

平成26年度第1次募集（平成25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] 自由な同種粒子2個からなる1次元系を考える。以下の設問(1)~(8)に答えよ。ただし、(1)~(3)はスピンを考慮しなくてよい。

(1)  $i$ 番目の粒子の位置を  $x_i$ , 規格化された  $n$ 番目の波動関数を  $\phi_n(x_i)$  とすると,  $\phi_n(x_i)$  は, シュレーディンガー方程式

$$H_i \phi_n(x_i) = E_n \phi_n(x_i),$$

をみたす。ここで,  $H_i$  は  $i$ 番目の粒子に関する1粒子ハミルトニアン,  $E_n$  は  $n$ 番目のエネルギー固有値である。2粒子系のハミルトニアン  $H$  を  $H_1$  と  $H_2$  を用いて表せ。

(2) 粒子の質量を  $m$ ,  $\hbar = h/2\pi$  とする。  $h$  はプランク定数である。1粒子ハミルトニアン  $H_i$  を  $m$ ,  $x_i$ ,  $\hbar$  を用いて表せ。

(3) 1粒子波動関数の積  $\phi_n(x_1)\phi_l(x_2)$  は, 設問(1)のハミルトニアン  $H$  の固有関数であることを示し, エネルギー固有値を求めよ。

(4)  $i$ 番目のスピンの状態を  $\sigma_i$  とし,  $x_i$  と  $\sigma_i$  をあわせて  $X_i$  とする。同種粒子は区別がつかないことから, 粒子を入れ替えても状態は変わらない。これから2粒子波動関数  $\Psi(X_1, X_2)$  は,

$$\Psi(X_1, X_2) = \Psi(X_2, X_1) \quad \dots (A)$$

になる場合と,

$$\Psi(X_1, X_2) = -\Psi(X_2, X_1) \quad \dots (B)$$

になる場合があることを示せ。

(5) フェルミ粒子の波動関数は, 前設問(4)の(A)と(B)のどちらをみたすか理由とともに答えよ。

(6)  $\Psi(X_1, X_2)$  を軌道部分  $\psi(x_1, x_2)$  とスピン部分  $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$  に分けて変数分離の形,

$$\Psi(X_1, X_2) = \psi(x_1, x_2)\chi(\sigma_1, \sigma_2),$$

で表す。  $\Psi(X_1, X_2) = -\Psi(X_2, X_1)$  かつ  $\chi(\sigma_1, \sigma_2) = \chi(\sigma_2, \sigma_1)$  のとき,  $\psi(x_1, x_2)$  を設問(1)の1粒子波動関数で表せ。

(7) 1粒子のスピン量子数を  $\frac{1}{2}$  とする。  $\chi(\sigma_1, \sigma_2) = \chi(\sigma_2, \sigma_1)$  のとき, 全スピン量子数を答えよ。

(8)  $i$ 番目の粒子のスピンが上向きの状態を  $\alpha_i$ , 下向きの状態を  $\beta_i$  とする。  $\chi(\sigma_1, \sigma_2) = \chi(\sigma_2, \sigma_1)$  を満たす可能な全ての  $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$  を  $\alpha_i$  と  $\beta_i$  を用いて表せ。

[II] 体積  $V$ , 同一粒子  $N$  個からなる理想気体が, 外界との間でエネルギーと粒子の出入りが許され熱平衡状態にある。このときの系の熱力学的諸量を大正準集団の考え方を適用することで求めたい。以下の設問 (1) ~ (3) に答えよ。ただし, 1 粒子の分配関数を  $f$ , 統計力学的温度を  $\tau$ , 粒子の化学ポテンシャルを  $\mu$  とし,  $N$  は十分に大きいものとする。

(1) この系の大分配関数  $\mathcal{E}$  を求めたい。以下の問①と②に答えよ。

① 粒子が区別できないとして,  $N$  粒子系の分配関数  $z$  を  $f$ ,  $N$  を用いて書け。

②  $\mathcal{E} = \exp(\lambda f)$  となることを示せ。ただし,  $\lambda = \exp(\mu/\tau)$  と定義する。

(2)  $\mathcal{E}$  は完全な熱力学関数  $J$  と  $J = -\tau \log \mathcal{E}$  の関係にあることを示したい。以

下の問①~④に答えよ。ただし,  $J$  は, 内部エネルギーを  $E$ , エントロピーを  $\sigma$  とすると,  $J = J(\tau, \mu, V) = E - \tau\sigma - \mu N$  で定義される。

①  $dJ$  を変数  $(\tau, \mu, V)$  の全微分式で書け。ただし, 系の圧力を  $p$  とせよ。

②  $J = -pV$  となることを示せ。

③  $\tau \frac{\partial \log \mathcal{E}}{\partial V} = p$  となることを示せ。

④  $pV = \tau \log \mathcal{E}$  となることを示せ。

(3) 理想気体の 1 粒子の分配関数は,  $f = V \left( \frac{2\pi m\tau}{h^2} \right)^{3/2}$  で与えられる。以下の

問①と②に答えよ。ただし, 粒子の質量を  $m$ , プランク定数を  $h$  とする。

① 粒子数  $N$  を求め,  $\lambda$ ,  $f$  で表せ。

② この系の内部エネルギー  $E$  を求め,  $\lambda$ ,  $f$ ,  $\tau$  で表せ。

[Ⅲ] 半導体に関する以下の設問 (1) と (2) に答えよ。

(1) n形半導体について、以下の問①～④に答えよ。

- ① 半導体であるシリコンにおいて、ドナー不純物として振る舞うことが期待できる元素のすべてを、次の括弧の中から選んで答えよ。また、その理由も述べよ。(B, C, Al, P, Ge, Sb)
- ② ドナー不純物の一部がイオン化している温度領域 (不純物領域と呼ばれる温度領域) において、電子濃度  $n$  およびイオン化したドナー濃度  $N_D^+$  がそれぞれ  $n = N_C e^{-(E_C - E_F)/kT}$  および  $N_D^+ = N_D e^{-(E_F - E_D)/kT}$  で表せるとする。ここで、 $N_C$  は伝導帯の有効状態密度、 $E_C$  は伝導帯下端のエネルギー、 $E_F$  はフェルミ準位のエネルギー、 $E_D$  はドナー準位のエネルギー、 $N_D$  はドナー不純物濃度、 $k$  はボルツマン定数、 $T$  は温度である。不純物領域における  $E_F$  が、 $E_C$ 、 $N_C$ 、 $E_D$ 、 $N_D$ 、 $k$  および  $T$  を用いた式で表されることを示せ。導出過程も記述せよ。
- ③ 前問②の解を用いて、不純物領域における電子濃度  $n$  が  $e^{-(E_C - E_D)/2kT}$  に比例することを導け。導出過程も記述せよ。
- ④ 図1は不純物領域における電子濃度  $n$  の温度依存性を示している。なお、縦軸は電子濃度の対数で、横軸は温度の逆数であることを注意せよ。ドナーのイオン化エネルギーを eV の単位で求めよ。導出過程も記述せよ。ただし、 $N_C$  の温度依存性は無視できるものとし、 $k$  は  $8.6 \times 10^{-5}$  eV/K、 $\log_{10} e$  は 0.43 とする。

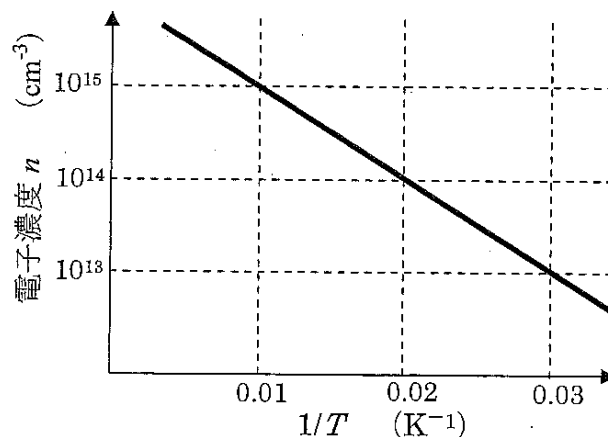


図1. 電子濃度  $n$  の温度依存性

[次ページに続く]

- (2) 図2に、金属とp形半導体の接触前のエネルギー帯図を示す。なお、金属とp形半導体のフェルミ準位は $E_F$ で、金属の仕事関数およびp形半導体の仕事関数はそれぞれ $\phi_m$ および $\phi_s$ で示してある。また、p形半導体の伝導帯下端および価電子帯上端のエネルギーはそれぞれ $E_C$ および $E_V$ で示してある。以下の問①～⑤に答えよ。

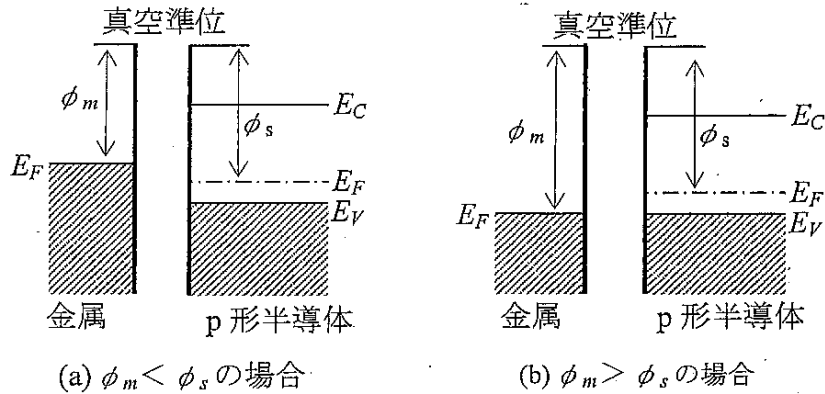


図2. 金属とp形半導体の接触前のエネルギー帯図

- ① 図2(a)に示すエネルギー帯を有する金属とp形半導体を接触させたとき、熱平衡状態でのp形半導体の接触面に近い領域の正孔の濃度は、接触前に比較して、どのように変化するかを、その理由と共に説明せよ。
- ② 図2(a)に示すエネルギー帯を有する金属とp形半導体を接触させたとき、熱平衡状態でのエネルギー帯図を示せ。
- ③ 図2(b)に示すエネルギー帯を有する金属とp形半導体を接触させたとき、熱平衡状態でのp形半導体の接触面に近い領域の正孔の濃度は、接触前に比較して、どのように変化するかを、その理由と共に説明せよ。
- ④ 図2(b)に示すエネルギー帯を有する金属とp形半導体を接触させたとき、熱平衡状態でのエネルギー帯図を示せ。
- ⑤ 金属とp形半導体の接触後において、電圧電流特性でオーム性（オームの法則に従う特性）を示すのは、図2の(a)と(b)のどちらであるかを、その理由と共に答えよ。

[IV] 固体物性に関する以下の設問(1)と(2)に答えよ。ただし、電子の質量を $m$ 、プランク定数を $h$ 、 $\hbar = h/2\pi$ とする。

(1)  $x$ 軸上を運動する一次元電子を考える。以下の問①～④に答えよ。

- ① 波動関数  $\psi(x) = A \exp(ikx)$  は、ポテンシャルが0であるときのシュレーディンガー方程式の解であることを示せ。ここで、 $x$ は座標、 $k$ は波数、 $A$ は定数、 $i = \sqrt{-1}$ である。
- ② エネルギー固有値 $E_k$ を、 $k$ を用いて書け。
- ③ この電子が長さ $L$ の線上に閉じ込められ、周期的境界条件が課されると $k$ は量子化される。このときの $k$ を求めよ。
- ④ 規格化条件より  $A$  を求めよ。

(2) 次に、結晶中での電子の状態を考える。簡単のため、長さが $L$ で $N$ 個の格子点から構成される格子定数 $a$ の一次元格子を想定し、 $k = \pm\pi/a$ におけるエネルギーギャップを考える。電子の電荷を  $q$  とし、以下の問①～③に答えよ。

- ① 波動関数  $\psi_1(x) = A_1 \exp(i\pi x/a)$  と  $\psi_2(x) = A_2 \exp(-i\pi x/a)$  の重ね合わせの状態、

$$\varphi_1(x) = B(\exp(i\pi x/a) + \exp(-i\pi x/a))$$

$$\varphi_2(x) = B(\exp(i\pi x/a) - \exp(-i\pi x/a))$$

を考える。このとき、 $\varphi_1(x)$  と  $\varphi_2(x)$  の状態での電荷密度を座標 $x$ の関数として、それぞれ示せ。ここで、 $A_1$ 、 $A_2$  および  $B$  は規格化定数である。

- ② 弱い周期的ポテンシャル $V(x)$ を、 $U$ を定数として $V(x) = U \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$ と表す

とき、状態 $\varphi(x)$ のエネルギーは  $\int_0^L \varphi^*(x)V(x)\varphi(x)dx$  だけ変化する。この

とき、状態 $\varphi_1(x)$ と状態 $\varphi_2(x)$ の間に生じるエネルギーギャップの大きさが $|U|$ となることを示せ。ここで、 $\varphi^*(x)$ は $\varphi(x)$ の複素共役である。

- ③ エネルギーギャップとフェルミ準位の観点から金属と絶縁体の違いを説明せよ。