoms bound by the van der Waals force can be approximated to the harmonic oscillator potential,  $V(r) = V(r^*) + k(r - r^*)^2/2$ , shown by the dashed line in Figure 1. Here,  $k$  is the spring constant. In this case,  $V(r)$  can be obtained by performing a Taylor expansion of  $\textcircled{1}$  in the vicinity of  $r^*$ . Express  $k$  using  $\varepsilon$  and  $\sigma$ .
- (3) In general, noble gas with van der Waals bonding crystallizes at low temperature. Explain in about 20 words which crystal structure is more stable, the body-centered cubic lattice or face-centered cubic lattice, together with the reason.



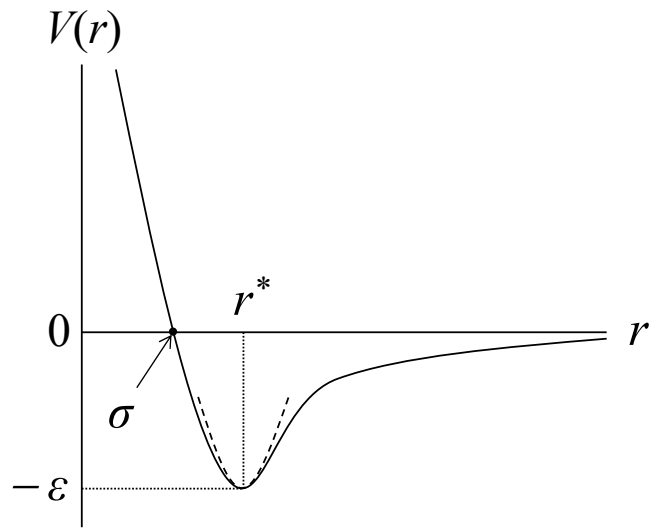


Figure 1

2. Consider a particle with energy  $E$  and mass  $m$  that can move only in the  $x$ -direction according to the one-dimensional Schrödinger equation ②,

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \varphi = E\varphi, \quad \text{②}$$

where  $\varphi$  is the wave function of the particle, and  $\hbar$  is the Planck constant divided by  $2\pi$ . This particle is bound in a one-dimensional well potential with width  $d$  and depth  $V_0$ , as shown in Figure 2 ( $-V_0 < E < 0$ ).

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0) \\ -V_0 & (0 \leq x \leq d) : \text{Region I} \\ 0 & (x > d) : \text{Region II} \end{cases} \quad \text{③}$$

In this case, the wave functions in the regions I and II are given as follows,

$$\varphi = \begin{cases} A \sin k_I x & (0 \leq x \leq d) : \text{Region I} \\ B \exp(-k_{II} x) & (x > d) : \text{Region II} \end{cases}, \quad \text{④}$$

where  $A$  and  $B$  are constants,  $k_I > 0$  and  $k_{II} > 0$ . Answer the following questions.

- (1) Express the energy in the region I,  $E_I$ , using  $k_I$ ,  $\hbar$ ,  $m$ , and  $V_0$ , and also express the energy in the region II,  $E_{II}$ , using  $k_{II}$ ,  $\hbar$ , and  $m$ .
- (2) Using the result of (1), express  $k_I^2 + k_{II}^2$  using  $\hbar$ ,  $m$ , and  $V_0$ .
- (3) Find the relationship between  $k_I$  and  $k_{II}$  using the boundary condition at  $x = d$ .
- (4) Let  $\alpha = k_I d$  and  $\beta = k_{II} d$ . Considering the diagrams of the two equations obtained in (2) and (3) on the  $\alpha\beta$  plane, find the condition of  $V_0$  for the existence of at least one bound state.
- (5) Draw the outline of the probability density  $|\varphi|^2$  when there is a single bound state, clarifying the difference at the boundaries of  $x = 0$  and  $x = d$ .

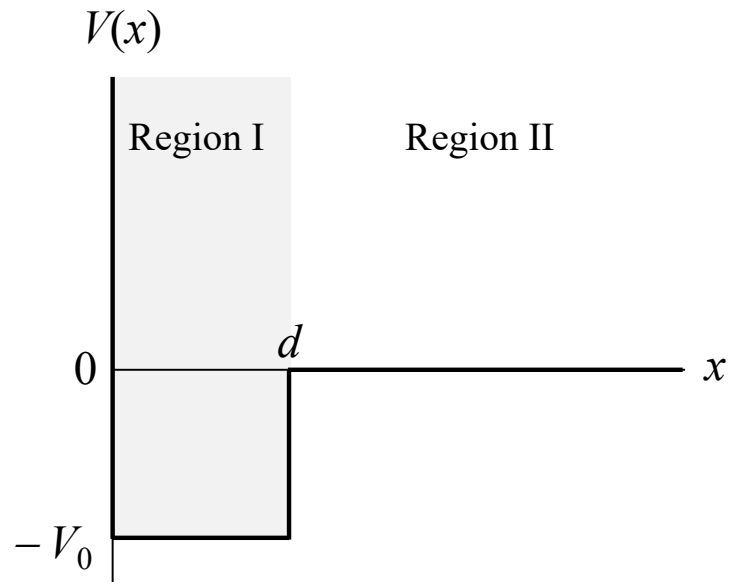


Figure 2

## 【Problem 4】 Mechanics of Materials

By assuming that the elastic constants of the material are isotropic, answer the following questions.

Here, the force per unit length  $\mathbf{F}$  acting on the dislocation under the stress  $\boldsymbol{\sigma}$  is given by the following equation:

$$\mathbf{F} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \times \mathbf{t}, \quad \textcircled{1}$$

where  $\mathbf{b}$  is the Burgers vector and  $\mathbf{t}$  is the unit vector representing the dislocation line direction. In addition, the stress field  $\boldsymbol{\sigma}_{\text{edge}}$  generated by an edge dislocation, which lies along the  $x_3$  axis with the Burgers vector parallel to the  $x_1$  axis in the Cartesian coordinate system  $(x_1, x_2, x_3)$ , is given by the following equation:

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{edge}} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \begin{pmatrix} -\frac{x_2(3x_1^2 + x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & \frac{x_1(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & 0 \\ \frac{x_1(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & \frac{x_2(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2\nu x_2}{x_1^2 + x_2^2} \end{pmatrix}, \quad \textcircled{2}$$

where  $b$  is the magnitude of the Burgers vector,  $\mu$  is the shear modulus of the material, and  $\nu$  is Poisson's ratio.

A cubic single crystal of pure copper is placed in the Cartesian coordinate system  $(x_1, x_2, x_3)$ , as shown in Figure 1. The surfaces are perpendicular to the  $x_1$ ,  $x_2$ , and  $x_3$  axes, and their Miller indices are  $(1\bar{2}1)$ ,  $(10\bar{1})$ , and  $(111)$ , respectively. Consider applying external stress to the single crystal so that only the stress components  $\sigma_{23} = \sigma_{32}$  are significant. Here, the stress component  $\sigma_{ij}$  is the stress in the  $x_j$  direction acting on the plane perpendicular to the  $x_i$  axis.

(1) Under this condition, answer the indices of the primary slip system.

- (2) Derive the force per unit length  $\mathbf{F}^{\text{ext}}$  acting on the edge dislocation of the primary slip system using  $\sigma_{23}$  and  $b$ .

Next, consider a pair of oppositely signed edge dislocations parallel to the  $x_1$  axis, as shown in Figure 2. The Burgers vectors of dislocations 1 and 2 are  $\mathbf{b}_1 = [0, b, 0]$  and  $\mathbf{b}_2 = [0, -b, 0]$ , respectively, and their dislocation line directions are  $\mathbf{t}_1 = \mathbf{t}_2 = [1, 0, 0]$ . Dislocation 1 is fixed along the  $x_1$  axis, and dislocation 2 can move freely without friction on the slip plane parallel to the slip plane of dislocation 1 separated by a distance  $d$ .

- (3) When dislocation 2 passes through  $(0, x_2, d)$ , derive the force per unit length  $\mathbf{F}^{\text{int}}$  acting on dislocation 2 due to the stress field of dislocation 1 using  $\mu$ ,  $\nu$ ,  $b$ ,  $d$ , and  $x_2$ . Also, schematically draw the graph of the  $x_2$ -axis component,  $F_2^{\text{int}}$ , as a function of  $x_2$ , and show the point(s) where dislocation 2 can stably exist.

- (4) Derive the maximum value of  $|F_2^{\text{int}}|$  using  $\mu$ ,  $\nu$ ,  $b$ , and  $d$ .

Dipoles composed of oppositely signed edge dislocations are often formed in a deformed crystal. Now, consider a dipole composed of a pair of oppositely signed edge dislocations, whose slip planes are separated by a distance  $d$ , is formed in the primary slip system in the single crystal shown in Figure 1.

- (5) Derive the condition on the stress component  $\sigma_{23}$  required to decompose this dipole.

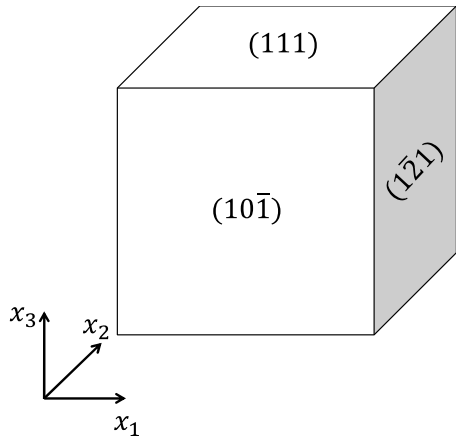


Figure 1

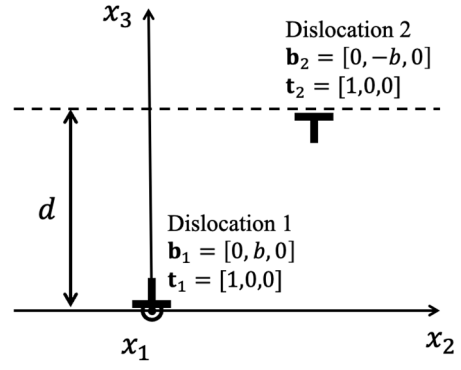


Figure 2

(Calculation Sheet)

(Calculation Sheet)



(Calculation Sheet)

(Calculation Sheet)

(Calculation Sheet)

Department of Materials Engineering  
Graduate School of Engineering  
The University of Tokyo

Entrance Examination for YR 2024

Fundamentals of Materials

10:00 ~ 12:00

Wednesday, August 30, 2023

Examinee No.					

- Attentions -

- 1) The examination duration is 120 minutes.
- 2) Fill in your examinee number and name in the spaces provided on the answer sheets.
- 3) Select two problems out of four problems. If you answer more than two problems, all your answers will become invalid.
- 4) You must use only one answer sheet for each problem, and circle the problem number selected. You may use the back side of the answer sheet, if necessary.
- 5) Answer in English or Japanese.
- 6) Fill in your examinee number in the spaces provided on this booklet.
- 7) This booklet must NOT be taken out after the exam.