

平成26年度第2次募集（平成26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] 量子物理学に関する以下の設問 (1) と (2) に答えよ。

(1) 演算子  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  に対して, 交換子  $[\hat{A}, \hat{B}]$  を

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

と定義する。以下の問 ① と ② に答えよ。

① 2つの演算子  $\hat{A}$  と  $\hat{B}$  に対して,

$$[\hat{A}^2, \hat{B}] = \hat{A}[\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{A}$$

が成り立つことを示せ。

② 4つの演算子  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$ ,  $\hat{C}$ ,  $\hat{D}$  に対して,

$$[\hat{A} + \hat{B} + \hat{C}, \hat{D}] = [\hat{A}, \hat{D}] + [\hat{B}, \hat{D}] + [\hat{C}, \hat{D}]$$

が成り立つことを示せ。

(2) スピン演算子を  $\hat{s} = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z)$  として以下の問 ① ~ ⑥ に答えよ。ただし, スピン量子数  $s$  を  $\frac{1}{2}$  とする。

① 各成分  $\hat{s}_x$ ,  $\hat{s}_y$ ,  $\hat{s}_z$  は次の関係式,

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hbar\hat{s}_z, \quad [\hat{s}_y, \hat{s}_z] = i\hbar\hat{s}_x, \quad [\hat{s}_z, \hat{s}_x] = i\hbar\hat{s}_y$$

を満たす。これらの関係式をベクトル積を使って1つの式で表せ。

② 設問 (1) の関係を使って,  $[\hat{s}^2, \hat{s}_z] = 0$  を示せ。

③  $\hat{s}_z$  の規格化された直交する2つの固有状態を  $|+\frac{1}{2}\rangle$ ,  $|-\frac{1}{2}\rangle$  とすると, 固有値方程式,

$$\hat{s}_z|\pm\frac{1}{2}\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\frac{1}{2}\rangle \quad (\text{複号同順})$$

が成り立つ。前問 ② の交換関係を使って  $|\pm\frac{1}{2}\rangle$  が  $\hat{s}^2$  の固有状態でもあることを示せ。

④  $|+\frac{1}{2}\rangle$  と  $|-\frac{1}{2}\rangle$  を基底として,  $\hat{s}_z$  を行列で表せ。

⑤ 2つの固有状態の重ね合わせの状態,

$$|\theta\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|+\frac{1}{2}\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|-\frac{1}{2}\rangle$$

をつくる。 $|\theta\rangle$  が規格化されていることを示せ。

⑥  $|\theta\rangle$  の状態での  $\hat{s}_z$  の期待値を求めよ。

〔Ⅱ〕 絶対温度  $T$  における結晶の原子空孔濃度を求めたい。問題を以下のように単純化する。原子空孔は、格子点にある原子が格子間位置に入ることによって生成され、1つの空孔が生成されるのに必要なエネルギーは格子点によらず同じ値  $\varepsilon (>0)$  とする。完全結晶の格子点すなわち原子の数を  $N$ 、格子間位置の数を  $M$  とし、いずれも十分大きな数とする。格子点から  $n$  個の原子がランダムに抜け、それらの原子のすべてが格子間位置をランダムに占有する。熱力学的なエントロピーを  $S$ 、ボルツマン定数を  $k$  とし、以下の設問 (1) ~ (6) に答えよ。ただし、1つの格子間位置に入ることのできる原子は1個までとする。

- (1)  $N$  個の格子点にある原子から  $n$  個の原子がランダムに抜ける場合の数  $f(N, n)$  を示せ。
- (2)  $n$  個の原子が  $M$  個の格子間位置にランダムに分布することから、 $n$  個の空孔が生じる時の状態の数  $g(N, M, n)$  を求めよ。
- (3)  $m \gg 1$  のときのスターリングの公式  $\log m! \approx m \log m - m$  を用いて、この系のエントロピー  $S$  を  $n$ 、 $N$ 、 $M$ 、 $N - n$ 、 $M - n$  の関数として求めよ。
- (4) この系のヘルムホルツの自由エネルギー  $F$  を求めよ。
- (5)  $M = N$  の場合、温度  $T$  での空孔の数が  $n = \frac{N}{e^{\varepsilon/2kT} + 1}$  となることを示せ。
- (6)  $M \neq N$  の場合の空孔の数  $n$  を求めよ。ただし、 $n \ll N, M$  とする。

[Ⅲ] 半導体に関する以下の設問 (1) と (2) に答えよ。

(1) 図 1(a), (b) および (c) のそれぞれに状態密度  $N(E)$ , 電子に関するフェルミ・ディラック分布関数  $f_{Fe}(E)$  および電子分布  $n(E)$  を横軸とし, 電子のエネルギー  $E$  を縦軸とした様子を示す。ここで,  $E_C$  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,  $E_V$  は価電子帯上端のエネルギーである。以下の問①~⑤に答えよ。

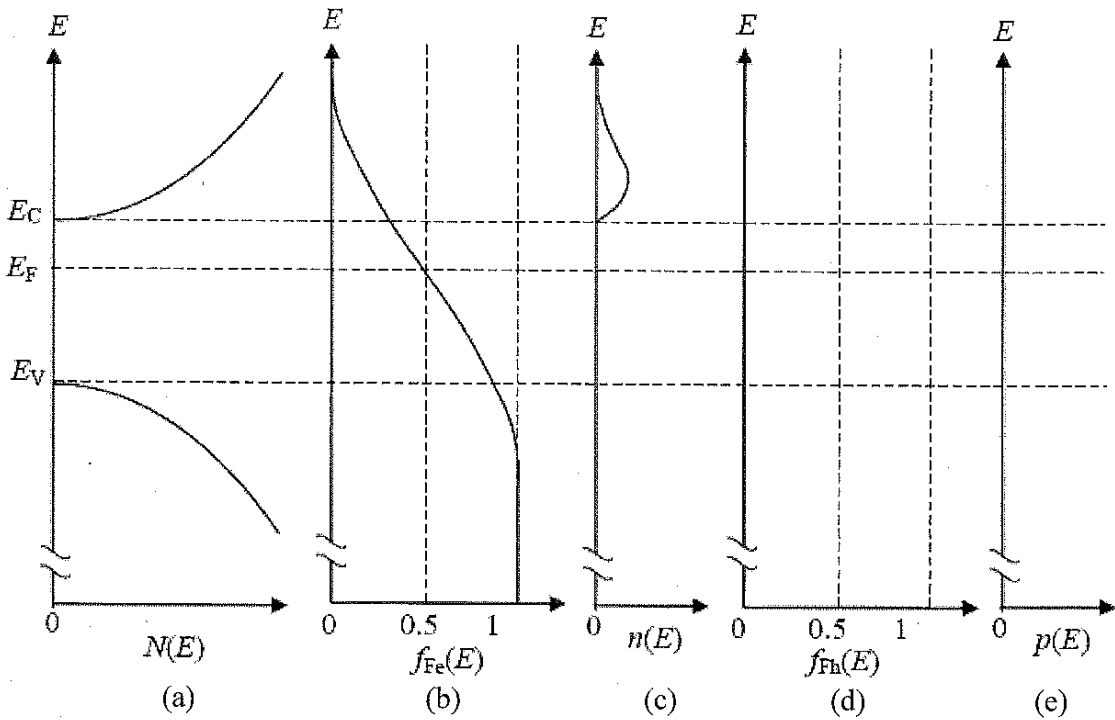


図 1. 電子のエネルギー  $E$  に対する (a) 状態密度  $N(E)$ , (b) 電子のフェルミ・ディラック分布関数  $f_{Fe}(E)$ , (c) 電子分布  $n(E)$ , (d) 正孔のフェルミ・ディラック分布関数  $f_{Fh}(E)$ , (e) 正孔分布  $p(E)$

① ボルツマン定数および絶対温度をそれぞれ  $k$  および  $T$  とするとき, 電子

に関するフェルミ・ディラック分布関数は  $f_{Fe}(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/kT}}$  と表せる。

図 1(b) の伝導帯内では  $E - E_F \gg kT$  に対応しているとみなせることから,  $f_{Fe}(E)$  は電子に関するマクスウェル・ボルツマン分布関数  $f_{Me}(E)$  で近似できる。この  $f_{Me}(E)$  を  $E$ ,  $E_F$ ,  $k$  および  $T$  を用いた式で示せ。

② 伝導帯の状態密度  $N(E)$  が  $\frac{4\pi}{h^3} (2m_e^*)^{3/2} (E - E_C)^{1/2}$ , 伝導帯の電子濃度  $n$  が

[次ページに続く]

[Ⅲ]の続き

$\int_{E_c}^{\infty} f_{Fe}(E)N(E)dE$  と表せるとき、 $n = 2 \left( \frac{2\pi m_e^* kT}{h^2} \right)^{3/2} e^{-(E_c - E_F)/kT}$  の関係式を導

け。ここで  $(E - E_c)/kT = x$  と置くと  $\int_0^{\infty} x^{3/2} e^{-x} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$  を用いることができる。

$h$  および  $m_e^*$  はそれぞれプランク定数および電子の有効質量である。

- ③ エネルギー  $E$  の状態において正孔が占有する割合を示すフェルミ・ディラック分布関数  $f_{Fh}(E)$  を、 $E$ 、 $E_F$ 、 $k$  および  $T$  を用いた式で表せ。また、その  $f_{Fh}(E)$  の様子を解答用紙の図 1(d) に描け。
  - ④ 正孔分布  $p(E)$  の様子を解答用紙の図 1(e) に描け。
  - ⑤ この半導体は  $n$  形と  $p$  形のどちらであるかを答えよ。また、その理由も説明せよ。
- (2) ドナーのみを添加した  $n$  形半導体とアクセプタのみを添加した  $p$  形半導体から成る  $pn$  接合について、次の問①～④に答えよ。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。
- ① 熱平衡状態、順バイアス状態および逆バイアス状態の 3 つの場合における  $pn$  接合のエネルギー帯の概略をそれぞれ図示せよ。なお、伝導帯下端と価電子帯上端を実線(—)で、フェルミ準位を一点鎖線(---)で示せ。
  - ② 熱平衡状態における  $p$  形中性領域および  $n$  形中性領域の電子濃度はそれぞれ  $n_{p0} = N_c e^{-(E_{cp} - E_{Fp})/kT}$  および  $n_{n0} = N_c e^{-(E_{cn} - E_{Fn})/kT}$  と表せる。これらの式から、 $pn$  接合の拡散電位  $V_D$  を、 $n_{p0}$  および  $n_{n0}$  を用いた式で表せ。ここで、 $N_c$  は伝導帯の有効状態密度、 $E_{cp}$  および  $E_{cn}$  はそれぞれ  $p$  形および  $n$  形の伝導帯下端のエネルギー、 $E_{Fp}$  および  $E_{Fn}$  はそれぞれ  $p$  形および  $n$  形のフェルミ準位のエネルギーである。導出過程も記述せよ。
  - ③  $pn$  接合の電圧電流特性が整流性を有することを、電子の運動に基づいて「拡散電位」という語句を用いて説明せよ。
  - ④  $pn$  接合において逆バイアスを大きくしていくと、ある電圧で電流が急増する降伏現象が生じる。この降伏現象の機構について説明せよ。

[IV] 結晶格子に関する以下の設問(1)~(7)に答えよ。

- (1) 3次元の格子は7種類の結晶系に分類される。それらの名称を答えよ。
- (2) 格子定数 $a$ の体心立方格子を考える。単位格子あたりの格子点の数および基本単位格子の体積を書け。
- (3) 格子定数 $a$ の体心立方格子における基本並進ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ を直交軸方向の単位ベクトル $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}$ を用いて書け。
- (4) 次に格子定数 $a$ の単純立方格子を考える。この格子の基本並進ベクトルを $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ とすると、逆格子の基本並進ベクトル $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ は以下のように定義される。

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}, \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}$$

逆格子ベクトル $\mathbf{G} = v_1 \mathbf{b}_1 + v_2 \mathbf{b}_2 + v_3 \mathbf{b}_3$ を $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}$ を用いて示せ。ここで $v_1, v_2, v_3$ は整数である。

- (5) 格子定数 $a$ の単純立方格子における第1ブリルアンゾーンを図示し、その体積を示せ。
- (6) 座標 $\mathbf{r}$ における電子密度 $n(\mathbf{r})$ をフーリエ級数

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} n_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$$

と表す。入射波および散乱波の波動ベクトルをそれぞれ $\mathbf{k}, \mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}$ として、結晶におけるX線弾性散乱を考える。ある逆格子ベクトル $\mathbf{G}$ に対する散乱振幅 $F_{\mathbf{G}}$ は以下の式で示される。

$$F_{\mathbf{G}} = \int n_{\mathbf{G}} \exp[i(\mathbf{G} - \Delta\mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}] dV$$

X線の散乱が観測される必要条件を示せ。ここで $dV$ は結晶の微小体積、 $i = \sqrt{-1}$ である。

- (7) 前設問(6)の条件での散乱振幅は構造因子、

$$S_{\mathbf{G}} = \sum_j f_j \exp[-i2\pi(w_1 x_j + w_2 y_j + w_3 z_j)]$$

に比例する。ここで $w_1, w_2, w_3$ は整数である。X線散乱が観測される $w_1, w_2, w_3$ についての条件を単純立方格子および体心立方格子のそれぞれに対して示せ。ここで、 $j$ は単位構造の原子に関する番号であり、 $f_j$ は原子形状因子、 $0 \leq x_j, y_j, z_j < 1$ は原子の座標を表す。