平成２９年度第１次募集（平成２８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] 量子物理学に関する以下の設問(1)と(2)に答えよ。

(1) 以下のような深さが無限の一次元井戸型ポテンシャル$V(x)$に束縛された質量mの1粒子について，以下の問①〜⑤に答えよ。$\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$ (hはプランク定数)とする。

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x > \dfrac{a}{2} \\ 0 & -\dfrac{a}{2} \le x \le \dfrac{a}{2} \\ \infty & x < -\dfrac{a}{2} \end{cases}$$

① $-\dfrac{a}{2} \le x \le \dfrac{a}{2}$におけるシュレーディンガー方程式を書け。

② $A\sin kx + B\cos kx$は前問①のシュレーディンガー方程式の固有関数であることを示せ。ここで，$k = \dfrac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}$ (E_nはエネルギー固有値)，AおよびBは任意の定数である。

③ $x = \dfrac{a}{2}$，$-\dfrac{a}{2}$ における境界条件を課すと，エネルギー固有値E_nは $\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2$ であることを示せ。ただし，$n = 1,2,3\cdots$とする。

④ 問①のシュレーディンガー方程式の固有関数は；nが奇数のときは偶関数，nが偶数のときは奇関数となることを示せ。

⑤ 規格化条件より問②のAとBを求めよ。

(2) 前設問(1)のポテンシャルの中に$2N$個の相互作用のない同種粒子が入っている場合を考える。ここでNは十分に大きな自然数とする。以下の問①〜③に答えよ。

① この粒子がボゾンである場合，基底状態のエネルギーは$\dfrac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}N$であることを説明せよ。

② この粒子がフェルミオンである場合，フェルミエネルギーを求めよ。

③ 前問②の粒子の場合の基底状態のエネルギーを求めよ。

[II] N 個の独立な粒子からなる系がある。各々の粒子は $\pm\epsilon_0$ ($\epsilon_0 > 0$) の 2 つのエネルギー状態をとるものとする。$+\epsilon_0$，$-\epsilon_0$ のエネルギー状態をとる粒子数をそれぞれ N_+，N_- とする。以下の設問（1）～（9）に答えよ。

（1）全エネルギー E を，ϵ_0，N_+，N_- を用いて表せ。

（2）全エネルギーを $E = M\epsilon_0$，全粒子数 N を $N = N_+ + N_-$ とする。N_+ と N_- を M と N で表せ。

（3）全エネルギー E をもつ微視的状態の数 W を求めよ。

（4）ボルツマンの関係式とスターリングの公式を使って，エントロピーが，

$$S \simeq -k\left\{N_- \log\frac{N_-}{N} + N_+ \log\frac{N_+}{N}\right\}$$

となることを示せ。ここで，k はボルツマン定数であり，スターリングの公式は，$x \gg 1$ に対して，

$$\log x! \simeq x\log x - x$$

である。

（5）温度 T を $\dfrac{1}{T} = \dfrac{\partial S}{\partial E}$ によって定義する。

$$\frac{1}{T} = \frac{k}{2\epsilon_0}\log\frac{N-M}{N+M}$$

となることを示せ。

（6）熱・統計物理学的な平衡状態では，$E < 0$ であることを示せ。

（7）設問（5）の結果を使って，$\dfrac{N_-}{N_+} = \exp\left(\dfrac{2\epsilon_0}{kT}\right)$ となることを示せ。

（8）平衡状態では全エネルギーが，

$$E = -N\epsilon_0 \tanh\left(\frac{\epsilon_0}{kT}\right)$$

となることを示せ。

（9）比熱 C が，

$$C = Nk\left(\frac{\epsilon_0}{kT}\right)^2 \frac{1}{\cosh^2\left(\dfrac{\epsilon_0}{kT}\right)}$$

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）　図1は，不純物を添加していないシリコン(Si)結晶における価電子の共有結合の低温の様子を示す。以下の問①～④に答えよ。

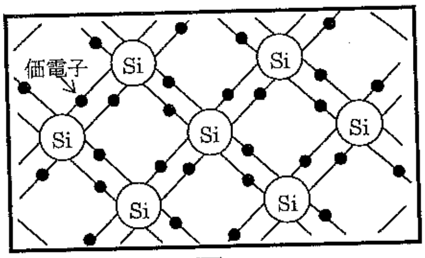

図1

① 図1を参照し，Ⅲ族（13族）のホウ素（B）がシリコンを置換して添加されたp形シリコン結晶の低温での結合の様子を，解答用紙の図(a)の2次元的な結晶モデルに書き加えよ。ホウ素はイオン化していないものとする。

② 前問①の半導体において，ホウ素が半分よりやや多い割合でイオン化している場合におけるエネルギー帯図を描け。ただし，価電子帯上端のエネルギーE_Vと伝導帯下端のエネルギーE_Cを実線（———），フェルミ準位E_Fを一点鎖線（-·-·-·-），ホウ素不純物のアクセプタエネルギー準位E_Bを点線（-----）で示せ。

③ 問①の半導体において，正孔濃度が一定となる温度範囲が存在する。その理由を説明せよ。また，そのような温度範囲の名称を答えよ。

④ 前問③の正孔濃度が温度変化に対して一定となる場合において，正孔濃度と電子濃度のそれぞれの値を答えよ。なお，ホウ素濃度はN_B，真性キャリヤ濃度はn_iとする。

（2）　図2に，仕事関数ϕ_mの金属と，仕事関数ϕ_s，電子親和力χ_sおよび禁制帯幅E_Gのp形半導体を接触させた後の熱平衡状態下でのエネルギー帯図を示す。なお，E_Fはフェルミ準位，E_CおよびE_Vのそれぞれは半導体の伝導帯下端および価電子帯上端のエネルギーである。以下の問①～⑥に答えよ。

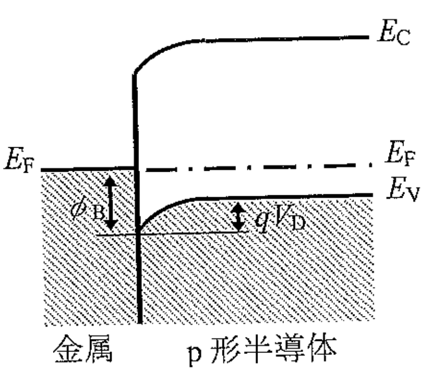

図2

① 図2の中で縦方向矢印により示されているϕ_BおよびqV_Dの大きさのそれぞれを，ϕ_mを含む式で表せ。ここで，qは電子の電荷の大きさ，V_Dは拡散電位である。

② p形半導体と金属の接触界面に垂直な方向に，p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

［次ページに続く］

端を $x=0$, p 形半導体内部の空乏層のもう一方の端を $x=x_\mathrm{d}$, 電位を $\Phi(x)$, 電界の強さを $E(x)$ とする。また，p 形半導体内のアクセプタはすべてイオン化しており，アクセプタ濃度および誘電率のそれぞれを N_A および ε とする。ポアソンの方程式から，空乏層 $0 \leq x \leq x_\mathrm{d}$ において

$E(x) = -\dfrac{qN_A}{\varepsilon}(x - x_d)$ であることを導け。

③ $0 \leq x \leq x_\mathrm{d}$ での電位 $\Phi(x)$ を求めよ。ただし，$x=x_\mathrm{d}$ での電位である $\Phi(x_\mathrm{d})$ の値を，Φ_p とする。

④ バイアス電圧を印加していない熱平衡状態において，拡散電位である V_D は，$V_D = \dfrac{qN_A}{2\varepsilon}{x_d}^2$ と表せる。ここで，逆バイアス電圧 V （$V<0$）を印加する。このときの空乏層幅 x_d を，V を含む式で示せ。

⑤ 前問④の解より単位面積当りの接合容量 C を導出せよ。

⑥ 前問⑤の単位面積当りの接合容量 C の逆バイアス電圧に対する変化から，アクセプタ濃度 N_A と拡散電位 V_D が求められることを説明せよ。

[IV] 金属中の伝導電子に関する以下の設問（1）～（3）に解答せよ。

金属は，一辺の長さLの立方体で，電子の質量はm，$\hbar=h/(2\pi)$ (hはプランク定数)とする。電子系は絶対零度にあるものとする。

まず，伝導電子は自由電子モデルで記述されるものとする。

（1）金属中の1個の伝導電子には「力が働かない」と考えて，この電子の定常状態のシュレーディンガー方程式を考える。

① 電子が「力を受けない」ことをどのように数式で表現するかを述べ，この式を書け。必要な物理量は各自で定義し，明記せよ。

このシュレーディンガー方程式を解くと，波動関数は$\Psi(\boldsymbol{r})=A\exp[i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}]$と書ける。ここに，$\boldsymbol{k}$は電子の波数ベクトル，$\boldsymbol{r}$は電子の位置ベクトル，$A$は正の実数である。

② 電子の状態を記述する二つの量子数を答えよ。

③ 電子に周期的境界条件を課すと，$\boldsymbol{k}$は量子化される。周期的境界条件を$\Psi(\boldsymbol{r})$を用いた数式を用いて説明し，$\boldsymbol{k}$を求めよ。

（2）1個の電子に対する以上の結果を，全電子数がN個の自由電子からなる系にも適用するために，独立電子近似を導入する。Nがアボガドロ数程度の大きさである場合，N個の自由電子は波数空間においてフェルミ球を構成する。この半径をk_Fと書く。

① フェルミ球面上のある電子の波数ベクトルが$(0, k_F, 0)$で与えられるとき，この電子の実空間における速度の各成分v_x, v_y, v_zを答えよ。

② 波動関数についての規格化条件を用いて，Aを求めよ。

③ 電子数密度N/L^3を，k_Fを用いて表せ。途中の過程も簡潔に示すこと。

[次ページに続く]

（3）つぎに，結晶格子によって散乱される可能性を考慮する。簡単のため，結晶は１次元で一定間隔aの格子とし，欠陥や格子振動を無視できるとする。

波長が$2a$となる伝導電子の定在波は二つ存在し，各々のエネルギーは異なる二つの値E^+とE^-を持つ（ただし，$E^+>E^-$）。E^+およびE^-の値をとる定在波をそれぞれ図示せよ。