平成２７年度第１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７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］　平面波の重ね合わせと不確定性関係に関する以下の設問（１）～（８）に答えよ。必要であれば，積分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} xe^{-x^2}dx = 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^2e^{-x^2}dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

を使用せよ。

（１）１次元自由粒子の波動関数は，波数を k として平面波 $\phi_k(x) = e^{ikx}$ と表される。$\phi_k(x)$ が運動量が確定値をとる状態であることを示し，確定値を求めよ。

（２）次に波数の異なる平面波を重ね合わせた状態を $\Psi(x)$ として，

$$\Psi(x) = A\int_{-\infty}^{\infty} g(k)e^{ikx}dk, \qquad (1-1)$$

$$g(k) = \exp\left[-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2\right] \qquad (1-2)$$

を考える。ここで，$A, a(>0), k_0$ は定数である。積分を実行すると

$$\Psi(x) = A\sqrt{\frac{2\pi}{a^2}}\exp\left[-\frac{x^2}{2a^2}+ik_0x\right] \qquad (1-3)$$

となる。規格化定数 A が $A = \sqrt{\dfrac{a}{2\pi\sqrt{\pi}}}$ となることを示せ。

（３）式（１－２）の $g(k)$ の概形を図示せよ。

（４）式（１－３）の $\Psi(x)$ に対して，運動量の期待値 $\langle p\rangle$ が，$\langle p\rangle = \hbar k_0$ となることを計算によって示せ。

（５）前設問（４）において，$\langle p\rangle = \hbar k_0$ となる理由を式（１－１）と（１－２）の意味と設問（３）の $g(k)$ の概形に基づいて説明せよ。

（６）$|\Psi(x)| = \sqrt{\dfrac{1}{a\sqrt{\pi}}}\exp\left[-\dfrac{x^2}{2a^2}\right]$ の大まかな広がり Δx は，実空間で粒子が存在する確率が高い領域を表す。Δx は，x^2 の期待値 $\langle x^2\rangle$ を用いて $\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle}$ で定義される。$\Delta x = a/\sqrt{2}$ となることを示せ。

（７）前設問（６）の $|\Psi(x)|$ と Δx の対応関係との類推から，$g(k)$ の k 空間での大まかな広がり Δk を求めよ。

（８）設問（６）と（７）から得られる $\Delta x\Delta p$ を不確定性関係 $\Delta x\Delta p \geq \hbar/2$ と比較して，状態 $\Psi(x)$ はどのような状態であるか答えよ。

［Ⅱ］N個の同一粒子からなる系がある。各粒子は独立で，各々のエネルギーが 0 と $\varepsilon_0(>0)$ の２つの状態をとる。系の体積 v は温度 T によらず一定とする。系の全エネルギーを E，エントロピーを S，$dE=TdS$ とし，以下の設問（１）と（２）に答えよ。ただし，ボルツマン定数を k とし，$\beta\equiv 1/kT$ とする。

（１）分配関数 z と熱力学的な諸量の間に成り立つ一般的な関係について，以下の問①～③に答えよ。ここで，系の取り得るエネルギー準位を ε_ℓ とすると，$z=\sum_\ell \exp(-\beta\varepsilon_\ell)$ で与えられる。

①$E=\langle\varepsilon_\ell\rangle$ とするとき，E を $\log z$ と β で表せ。ここで，$\langle\ \rangle$ はアンサンブル平均を意味する。

②自由エネルギー F を $F=E-TS$ とすると，$dF=-SdT$ となることを示せ。

③$F=-kT\log z$ となることを示せ。

（２）この系の一粒子の分配関数を z_1 とし，以下の問①～⑤に答えよ。

①z_1 を $\beta\varepsilon_0$ の関数として表せ。

②N 粒子系の分配関数を z_1 と N の関数として表せ。

③この系の比熱 C_V を N,ε_0,β の関数として求めよ。

④$kT\ll\varepsilon_0$ のとき，$C_\mathrm{V}(T)\approx Nk\left(\dfrac{\varepsilon_0}{kT}\right)^2\exp\left(-\dfrac{\varepsilon_0}{kT}\right)$ となることを示せ。

⑤$kT\gg\varepsilon_0$ のとき，C_V を T の関数として表せ。

［Ⅲ］半導体に関する以下の設問（1）と（2）に答えよ。

（1）　長さ L，幅 W，厚さ D の直方体の n 形半導体において，長さ方向に電圧 V が印加され，電流 I が流れている。ただし，電流は一様な密度で流れていて，正孔濃度は無視できるとする。以下の問①～⑤に答えよ。

① n 形半導体の導電率 σ を，電流 I および印加電圧 V を用いた式で表せ。

② n 形半導体中の電子の速度 v を，印加電圧 V を用いた式で表せ。ただし，電子の移動度を μ とする。

③ 厚さ方向に磁束密度 B を印加した。このときの電子にはたらくローレンツ力の大きさを求めよ。ただし，電子の電荷の大きさを q とする。

④ 前問③で十分な時間が経過したとき，電流と磁束密度に垂直な向きにホール電圧 V_H が発生する。電子濃度 n が $n=\dfrac{IB}{DqV_H}$ と表せることを導け。

⑤ 移動度 μ を，ホール電圧 V_H と導電率 σ を用いた式で表せ。

（2）　p 形半導体を用いた金属(M)-絶縁体(I)-半導体(S)構造で，半導体と金属の間に電圧 V_G を印加する。電圧 V_G は半導体に対して金属が正となる場合を $V_G>0$ とする。図 1 は V_G がゼロのときの熱平衡状態でのエネルギー帯図である。ここで，ϕ_M 及び ϕ_S はそれぞれ金属及び半導体の仕事関数で，$\phi_M=\phi_S$ である。E_{FM} 及び E_{FS} はそれぞれ金属及び半導体のフェルミ準位，E_C 及び E_V はそれぞれ半導体の伝導帯下端及び価電子帯上端のエネルギー，E_I は禁制帯の中央の $(E_C+E_V)/2$ のエネルギー，ϕ_B は E_I と E_{FS} の差である。また，図 2～4 の上段は異なるゲート電圧 V_G を印加したときのエネルギー帯図を示し，それらの下段は x 軸を接合界面に垂直な方向にとって，絶縁体と半導体の接合界面を $x=0$ としたときの電荷密度 ρ の分布の様子に対応している。ただし，V_S は半導体内部に対する半導体表面の電位であり，それに相当するエネルギーの大きさが $q|V_S|$ で表されている。ここで q は電子の電荷の大きさ $(q>0)$ である。また，-○-は中性のアクセプタ，-●-はイオン化したアクセプタ，●は電子，○は正孔を表している。以下の問①～④に答えよ。

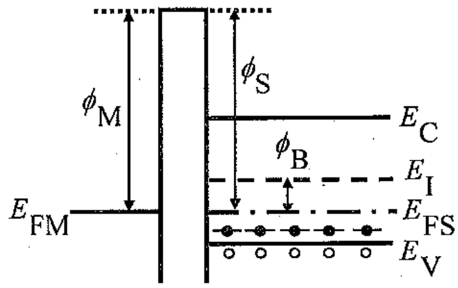

図 1 金属(M)-絶縁体(I)-半導体(S)構造における $V_G=0$ での熱平衡状態のエネルギー帯図。

［次ページに続く］

[問題［Ⅲ］の続き]

① 図2の上段は $V_G<0$ でのエネルギー帯図を示す。金属の絶縁体界面付近には負の電荷が分布している。半導体で正孔が過剰に分布している領域($0<x<x_a$)における ρ の様子を，解答用紙の図aに描け。また，この領域は何層と呼ばれるかを答えよ。

② 図3の上段は $V_G>0$ で，V_G が小さい場合（$q|V_S|<|\phi_B|$）でのエネルギー帯図を示す。金属の絶縁体界面付近には正の電荷が分布している。半導体で正孔が分布していない領域($0<x<x_d$)における ρ の様子を解答用紙の図bに描け。また，この領域は何層と呼ばれるかを答えよ。

③ 図4の上段は $V_G>0$ で，V_G が大きい場合（$|\phi_B|<q|V_S|<2|\phi_B|$）でのエネルギー帯図を示す。金属の絶縁体界面付近には正の電荷が分布しており，その量は前問②の場合よりも大きい。半導体で正孔が分布していない領域($0<x<x_{dm}$)における ρ の様子を解答用紙の図cに描け。また，電子の分布領域($0<x<x_i$)は何層と呼ばれるかを答えよ。

④ 図4の半導体の絶縁体界面付近領域($0<x<x_i$)において，電子濃度が正孔濃度より多い領域が形成される理由を「フェルミ準位」という言葉を用いて説明せよ。

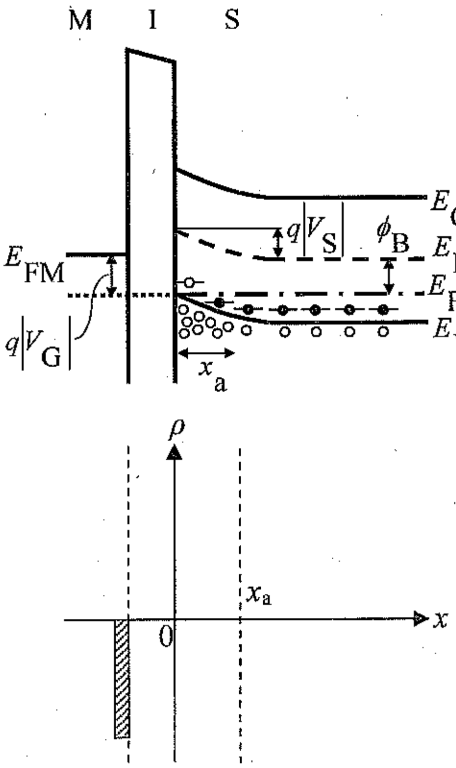

図2 $V_G<0$ でのエネルギー帯図と電荷分布の様子。

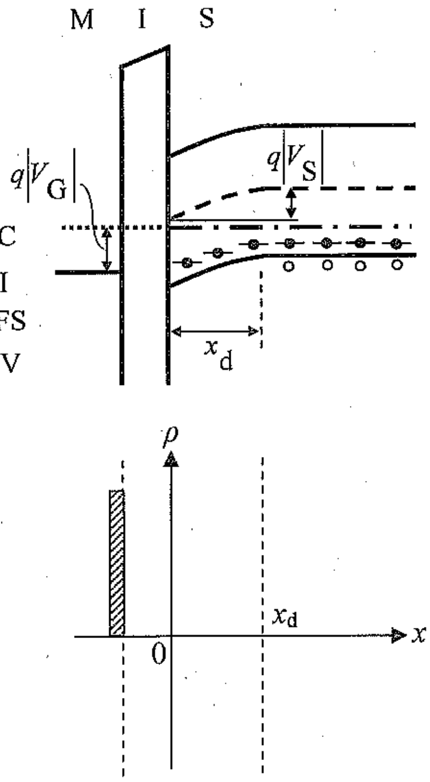

図3 $V_G>0$ で，V_G が小さい場合（$q|V_S|<|\phi_B|$）でのエネルギー帯図と電荷分布の様子。

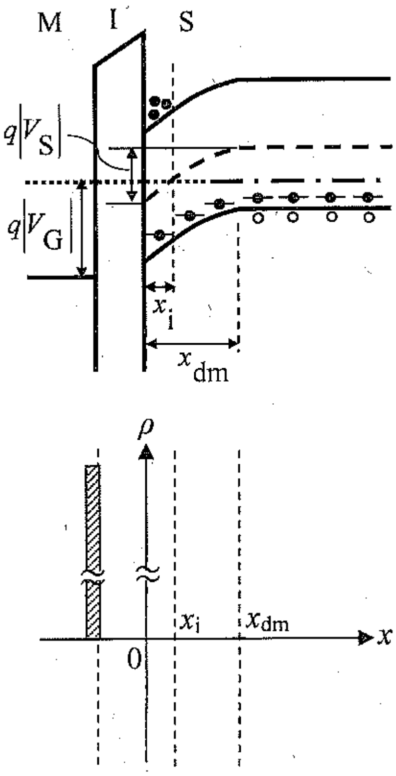

図4 $V_G>0$ で，V_G が大きい場合（$|\phi_B|<q|V_S|<2|\phi_B|$）でのエネルギー帯図と電荷分布の様子。

[IV] 同一原子からなる結晶の格子振動を簡単化し，質量 m の原子が一直線状に並んだ1次元鎖の振動に関して考える。以下の設問（1）～（3）に答えよ。

（1）まず，各原子が独立に振動を行うと仮定する。一つの原子に着目し，平衡点を座標原点 $x=0$，平衡点の周りのポテンシャルを $U(x)$ とする。平衡点からの原子の変位が小さいとき，ポテンシャルは α を定数として $U(x) \sim U(0) + \frac{1}{2}\alpha x^2$ と展開することができる。以下の問①と②に答えよ。

① 古典力学に基づいて，原子の運動方程式を求めよ。

② 原子の振動数を求めよ。

（2）次に，より現実的なモデルとして，隣り合う原子間の相互作用による連成振動について考える。このとき，格子振動は波動として結晶全体を伝わるようになる。それを以下のように定式化する。まず，格子定数を a とすれば，l 番目の原子の平衡点（格子点）の座標は $R_l = la$ となる。さらに，図1のように，l 番目の原子が平衡点から x_l だけ微小変位しているとする。このとき，波数 q，角振動数 ω の格子振動に対応する原子変位を

$$x_l = A\cos(qR_l - \omega t) + B\sin(qR_l - \omega t)$$

と表わすことができる。ただし，t は時間，A，B は時間によらない定数とする。以下の問①～④に答えよ。

① 波数 q を格子振動の波長 λ で表せ。

② 同時刻において，隣接する原子変位の位相差を答えよ。

③ 原子変位 x_l は波数 q の周期関数である。周期を求めよ。

④ 角振動数は波数 q に依存し，$q=0$ で $\omega(q)=0$ となる。その理由を，$q=0$ での原子変位の特徴と関連づけて説明せよ。

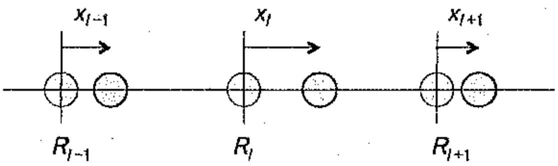

図1

[次ページに続く]

[問題 [IV] の続き]

（3）低温での格子振動による比熱について考える。量子力学によれば，格子振動は量子化され，フォノンの集団と見なすことができる。波数 q のフォノン1個のエネルギーを $\epsilon(q)$ とする。絶対温度を T，ボルツマン定数を k，プランク定数を $\hbar$ として以下の問①〜③に答えよ。

① 低温で熱励起されるフォノンの大多数は，条件 $\epsilon(q) < kT$ を満たす領域に存在する。この条件を，角振動数が $\omega(q) = c|q|$ と近似できることを用いて，波数 q が満たすべき条件に書き換えよ。ただし c は q によらない定数である。

② 前問①の条件において，上限の波数を q_{m} とする。波数 q の励起フォノンの数 $n(q)$ は，$|q| > q_{\mathrm{m}}$ に対して $n(q) = 0$，$|q| < q_{\mathrm{m}}$ に対して $n(q) = kT/\epsilon(q)$ と近似できる。低温での全エネルギーが T^2 に比例することを示せ。

③ フォノンによる低温比熱は T の何乗に比例するか答えよ。