

1. 単純立方格子を描き、その(211)面を図示せよ。また、 $\langle 211 \rangle$ 方位は (211)面に垂直であることを示せ。

2. 図1に示す基本並進ベクトル  $\vec{a}_1, \vec{a}_2$  (但し  $|\vec{a}_1| = 2|\vec{a}_2|$ ) で表される2次元斜方格子(ネット)を考える。右図の上に、その逆格子の基本並進ベクトル  $\vec{b}_1, \vec{b}_2$  を、 $\vec{a}_1, \vec{a}_2$  に対する角度や  $\vec{b}_1$  と  $\vec{b}_2$  の長さの比に注意して描け。

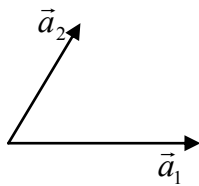


図1

3. 次の文章の括弧内を適当な語句や式で埋めよ (ヒント: カッコ内の文字は使われている変数などである)。

結晶試料のある位置を原点とすると、位置  $\vec{r}$  の微小体積  $dV$  で散乱される X 線の位相変化は [ 式①:  $\vec{r}, \vec{k}, \vec{k}'$  ] と表される。ここで、 $\vec{k}, \vec{k}'$  はそれぞれ入射及び散乱 X 線の波数ベクトルである。さらに、電子密度を  $n(\vec{r})$  とすると、試料全体による X 線の散乱振幅は  $F =$  [ 式②:  $\vec{r}, dV, \vec{k}, \vec{k}', n(\vec{r})$  ] と表せる。

結晶の周期対称性から電子密度は [ 名称③ ] ベクトル  $\vec{G}$  を用いたフーリエ級数で表すことが可能で  $n(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r})$  となる。この  $n(\vec{r})$  の表式を

式②に代入し、一般に [ 名称④ ] ベクトルと呼ばれる  $\Delta\vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}$  を用いて変形すると、[ 式⑤ ] の条件が満たされるときに  $F = Vn_{\vec{G}}$  となって強い振幅が生じることが分かる。

①

②

③

④

⑤

4. 希ガス結晶の凝集エネルギーを説明するために、二原子の間隔  $R$  及び正の定数  $A, B$  を用いて  $U = B/R^{12} - A/R^6$  の形で表されるレナードジョーンズ型のポテンシャルが良く利用される。それぞれの項がどのような相互作用を表すか説明せよ。また、その  $R$  に対する変化の様子の概略を描け。

5. 異なる質量（但し  $M_1 > M_2$ ）の2種類の原子が等しいバネ定数  $C$  のバネで間隔  $a/2$  にて交互に繋がれた一次元鎖の振動において、その定常波の角振動数  $\omega$  は次の4次式  $M_1 M_2 \omega^4 - 2C(M_1 + M_2)\omega^2 + 2C^2(1 - \cos Ka) = 0$  を満たさなければいけない。ここで、 $K$  は波数である。

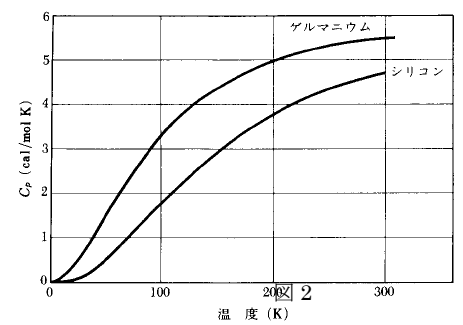
(1) 振動の波長が極めて長いとき、 $\omega^2$  の近似解として  $K$  に依存しないものと  $K^2$  に比例するものが得られる。これらの具体的な形を求めよ。

(2) 振動の波長が極めて長いとき、質量  $M_1, M_2$  の原子がどのように変位することで一次元鎖が振動しているか図示し、その特徴を述べよ。

(3)  $K$  の範囲はどこまでとするのが適切か、理由とともに述べよ。

6. 図2は Ge と Si の結晶におけるモル当りの定圧比熱の温度変化を表す。

(1) 図2に示されるように、十分に高い温度領域ではすべての結晶のモル当りの比熱はほぼ一定値となり、 $3R \sim 6 \text{ cal/(mol K)}$  である。“エネルギー等分配則”をキーワードとして、その理由を述べよ。



(2) 図2に示されるように、ある温度よりも低温では結晶固体の比熱は急速に減少して零に漸近する。“フォノン”をキーワードとしてその理由を定性的に述べよ。