問１．以下の問に答えよ。

1) N 個の自由電子について考え，状態密度を $D(E)$，フェルミエネルギーを E_F, 化学ポテンシャルをμとする（E はエネルギーである）。温度 T のときの系の全エネルギー $W(T)$は,

$$W(T)=\int_0^{\infty} ED(E)f(E,T)dE$$

で表わされる。$f(E,T)$は, フェルミーディラックの分布関数であり次式で表される(k_B はボルツマン定数)。

$$f(E,T)=\frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right)+1}$$

$W(0)$ を求めよ。なお, 0 Kでは化学ポテンシャルμはフェルミエネルギーE_Fに等しい。

2) 0 Kでは, 粒子数 N については次式で表わされる。

$$N=\int_0^{E_F} D(E)dE$$

では温度 T のとき, 粒子数 N はどう表現されるか。フェルミーディラックの分布関数を用いて表せ。

3) 1)および 2)の結果を基に

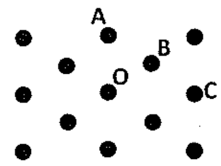
$$W(T)-W(0)=\int_{E_F}^{\infty}(E-E_F)D(E)f(E,T)\,dE+\int_0^{E_F}(E_F-E)(1-f(E,T))D(E)\,dE$$

を導け。

問２． 以下の問に答えよ。

1) ダイヤモンド格子の$(h\,k\,l)$面に対する結晶構造因子Fを計算し，消滅則を説明せよ。ただし，原子散乱因子をf，単位胞内の原子の座標を000，$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$，$\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$，$0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$，$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$，$\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}$，$\frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}$，$\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}$とする。

2) 右図にダイヤモンド格子（格子定数 3 Å）の電子線回折図形の模式図を示す。O スポットを 000 として，A，B，C スポットに指数を付け，電子線の入射方向を求めよ。ただし，$\overline{\mathrm{OA}} = 2$ cm，$\overline{\mathrm{OB}} = \sqrt{3}$ cm，$\overline{\mathrm{OC}} = 2\sqrt{2}$ cm，$\angle\mathrm{AOC} = 90°$，$L\lambda = 3$ cmÅ とする。ここで，Lはカメラ長，λは電子線の波長である。



3) 2) の電子線回折図形中，多重回折によって生じたスポットを示し，多重回折について説明せよ。

問３．以下の問に答えよ。

結晶における単位胞の基本ベクトルを$\vec{a}$，$\vec{b}$，$\vec{c}$，逆格子の基本ベクトルを$\vec{a}^*$，$\vec{b}^*$，$\vec{c}^*$とすると，

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}\cdot\left(\vec{b}\times\vec{c}\right)} \qquad \vec{b}^* = \frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}\cdot\left(\vec{b}\times\vec{c}\right)} \qquad \vec{c}^* = \frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}\cdot\left(\vec{b}\times\vec{c}\right)}$$

$$\left(\vec{a}\cdot\vec{a}^* = \vec{b}\cdot\vec{b}^* = \vec{c}\cdot\vec{c}^* = 1,\quad \vec{a}\cdot\vec{b}^* = \vec{a}\cdot\vec{c}^* = \vec{b}\cdot\vec{a}^* = \vec{b}\cdot\vec{c}^* = \vec{c}\cdot\vec{a}^* = \vec{c}\cdot\vec{b}^* = 0\right)$$

と表せる。$(h\,k\,l)$面の逆格子ベクトル$\vec{g}^*_{hkl} = h\,\vec{a}^* + k\,\vec{b}^* + l\,\vec{c}^*$ が，$(h\,k\,l)$面に垂直で，長さが$(h\,k\,l)$面間隔d_{hkl}の逆数に等しくなることを証明せよ。