平成２９年度第２次募集

新潟大学大学院自然科学研究科博士前期課程入学者選抜試験問題

一　般　入　試

材料生産システム専攻

機能材料科学コース（物性系）

B１

専門科目（材料科学（物性系））

注意事項

1　この問題冊子は，試験開始の合図があるまで開いてはならない。

2　問題冊子は，表紙を含めて全部で８ページある。

3　解答用紙にも注意事項が記載されているので，その指示に従うこと。
解答は，すべて指定された解答用紙に記入すること。
指定された解答用紙の中に自由に記入してよいが，解答した問題が分かるようにすること。裏面に解答する場合も，その旨，表面に明記すること。

4　受験番号は，各解答用紙の指定された箇所に必ず記入すること。

5　解答時間は，180 分である。

6　下書きは，問題冊子の余白を使用すること。

[I] 量子物理学に関する以下の設問(1)と(2)に答えよ。

(1) 金属表面付近を簡単に表す例として，$x<0$を金属内部，$0\leq x$を金属外部に対応させた以下のような1次元階段型ポテンシャル$V(x)$を考える。

$$V(x)=\begin{cases}0 & (x<0)\\ V_0 & (0\leq x)\end{cases}$$

このポテンシャル中に置かれた質量mの1粒子の状態に関して，以下の問①～⑤に答えよ。ここで，$V_0>0$とし，粒子のエネルギーEはV_0よりも大きい状態を考える。$\hbar=\dfrac{h}{2\pi}$ (hはプランク定数)とする。

① $x<0$におけるシュレーディンガー方程式を書け。

② $x<0$における波動関数$\varphi(x)$は，$k=\dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$とおくと，

$$\varphi(x)=A\exp(ikx)+B\exp(-ikx)$$

と表される。一方，$0\leq x$における波動関数$\psi(x)$は，$k'=\dfrac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$ とおくと，

$$\psi(x)=C\exp(ik'x)+D\exp(-ik'x)$$

で表されること示せ。

③ $x=0$における境界条件を二つ示せ。

④ $D=0$の場合に前問③の境界条件を課すと，$\dfrac{B}{A}=\dfrac{k-k'}{k+k'}$の関係が得られる。$\dfrac{C}{A}=\dfrac{2k}{k+k'}$であることを示せ。

⑤ $x=0$における電子の反射率Rは，反射波$(B\exp(-ikx))$と入射波$(A\exp(ikx))$の流れの密度の比から，$R=\dfrac{(\hbar k/m)|B|^2}{(\hbar k/m)|A|^2}=\left(\dfrac{k-k'}{k+k'}\right)^2$と求めることができる。透過率$T$は$\dfrac{4kk'}{(k+k')^2}$で表されることを示せ。

[次ページに続く]

(2) スピン量子数$s=\frac{1}{2}$の粒子を考える。スピン演算子を$\boldsymbol{s}$，そのz成分をs_zとし，s_zの固有状態を$|\, m_s\rangle$と表すと次の固有値方程式が成り立つ。

$$\boldsymbol{s}^2|\, m_s\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\, m_s\rangle$$

$$s_z|\, m_s\rangle = m_s\hbar|\, m_s\rangle$$

$|\, m_s\rangle$は規格化されているとし，また，$m_s = \pm\frac{1}{2}$である 。以下の問①～③に答えよ。

① $\left|\frac{1}{2}\right\rangle$の状態のとき，$\boldsymbol{s}^2$の期待値を書け。

② 重ね合わせの状態 $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}\right\rangle\right)$のとき，$s_z$の期待値を求めよ。

③ 電子も$s=\frac{1}{2}$の粒子であり，磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}_s = -g\,\dfrac{e}{2m}\,\boldsymbol{s}$をもつ。ここで，$m, -e$はそれぞれ電子の質量および電荷であり，$g=2$である。磁束密度$\boldsymbol{B}$の中に置かれたときのポテンシャルエネルギー$U$は$-\boldsymbol{\mu}_s\cdot\boldsymbol{B}$で表される。電子の状態が$\left|\frac{1}{2}\right\rangle$であるとき，ボーア磁子$\mu_{\mathrm{B}}$を用いて$U$の期待値を求めよ。ただし，$\mu_{\mathrm{B}} = \dfrac{e\hbar}{2m}$ であり，$\boldsymbol{B}$ はz軸に平行であるとする。

[Ⅱ] 角振動数 ω で振動する N 個の独立な調和振動子からなる系がある。各振動子のエネルギー準位は、

$$\epsilon_{\mathrm{n}} = \left(\mathrm{n} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (\mathrm{n} = 0, 1, 2, \cdots)$$

である。ここで，$\hbar = h/2\pi$，h はプランク定数である。系の体積を一定として以下の設問（１）～（９）に答えよ。

（１） １振動子の分配関数 z が，

$$z = \frac{e^{-\hbar\omega/2k_{\mathrm{B}}T}}{1 - e^{-\hbar\omega/k_{\mathrm{B}}T}}$$

となることを示せ。ここで，k_{B} はボルツマン定数，T は温度である。

（２） １振動子のヘルムホルツの自由エネルギー f が，

$$f = \frac{1}{2}\hbar\omega + k_{\mathrm{B}}T\log(1 - e^{-\hbar\omega/k_{\mathrm{B}}T})$$

となることを示せ。

（３）N 個の振動子の自由エネルギー $F = E - TS$ は，$F = Nf$ である。E は内部エネルギー，S はエントロピーである。

$$S = -\frac{dF}{dT}$$

となることを示せ。

（４）エントロピー S が，

$$S = Nk_{\mathrm{B}}\left[\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}\frac{1}{e^{\hbar\omega/k_{\mathrm{B}}T} - 1} - \log(1 - e^{-\hbar\omega/k_{\mathrm{B}}T})\right]$$

となることを示せ。

（５）高温 $k_{\mathrm{B}}T \gg \hbar\omega$ では，

$$S \cong Nk_{\mathrm{B}}\left[\log\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\omega}\right) + 1\right]$$

となることを示せ。

[次ページへ続く]

（６）比熱CがエントロピーSと

$$C = T\frac{dS}{dT}$$

の関係にあることを示せ。

（７）高温では比熱が温度に依存しないことを示せ。

（８）低温$k_{\mathrm{B}}T \ll \hbar\omega$では，

$$S \cong \frac{N\hbar\omega}{T}e^{-\hbar\omega/k_{\mathrm{B}}T}$$

となることを示せ。

（９）前設問（８）の結果から，絶対零度ではエントロピーが０になる。これは，熱力学の何番目の法則か答えよ。

[Ⅲ]　半導体に関する以下の設問（1）と（2）に答えよ。

（1）　導体，半導体，絶縁体の違いについて，以下の問①～③に答えよ。なお，図1，図2及び図3において，許容帯の斜線部分は電子で満たされていることを示し，●及び○はそれぞれ電子及び正孔を示す。

① 図 1 のエネルギー帯図は，導体，半導体，絶縁体のいずれに対応しているかを，理由と共に答えよ。

② 図 2 のエネルギー帯図は，導体，半導体，絶縁体のいずれに対応しているかを，理由と共に答えよ。

③ 図 3 のエネルギー帯図は，導体，半導体，絶縁体のいずれに対応しているかを，理由と共に答えよ。

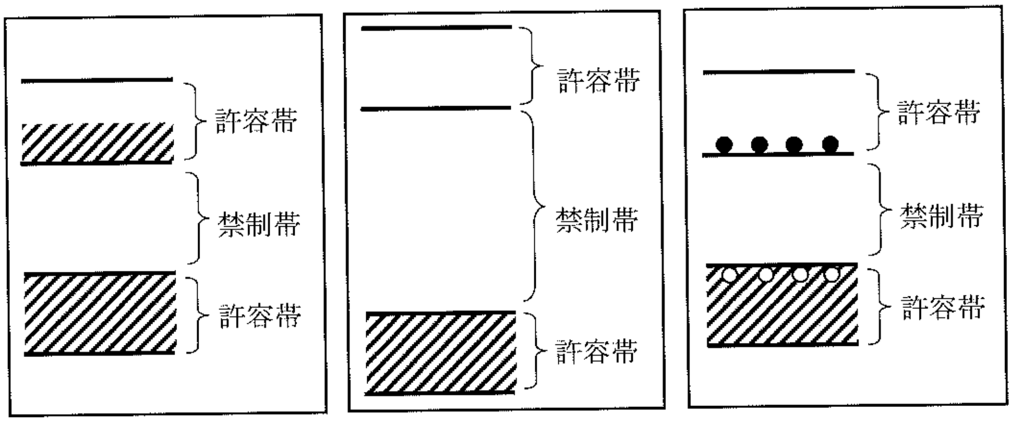

図 1　　図 2　　図 3

（2）　ドナーのみを一様な濃度 N_D で添加した n 形半導体とアクセプタのみを一様な濃度 N_A で添加した p 形半導体から構成される pn 接合において，ドナーとアクセプタが完全にイオン化している場合について，次の問①～⑤に答えよ。

① 熱平衡状態における pn 接合の界面領域において拡散電位が生じる理由を述べよ。

② 熱平衡状態における pn 接合において，p 形中性領域の電子濃度 n_{p0} は $n_{n0}e^{-qV_D/kT}$ に等しい。ここで，n_{n0} は n 形中性領域の電子濃度，q は電子の電荷の大きさ，V_D は拡散電位，k はボルツマン定数，T は温度である。拡散電位 V_D を，ドナー濃度 N_D，アクセプタ濃度 N_A および真性キャリア濃度 n_i を用いた式で表せ。

③ n 形半導体に対して p 形半導体に正の電圧 V （$V>0$）を印加したときのエネルギー帯の概略を，伝導帯下端と価電子帯上端を実線で，フェル

[次ページに続く]

ミ準位を一点鎖線で描くことで示せ。さらに，その描いたエネルギー帯の概略図において，空乏層領域を矢印（↔）を書き加えることによって明示せよ。

④　前問③において，n 形中性領域と p 形中性領域の伝導帯下端のエネルギー差を，印加電圧 V を用いて表せ。また，n 形中性領域と p 形中性領域のフェルミ準位のエネルギー差を，印加電圧 V を用いて表せ。

⑤　前々問③において，p 形側の空乏層端の電子濃度 n_p を，印加電圧 V を用いて表せ。また，p 形中性領域における電子濃度分布について説明せよ。

[IV] 金属について以下の設問（1）～（4）に解答せよ。電子の質量は m，$\hbar = h/(2\pi)$ (hはプランク定数)である。

金属は，絶対零度にある一辺の長さLの立方体とし，伝導電子は自由電子モデルで記述されるものとする。電子1個の定常状態のシュレーディンガー方程式の波動関数は$\Psi(\boldsymbol{r}) = A\exp[i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}]$と書ける。ここに，$\boldsymbol{k}$は電子の波数ベクトル，$\boldsymbol{r}$は電子の位置ベクトル，$A$は正の実数である。電子同士の相互作用を無視すると，この波動関数は2個以上の自由電子の場合にも適用できる。

（1）下線の近似の名称を答えよ。

（2）電子に周期的境界条件を課すと，波数$\boldsymbol{k}$は量子化される。量子化された波数$\boldsymbol{k}$のx成分k_xを求めよ。

（3）すべての電子の波数が$\boldsymbol{k}=0$となれば，全体のエネルギーが最小となるはずであるが，現実にはそうはならない。この理由を簡潔に述べよ。

（4）全電子数Nがアボガドロ数程度の大きさである場合，N個の電子は波数空間においてフェルミ球を構成する。この半径をk_Fとし，フェルミ面における電子のエネルギーをE_Fとする。

① フェルミ球内にある電子の波数$\boldsymbol{k}$を$\boldsymbol{k}=(k_x, k_y, k_z)$とする。この電子の実空間における速度の各成分$v_x, v_y, v_z$を求めよ。

② フェルミ球内の電子のほとんどは実空間で運動しているが，電圧を加えない限り，電流は流れない。この理由を簡潔に述べよ。

③ 通常の金属において，フェルミ・エネルギーE_Fは温度に換算するとどの程度か答えよ。

④ フェルミ・エネルギーE_Fを全電子数Nを用いて求めよ。