平成２５年度第１次募集（平成２４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６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]　質量m，角振動数ωの1次元調和振動子のハミルトニアンは，

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

である。新しい演算子，

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{i}{m\omega}p\right), \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{i}{m\omega}p\right)$$

を導入すると，シュレーディンガー方程式は，

$$\hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)u_n = E_n u_n, \quad (n = 0, 1, 2, \cdots)$$

となる。ここで，$\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$であり，hはプランク定数，$i = \sqrt{-1}$である。また，u_nとE_nは固有関数とエネルギー固有値である。以下の設問（1）～（7）に答えよ。

（1）$[x, p] = xp - px = i\hbar$の関係を使って，$[a, a^\dagger] = 1$を示せ。

（2）基底状態に対しては，

$$\hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)u_0 = E_0 u_0$$

が成り立つ。この両辺に左からaを作用させて，

$$\hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)au_0 = \left(E_0 - \hbar\omega\right)au_0$$

を示せ。

（3）前設問（2）の結果から，

$$au_0 = 0$$

でなければならない。理由を述べよ。

（4）aを微分演算子で表すと，前設問（3）の方程式は，

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)u_0(x) = 0$$

となる。$u_0(x) = N_0 \exp\left(-\dfrac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$が，この微分方程式の解であることを示せ。$N_0$は規格化の定数である。

（5）$u_0(x)$の概略を図示せよ。

（6）ガウス積分$\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-x^2)dx = \sqrt{\pi}$を使って，規格化定数$N_0$を求めよ。

（7）位置xの期待値$< x >$を求めよ。ただし，規格化定数をN_0として計算せよ。

［Ⅱ］　1辺がLの立方体に閉じこめられたN_0個の自由電子系がある。周期的な境界条件を課すと，そのエネルギーは

$$\varepsilon_n=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi n}{L}\right)^2,\ n^2=n_x^2+n_y^2+n_z^2,\ n_i=0,\pm1,\pm2,\cdots.(i=x,y,z)$$

で与えられる。ここで，mは電子の質量，$\hbar$はPlanck定数hを2πで割った値である。また，電子のスピン量子数は1/2である。以下の設問（1）～（3）に答えよ。

（1）電子の状態密度$D(\varepsilon)$を求めたい。問①と②に答えよ。

① エネルギーが$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{L}n\right)^2$以下に存在する状態の数$g(n)$を求めよ。$L$ は十分大きくエネルギーは連続で近似できるものとせよ。

② エネルギーがεと$\varepsilon+\mathrm{d}\varepsilon$の幅にいる状態の数は$D(\varepsilon)d\varepsilon$である。$D(\varepsilon)$を求めよ。

（2）有限の温度τにおけるエネルギーεの電子の数$N(\varepsilon)$を求めたい。問③～⑤に答えよ。ただし，τは統計力学的温度である。

③ エネルギーεの電子1個あたりの大分配関数Ξを求めよ。ただし，系の化学ポテンシャルをμとする。

④ 前問③の結果を使って，Fermi-Dirac分布関数$f(\varepsilon)$を求めよ。

⑤ $N(\varepsilon)$を$D(\varepsilon)$，$f(\varepsilon)$で書け。

（3）この電子系のFermiエネルギーが$\varepsilon_F=\frac{\hbar^2}{2m}\left[3\pi^2\left(\frac{N_0}{L^3}\right)\right]^{2/3}$となることを示せ。

［Ⅲ］半導体に関する以下の設問（１）と（２）に答えよ。

（１）真性半導体および不純物半導体に関する以下の問①～⑤に答えよ。

① 真性半導体における伝導帯の電子を，共有結合と関連付けて説明せよ。

② 価電子帯の電子を，共有結合と関連付けて説明せよ。

③ 禁制帯幅を，共有結合と関連付けて説明せよ。

④ Si 半導体において，ドナーとして振舞う不純物の特徴を述べよ。

⑤ シリコン結晶でのドナーのイオン化エネルギーが何 eV かを，ボーアの水素原子模型を用いて求めよ。ただし，ボーアの理論における水素原子のエネルギー準位は，電子の電荷の大きさq，電子の質量m，真空の誘電率ε_0，プランク定数h，主量子数nを用いた次式で表され，$n=1$の基底状態におけるエネルギーの絶対値は約 14eV である。

$$E_n = -\frac{q^4 m}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2}$$

シリコンにおける比誘電率ε_rは 12，電子の有効質量m_eは$0.33m$とする。

（２）階段形の pn 接合に関する以下の問①～⑤に答えよ。

① 熱平衡状態で pn 接合界面領域にキャリアが存在しない空乏層が生じる理由を述べよ。

② 熱平衡状態で空乏層内に電界が生じる理由を述べよ。

③ 接合界面に垂直で，n 形領域から p 形領域への方向を正としてx軸をとる。n 形半導体に対して p 形半導体にバイアス電圧Vを印加したとき，p 形領域の空乏層端（$x = x_p$）での電子電流密度は $j_e(x_p) = -\frac{qD_e}{L_e} n_{p0}\left(e^{qV/kT}-1\right)$で，n 形領域の空乏層の端（$x = x_n$）での正孔電流密度は$j_h(x_n) = -\frac{qD_h}{L_h} p_{n0}\left(e^{qV/kT}-1\right)$で表される。ここで，p 形領域の電子の熱平衡濃度はn_{p0}，n 形領域の正孔の熱平衡濃度はp_{n0}，電子の拡散定数はD_e，正孔の拡散定数はD_h，電子の拡散距離はL_e，正孔の拡散距離はL_h，電子の電荷の大きさはq，ボルツマン定数はkおよび温度はTである。空乏層内では電子と正孔が再結合しないものとして，全電流密度jを

［次ページに続く］

求めよ。なお，j_{e} および j_{h} は x 軸の正方向の流れを正として表すが，j は x 軸の負方向の流れを正として表すものとする。

④　逆方向にバイアス電圧を印加したときの飽和電流密度 j_{s} を，D_{e}，D_{h}，L_{e}，L_{h}，q，N_{A}，N_{D} および n_{i} を用いて表せ。ここで，N_{A}，N_{D} および n_{i} は，それぞれアクセプタ濃度，ドナー濃度および真性キャリア濃度である。ただし，ドナーとアクセプタは完全にイオン化しているものとする。

⑤　逆方向バイアス電圧での飽和電流密度は，禁制帯幅が大きくなると，どのように変化するか。理由と共に述べよ。ただし，イオン化している不純物の濃度，キャリアの拡散定数と拡散距離は変化しないものとする。

[IV] 金属中の電子について，以下の設問（１）と（２）に答えよ。

（１）電子の電荷を$q(<0)$として，電気伝導に関する以下の問①と②に答えよ。

① 金属中の伝導電子の有効質量m^*が，真空中の電子の質量とは異なる原因を１つ挙げ，その原因により重くなるか軽くなるか述べよ。

② 単位体積当たりn個の電子が平均速度vで運動するとき，電流密度の大きさを求めよ。

（２）金属に一様な電場Eを印加する。以下の問③～⑦に答えよ。

③ このとき電子の平均速度vは，時間tに対して，運動方程式$m^*\left(\dfrac{dv}{dt}+\dfrac{v}{\tau}\right)=qE$により記述される。ここで，$\tau$は散乱効果を表す定数である。定常状態での電子の平均速度vを，電場E，m^*，τを用いて表せ。

④ 以上の結果から，抵抗率ρをn，m^*，τを用いて表せ。

⑤ 定常状態にあるこの金属に対して，時刻$t=0$で電場を突然ゼロにした。問③の運動方程式において，$t=0$での電子の平均速度をv_0として，$t>0$での電子の平均速度vの時間変化を求めよ。

⑥ 前問⑤のvの概略をグラフで表せ。

⑦ 不純物や欠陥が少ない金属では，τは大きくなるか，小さくなるか，理由とともに答えよ。