

問 1. 以下の間に答えよ。

- 1) 電子についての系の状態密度 $D(E)$ は、次式で定義される。

$$D(E) = \frac{dN}{dE}$$

ここで E はエネルギー、 N は軌道状態の数であり、エネルギー E の関数である。今、 $D(E)$ が

$$D(E) = AE^n + BE^m$$

で与えられるとしよう。 A, B, n 及び m は定数(但し、 $n \neq m$ 且つ $n, m > 0$)。基底状態での系のエネルギーの総和 E_{total} を求めよ。ただし、エネルギーは 0 からフェルミエネルギー E_F までの範囲とする。なお E_{total} は

$$E_{\text{total}} = \int_0^{E_F} ED(E) dE$$

で表現される。

- 2) エネルギーが 0 からフェルミエネルギー E_F までの軌道状態の数 N を求めよ。
 3) $B = 0$ 且つ $n = 1/2$ の場合、基底状態での電子一ヶ当たりのエネルギー平均値 $\langle E \rangle$ を求めよ。

問 2. L1₂型規則格子において、A 原子が単位胞の 000 位置を、B 原子が $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$, $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$, $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ 位置を占めるとする。L1₂型規則格子について、次の各間に答えよ。

- 1) 結晶構造因子 F_{hkl} を計算し、基本格子反射、規則格子反射を分類せよ。ただし、A, B の原子散乱因子をそれぞれ f_A , f_B ($f_A \neq f_B$) とする。
- 2) 電子線回折パターンにおいて、入射スポット 000 と hkl 回折スポット間の距離 D_{hkl} を求めよ。ただし、格子定数を a 、カメラ長を L 、電子線の波長を λ とする。
- 3) 電子線入射方向が [101] の場合、電子線回折パターンはどのようになるか。基本格子反射を○、規則格子反射を○として図示し、指數を付けよ。

問 3. 固体の比熱に関する次の語句について説明せよ。

古典統計力学近似, アインシュタインの理論, デバイの理論