

※ 式の羅列だけでは 0 点とする。=で結ばれる根拠を述べつつ、途中計算を記述すること。

※ 3 頁にまとめること！

※ 計算に用いた excel ファイルも upload せよ。

(1) 部分積分の公式を示せ。

(2) 原子の電子密度分布関数が球対称で次式で与えられるとき

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho(r) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{a_B} \right)^3 e^{-\frac{2r}{a_B}}, \quad \text{ここで } a_B = \text{定数}$$

$\int_{\text{原子}} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ を求めよ。

※ 部分積分を 2 回行うが、それぞれの計算で(1)の公式と関数の関係を明記すること。

(3) 上記原子の原子散乱因子 f を計算せよ。

$$f\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right) = \int_0^{\infty} 4\pi r^2 \rho(r) \frac{\sin K \cdot r}{K \cdot r} dr, \quad \text{ここで } K = 4\pi \frac{\sin \theta}{\lambda}$$

ヒント： $p > 0$ として成立する次の積分公式

$$\int_0^{\infty} e^{-pr} \sin qr \, dr = \frac{q}{p^2 + q^2} \quad \text{を } p \text{ で微分して、} \int_0^{\infty} r e^{-pr} \sin qr \, dr \text{ の積分を求め、与式と比較する。}$$

(4) $a_B = 0.529 \text{ \AA}$ とし、 $\rho(r)$ 及び $f\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right)$ を excel で計算し、グラフを図示せよ。

ただし、 $\rho(r)$ は $0 < r \leq 1.5 \text{ \AA}$ の範囲を青い線で、

$f\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right)$ は $0 < \frac{\sin \theta}{\lambda} \leq 1.5 \text{ \AA}^{-1}$ の範囲を赤い線でそれぞれグラフを描け。

※ 縦軸、横軸の名称、目盛、数値そして単位を明記すること。