

平成31年度第1次募集（平成30年10月入学含む）  
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 解答は、すべて解答用紙の指定された箇所に記入すること。
- 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、120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)~(4)に答えよ。

(1) 水素原子における電子の波動関数 $\psi_{n,l,m}(r)$ を極座標で、

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

と変数分離形で表す。ここで $n, l, m$ はそれぞれ主量子数, 方位量子数, 磁気量子数である。 $R_{n,l}(r), Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ は規格直交条件を満たし, 以下は簡略のため $R_{n,l}, Y_{l,m}$ と表す。以下の問①と②に答えよ。

- ① エネルギーを表す量子数は $n, l, m$ のどれかを答えよ。  
② 軌道角運動量の大きさを表す量子数は $n, l, m$ のどれかを答えよ。

(2) 1s 軌道 ( $n = 1, l = 0$ ) の $R_{1,0}$ は以下の式で表わされる。

$$R_{1,0}(r) = 2 \left( \frac{1}{r_0} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right)$$

動径方向の確率密度 $P_{1,0}(r) = r^2 |R_{1,0}(r)|^2$ は,  $r = r_0$ で極大をもつ。ここで,  $r_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(m_e e^2)$ ,  $-e$ は電子の電荷,  $m_e$ は電子の質量,  $\epsilon_0$ は真空の誘電率,  $\hbar = h/(2\pi)$ とする。 $r_0$ の名称と, その大きさを有効数字一桁で答えよ。

(3) 軌道角運動量の $z$ 成分に対応する演算子 $\hat{L}_z$ に対して,  $Y_{l,m}$ は固有関数であり $\hat{L}_z Y_{l,m} = \hbar m Y_{l,m}$ が成り立つ。今,  $l = 1$ に限定し,  $Y_{l,m}$ の一次結合で表される新たな規格直交関数系 $P_\alpha, P_\beta, P_\gamma$ を考える。ただし,  $P_\gamma = Y_{1,0}$ である。以下の問①~③に答えよ。

①  $P_\alpha, P_\beta, P_\gamma$ に対して以下の関係が成り立つとき, 基底を $P_\alpha, P_\beta, P_\gamma$ の順にとって $\hat{L}_z$ を行列で示せ。

$$\begin{aligned}\hat{L}_z P_\alpha &= -\hbar P_\beta, \\ \hat{L}_z P_\beta &= -\hbar P_\alpha, \\ \hat{L}_z P_\gamma &= 0 P_\gamma.\end{aligned}$$

②  $P_\alpha, P_\beta$ は $\hat{L}_z$ の固有関数ではないため, 前問①で示された行列は対角行列ではない。これを対角化して得られる固有値は $\hbar, -\hbar, 0$ であった。これらの固有値に対する固有関数を求めよ。

③  $P_\alpha = C_1 Y_{1,1} + C_2 Y_{1,-1} + C_3 Y_{1,0}$ ,  $P_\beta = D_1 Y_{1,1} + D_2 Y_{1,-1} + D_3 Y_{1,0}$ とおく。実数の定数 $C_1, C_2, C_3$ および $D_1, D_2, D_3$ を求めよ。

[次ページに続く]

(4) 軌道角運動量による磁気モーメントの $z$ 成分に対応する演算子を  $\hat{\mu}_z = -\frac{e}{2m_e}\hat{L}_z$  とする。ゼロ磁場で3つの状態  $Y_{1,1}$ ,  $Y_{1,-1}$ ,  $Y_{1,0}$  は縮退しているが、 $z$ 軸方向の磁場 $B$ によってエネルギーは $-\hat{\mu}_z B$ だけ変化し、縮退が解ける。以下の問①と②に答えよ。

- ① 磁場中における基底状態を答えよ。
- ② 前問①の基底状態と第一励起状態のエネルギーの差を答えよ。

[ II ] 量子理想気体（相互作用のない同種粒子の集まり）に対して，系の熱力学的性質を調べたい。以下の設問(1)~(3)に答えよ。以下で  $k_B$  はボルツマン定数， $T$  は温度とする。

- (1) ボソンとフェルミオンに対して，1つの量子状態に対する可能な占有数を答えよ。  
 (2) 化学ポテンシャルが  $\mu$  であるとき，前設問(1)の結果を用いてボソンとフェルミオンに対して以下の和を計算せよ。

$$\sum_{n_i} \exp \left[ -\frac{\varepsilon_i - \mu}{k_B T} n_i \right]$$

ここで  $n_i$  と  $\varepsilon_i$  は， $i$ -番目の1粒子量子状態にある粒子の占有数とエネルギーである。ただし，ボソンに対しては常に  $\varepsilon_i > \mu$  であるとする。

- (3) 以降ではフェルミオンの量子理想気体を想定する。

全粒子数  $N$  の系に対する  $i$ -番目の状態のエネルギーを  $E_i(N)$  とすると，大分配関数は以下のように与えられる。

$$\Xi(T, \mu) = \sum_N \sum_l \exp \left[ -\frac{E_l(N) - \mu N}{k_B T} \right]$$

$N$  と  $E_l(N)$  は  $i$ -番目の1粒子状態の占有数  $n_i$  を用いて以下のように与えられる。

$$N = \sum_i n_i, \quad E_l(N) = \sum_i \varepsilon_i n_i$$

以下の問①~⑤に答えよ。

- ① 理想フェルミ気体の大分配関数が  $\Xi(T, \mu) = \prod_i \left[ 1 + e^{-\frac{\varepsilon_i - \mu}{k_B T}} \right]$  になることを示せ。  
 ② 熱力学ポテンシャル  $J(T, \mu)$  を前問①の大分配関数  $\Xi(T, \mu)$  を用いて計算せよ。  
 ③  $i$ -番目の1粒子状態の占有数を  $n_i$  とすると，全系の固有状態は全1粒子状態の占有数の組  $\{n_i\} = (n_1, n_2, \dots)$  によって決定される。温度  $T$ ，化学ポテンシャル  $\mu$  のとき，全系の状態がある占有数の組  $\{n_i\}$  に対応する状態となる確率  $P(\{n_i\})$  を求めよ。  
 ④  $j$ -番目の1粒子状態の粒子数の熱平均値

$$\bar{n}_j = \sum_{\{n_i\}} n_j P(\{n_i\}) = \dots \sum_{n_{j-1}} \sum_{n_j} \sum_{n_{j+1}} \dots [n_j P(\dots, n_{j-1}, n_j, n_{j+1}, \dots)]$$

を計算するとフェルミ分布関数が得られるが，これを計算して示せ。

- ⑤ エントロピーを計算し，それを前問④の結果  $\bar{n}_j$  を用いて書き表せ。

[Ⅲ] 半導体に関する以下の設問 (1) と (2) に答えよ。

(1) 半導体のキャリアに関する以下の問①～④に答えよ。

- ① Si 半導体において適当な 13 族 (Ⅲ族) 元素を不純物として添加したとき、キャリア濃度が増加した。この不純物添加された Si 半導体は n 形半導体と p 形半導体のどちらであるかを述べよ。その理由も説明せよ。
- ② 前問①の Si 半導体において、適当な 15 族 (Ⅴ族) 元素を 13 族 (Ⅲ族) 元素より少ない量と一緒に添加したところ、キャリア濃度が減少した。キャリア濃度が減少した理由を説明せよ。
- ③ 添加不純物の種類や濃度によらずに、高温領域の半導体では、電子濃度と正孔濃度がほぼ等しくなる。その理由を説明せよ。
- ④ 前問③において、電子濃度  $n$  及び正孔濃度  $p$  がそれぞれ  $n = N_c e^{-(E_c - E_F)/kT}$  及び  $p = N_v e^{-(E_F - E_v)/kT}$  で表せるとき、真性キャリア濃度  $n_i$  を  $E_G$ ,  $N_c$  及び  $N_v$  を用いた式で表せ。ここで、 $E_c$  及び  $E_v$  はそれぞれ伝導帯下端及び価電子帯上端のエネルギー、 $E_F$  はフェルミエネルギー、 $E_G$  は禁制帯幅、 $N_c$  及び  $N_v$  はそれぞれ伝導帯及び価電子帯の有効状態密度、 $k$  はボルツマン定数、 $T$  は温度である。

(2) 図 1 は、n 形半導体と金属のエネルギー帯図を示す。これら n 形半導体と金属を接触させた後の熱平衡状態の場合について、以下の問①～⑥に答えよ。なお、金属と n 形半導体のフェルミ準位は  $E_F$ 、n 形半導体の伝導帯下端のエネルギーは  $E_c$ 、n 形半導体の価電子帯上端のエネルギーは  $E_v$  で示す。また、金属の仕事関数  $\phi_m$  と電子親和力  $\chi_m$  は 4.8 eV、n 形半導体の仕事関数  $\phi_s$  は 4.2 eV、n 形半導体の電子親和力  $\chi_s$  は 4.1 eV とする。

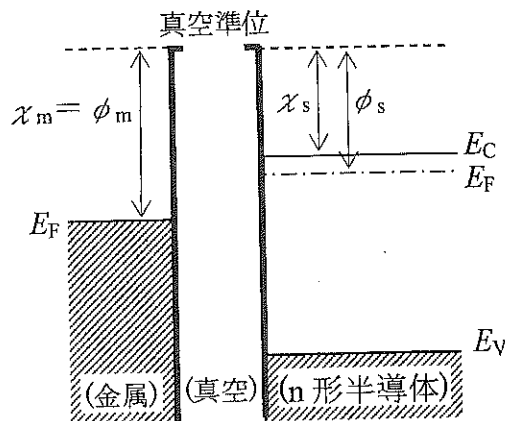


図 1 接触前の金属と n 形半導体のエネルギー帯図

[次ページに続く]

- ① 金属とn形半導体を接触させた後のエネルギー帯図を描け。
- ② n形半導体内に生じる拡散電位  $V_D$  によるエネルギー障壁  $qV_D$  の大きさは何 eV か。ここで  $q(q > 0)$  は電子の電荷の大きさである。
- ③ 金属から n形半導体に向かう電子に対するエネルギー障壁の大きさは何 eV か。
- ④ 界面領域において空乏層が形成される理由を説明せよ。
- ⑤ n形半導体と金属の接触界面に垂直な方向に、n形半導体内部に向かって  $x$  軸をとる。そして、接触界面の空乏層の端を  $x=0$  とし、n形半導体内部の空乏層のもう一方の端を  $x=x_d$  とする。ポアソンの方程式を用いて、 $0 \leq x \leq x_d$  での電界の強さを求めよ。ただし、n形半導体内のドナーはすべてイオン化しており、ドナー濃度および誘電率のそれぞれを  $N_D$  および  $\epsilon$  とする。
- ⑥ この金属 - n形半導体接触の電圧電流特性においては整流性が現れる。順方向バイアスの条件は、n形半導体に対して金属を正にバイアス印加した場合と、負にバイアス印加した場合のどちらに対応しているかを答えよ。また、その理由も説明せよ。

[IV] 固体物性に関する以下の設問(1)と(2)に答えよ。

(1) 結晶学に関する以下の問①～④に答えよ。

① 一般的なブラベ格子を図1に示す。 $a_1, a_2, a_3$ は単位格子の辺の長さ、 $\alpha, \beta, \gamma$ は図に示す角度である。次の3つのブラベ格子(i)～(iii)の結晶系とその英語表記をそれぞれア～オ, カ～コから選び、解答欄に記入せよ。

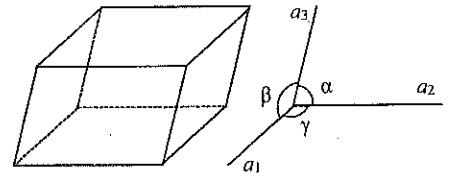


図1

- (i)  $a_1 = a_2 = a_3, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- (ii)  $a_1 = a_2 \neq a_3, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- (iii)  $a_1 = a_2 \neq a_3, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

ア 正方晶	イ 六方晶	ウ 単斜晶	エ 立方晶	オ 斜方晶
カ hexagonal	キ monoclinic	ク cubic	ケ orthorhombic	コ tetragonal

② 図2のように、 $a_1, a_2, a_3$ 軸をそれぞれ $a_1, 2a_2, 3a_3$ で切る面の指数を求めよ。

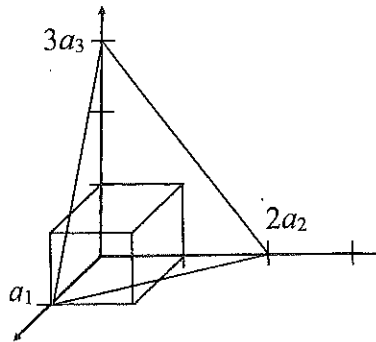


図2

③ 基本並進ベクトル $a_1, a_2, a_3$ を用いて、逆格子の基本並進ベクトル $b_1, b_2, b_3$ を、

$$b_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)}, \quad b_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)}, \quad b_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)}$$

で定義する。 $a_i \cdot b_j = 2\pi \delta_{ij}$  ( $i, j = 1, 2, 3$ ) を使って、面 $(hkl)$ と逆格子ベクトル、

$$G = hb_1 + kb_2 + lb_3$$

が直交することを示せ。ここで、 $\delta_{ij}$ はクロネッカーのデルタ、 $h, k, l$ は整数である。

④ 面 $(hkl)$ の面間隔 $d(hkl)$ は、前問③の逆格子ベクトル $G$ を用いて、

$$d(hkl) = \frac{2\pi}{|G|}$$

と表されることを示せ。

[次ページに続く]

(2) 電磁場中の荷電粒子の運動に関する以下の問①～⑥に答えよ。電場を  $E$ , 磁場を  $B$ , 荷電粒子の質量, 電荷, 速度をそれぞれ  $m, q, v$  とする。

① 荷電粒子には力

$$F = q(E + v \times B)$$

が作用する。この力は \_\_\_\_\_ 力と呼ばれる。下線部に入る適当な語句を答えよ。

② 粒子の衝突に起因する摩擦力を  $\frac{m}{\tau}v$  と表す。この  $\tau$  は \_\_\_\_\_ 時間と呼ばれる。下線部に入る適当な語句を答えよ。

③ 前問②の  $\tau$  を用いて,  $l = v\tau$  で表される  $l$  のことを \_\_\_\_\_ という。ここで,  $v = |v|$  である。下線部に入る適当な語句を答えよ。

④  $B = (0, 0, B)$ ,  $E = (E_x, E_y, E_z)$ ,  $v = (v_x, v_y, v_z)$  のとき, 荷電粒子の運動方程式は,

$$\begin{aligned} m\left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau}\right)v_x &= q(E_x + Bv_y), \\ m\left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau}\right)v_y &= q(E_y - Bv_x), \\ m\left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau}\right)v_z &= qE_z \end{aligned}$$

となる。定常状態では,

$$v_x = \frac{q\tau}{m}E_x + \frac{q\tau}{m}Bv_y, \quad v_y = \frac{q\tau}{m}E_y - \frac{q\tau}{m}Bv_x, \quad v_z = \frac{q\tau}{m}E_z$$

となることを示せ。

⑤  $y$  方向に電流が流れない場合,

$$E_y = \frac{q\tau}{m}BE_x$$

が成り立つことを示せ。

⑥  $x$  方向の電流密度を  $j_x$  とすると,  $y$  方向に  $j_x B$  に比例する電場  $E_y$  が発生する。

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B}$$

によって定義される  $R_H$  は \_\_\_\_\_ 係数と呼ばれる。下線部に入る適当な語句を答えよ。