令和４年度第１次募集（令和３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　選　抜

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９ページある。

3　解答は，すべて解答用紙の指定された箇所に記入すること。

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，１２０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）物理量に対応する演算子に関する以下の問①～③に答えよ

① 物理量の測定値は実数であり，任意の状態に対応する固有値は実数である。したがって物理量に対応する演算子は(　　　　　　　)演算子である。括弧の中に入る適切な語句を書け。

② 物理量Qに対応する演算子を$\hat{Q}$とする。その固有状態を$|\psi_1\rangle$と$|\psi_2\rangle$, 固有値をそれぞれq_1とq_2であるとする。ただし $q_1 \neq q_2$である。このとき，$|\psi_1\rangle$と$|\psi_2\rangle$が直交することを示せ。

③ 物理量Pに対応する演算子を$\hat{P}$とする。前問②の$\hat{Q}$との交換関係が,

$$\left[\hat{P}, \hat{Q}\right] = 0,$$

であるとき，$\hat{P}$と$\hat{Q}$に対して同時に固有状態となる状態が存在することを示せ。

（２）球対称ポテンシャル$V(r)$の中の電子に関する以下の問①～⑥に答えよ。ここで, rは位置ベクトル$\boldsymbol{r}$の大きさである。

① 電子の質量m_e, 波動関数$u(\boldsymbol{r})$, エネルギー固有値Eおよび$V(r)$を用いてシュレーディンガー方程式を書け。

② 極座標で表した波動関数を変数分離の形で$u(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi)$と表す。ここで, n, l, mはそれぞれ主量子数, 方位量子数, 磁気量子数を表す。$n=3$であるときに, lのとり得る値を書け。

③ $n=1$, $l=0$に対応する軌道は 1s 軌道と呼ばれている。$n=4$, $l=3$に対しては何軌道と呼ばれるかを書け。

[次ページに続く]

④ $l=1$であるときの$Y_{1,m}(\theta,\varphi)$は，軌道角運動量演算子$\widehat{\boldsymbol{L}}$およびそのz成分$\hat{L}_z$に対して以下の関係，

$$\widehat{\boldsymbol{L}}^2 Y_{1,m}(\theta,\varphi) = 2\hbar^2 Y_{1,m}(\theta,\varphi),$$

$$\hat{L}_z Y_{1,m}(\theta,\varphi) = m\hbar Y_{1,m}(\theta,\varphi),$$

が成り立つ。ここで，$m=-1,0,1$である。$Y_{1,1}(\theta,\varphi)$，$Y_{1,0}(\theta,\varphi)$，$Y_{1,-1}(\theta,\varphi)$を基底とし$\widehat{\boldsymbol{L}}^2$を行列で表せ。ここで，$\hbar = h/(2\pi)$であり，$h$はプランク定数である。

⑤ $\widehat{\boldsymbol{L}}$のx，yおよびz成分に対応する行列はそれぞれ，

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2i}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{L}_z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

である。$\hat{L}_x$と$\hat{L}_z$の交換関係$[\hat{L}_x, \hat{L}_z]$を求め，$\hat{L}_y$を用いて示せ。

⑥ $Y_{1,1}(\theta,\varphi)$，$Y_{1,0}(\theta,\varphi)$，$Y_{1,-1}(\theta,\varphi)$は$\hat{L}_x$の固有関数ではない。$\hat{L}_x$の固有関数は，

$$\Psi_a(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\Big(Y_{1,1}(\theta,\varphi) - \sqrt{2}Y_{1,0}(\theta,\varphi) + Y_{1,-1}(\theta,\varphi)\Big),$$

$$\Psi_b(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\Big(Y_{1,1}(\theta,\varphi) + \sqrt{2}Y_{1,0}(\theta,\varphi) + Y_{1,-1}(\theta,\varphi)\Big),$$

$$\Psi_c(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(Y_{1,1}(\theta,\varphi) - Y_{1,-1}(\theta,\varphi)\Big),$$

である。それぞれの固有関数の固有値を求めよ。

[II] N 個の独立な粒子からなる系がある。各々の粒子は，$E_0 = 0$ と $E_1 = k_B\Delta > 0$ のエネルギー状態しかとり得ないとする。E_0 の状態は縮退がなく，E_1 の状態は 2 重縮退しているものとする。k_B はボルツマン定数である。温度，エントロピーおよび体積をそれぞれ T，S，V として以下の設問（１）〜（10）に答えよ。

（１）ボルツマンの原理から $T \gg \Delta$ におけるエントロピーの値を求めよ。

（２）ボルツマンの原理から $T \ll \Delta$ におけるエントロピーの値を求めよ。

（３）この系の分配関数 Z を求めよ。

（４）前設問（３）を使って，ヘルムホルツの自由エネルギー F を求めよ。

（５）熱力学関係式

$$\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = -S$$

が成り立つことを示せ。

（６）設問（４）と（５）を使って，エントロピー S を求めよ。

（７）前設問（６）の結果から，$T \to \infty$ のときのエントロピーの値を求めよ。

（８）設問（６）の結果から，$T \to 0$ のときのエントロピーの値を求めよ。

（９）設問（６）あるいは設問（１）と（２）からエントロピーの温度変化を表すグラフの概略を図示せよ。縦軸を S，横軸を T とする。

（10）前設問（９）の結果から定積比熱 C_V の温度変化を表すグラフの概略を図示し、そのようなグラフになる理由を述べよ。縦軸を C_V，横軸を T とする。

［Ⅲ］半導体に関する以下の設問（１）と（２）に答えよ。

（１）　長さ L, 厚さ D, 幅 W の直方体の p 形半導体において，長さ方向に電圧を印加した。このとき，p 形半導体の中を電流が一様な密度で流れているものとする。次の問①～⑤に答えよ。

①　長さ方向の電圧を V, 正孔濃度を p, 電子の移動度を μ, 正孔の電荷を q として，電流密度の大きさ j を V を含む式で表せ。

②　磁束密度 B を p 形半導体の厚さ方向にかけたとき，正孔にはたらくローレンツ力の大きさを求めよ。

③　前問②において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発生するホール電圧V_{H}が，次式で表せることを示せ。ただし，I は p 形半導体に流れる電流である。

$$V_{\mathrm{H}} = \frac{IB}{Dqp}$$

④　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。

⑤　直方体の半導体試料が，p 形半導体ではなく，n 形半導体である場合，ホール電圧V_{H}においてどのような変化が生じるかを，理由と共に説明せよ。

（２）　図 1 に示す金属(M)-絶縁体(I)-p 形半導体(S)構造において，p 形半導体の電極（半導体とオーム接触（Ohmic contact）している）を接地し，金属に電圧V_{G}をかけるものとする。なお，金属に正の電圧をかけるとき，$V_{\mathrm{G}} > 0$とする。図 2 は $V_{\mathrm{G}}=0$ のときの MIS 構造における熱平衡状態でのエネルギー帯図である。p 形半導体にはアクセプタ不純物のみが添加されていて，すべてイオン化しているものとする。ϕ_{M}及びϕ_{S}はそれぞれ金属及び p 形半導体の仕事関数で，$\phi_{\mathrm{M}} = \phi_{\mathrm{S}}$である。$E_{\mathrm{FM}}$及び$E_{\mathrm{FS}}$はそれぞれ金属及び p 形半導体のフェルミ準位，$E_{\mathrm{C}}$及び$E_{\mathrm{V}}$はそ

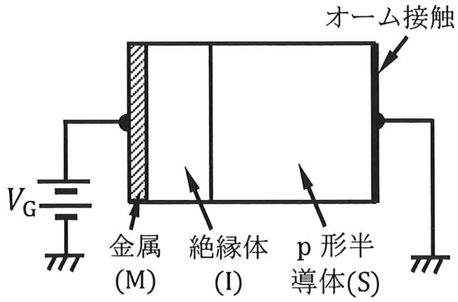

図 1 金属(M)-絶縁体(I)-p 形半導体(S)構造の概略図

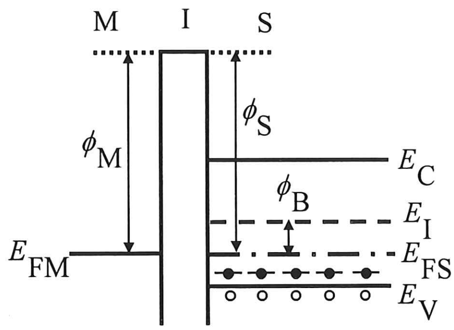

図 2　金属(M)-絶縁体(I)-p 形半導体(S)構造における$V_{\mathrm{G}} = 0$での熱平衡状態のエネルギー帯図

［次ページに続く］

れぞれ p 形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 3〜5 の上段は異なるゲート電圧V_Gを印加して十分な時間が経過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 p 形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 p 形半導体内部に対する p 形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。

① 図 3 の上段は$V_G<0$における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。p 形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。

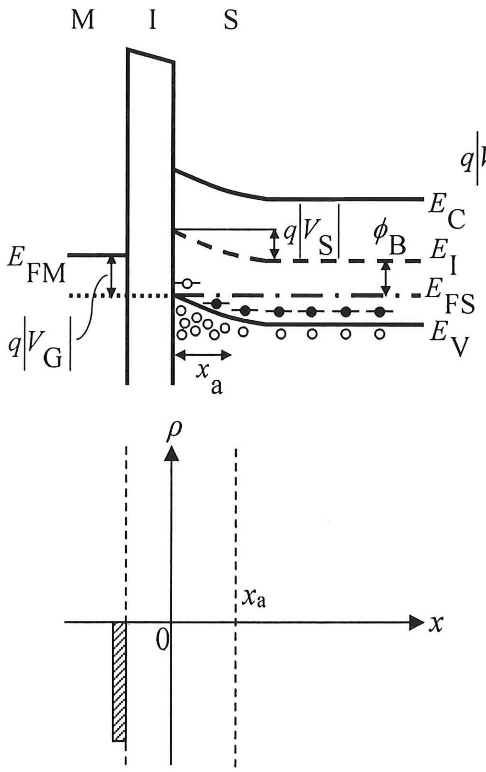

図 3 $V_G<0$でのエネルギー帯図と電荷分布の様子

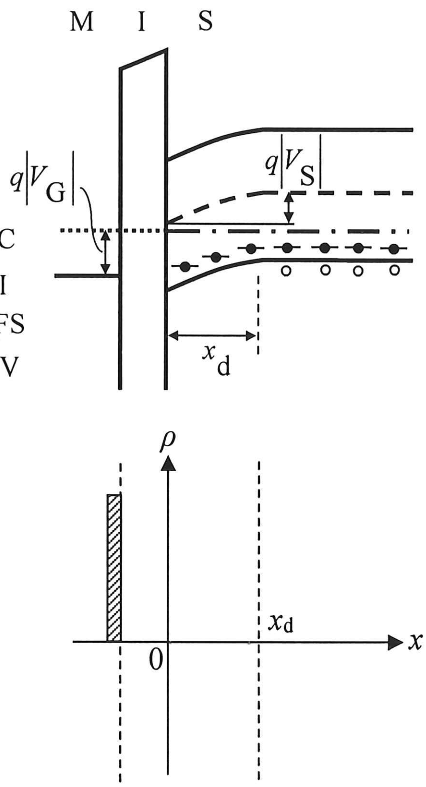

図 4 $V_G>0$で，V_Gが小さい場合（$q|V_S|<|\phi_B|$）のエネルギー帯図と電荷分布の様子

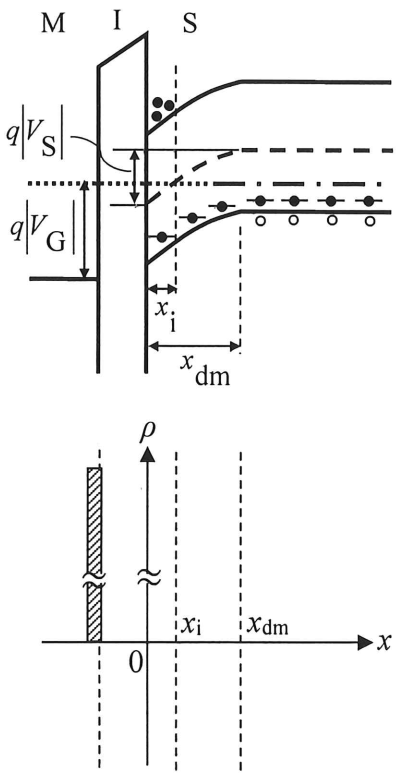

図 5 $V_G>0$で，V_Gが大きい場合$(|\phi_B|<q|V_S|<2|\phi_B|)$のエネルギー帯図と電荷分布の様子

［次ページに続く］

② 図 4 の上段は，$V_{\mathrm{G}} > 0$で，V_{G}が小さい場合（$q|V_{\mathrm{S}}| < |\phi_{\mathrm{B}}|$）における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。p 形半導体で正孔が分布していない領域($0 < x < x_{\mathrm{d}}$)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 5 の上段は，$V_{\mathrm{G}} > 0$で，V_{G}が大きい場合（$|\phi_{\mathrm{B}}| < q|V_{\mathrm{S}}| < 2|\phi_{\mathrm{B}}|$）における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。p 形半導体で正孔が分布していない領域($0 < x < x_{\mathrm{dm}}$)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($0 < x < x_{\mathrm{i}}$)は何層と呼ばれるかを答えよ。

④ 図 5 の p 形半導体の絶縁体界面付近領域($0 < x < x_{\mathrm{i}}$)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。

［IV］固体物性に関する以下の設問 (1) と (2) に答えよ。

(1) 原子間隔 a の原子の 2 次元三角格子（正三角形で敷き詰められた空間で，正三角形の各角に原子が配置されている）を図 1 のように考える。$\boldsymbol{e}_x$ と $\boldsymbol{e}_y$ を直交する x 方向と y 方向の単位ベクトルとしたとき，以下の問① ～③に答えよ。

① 基本並進ベクトル $\boldsymbol{a}_i$（$i = 1, 2$）を a と $\boldsymbol{e}_x$ と $\boldsymbol{e}_y$ を用いて表せ。

② 単位胞に含まれる原子の数を答えよ。

③ 逆格子基本ベクトル $\boldsymbol{b}_i$（$i = 1, 2$）を求めよ。

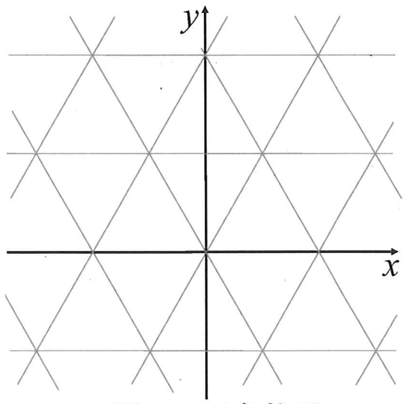

図 1　三角格子

(2) x-軸に沿った 1 次元空間を質量 m の電子が運動しているとする。以下の問①～⑦に答えよ。

① 電子が自由に運動しているとき，電子のシュレーディンガー方程式を書け。ただし，固有エネルギーは ε，波動関数は $\psi(x)$ とする。

② 前問①の固有エネルギーと固有関数 (一般解) を求めよ。

以下では，問②の固有関数については波数 k の平面波 1 成分のみを考える。

③ 長さ L の周期的境界条件の下では波数 k は離散的な値を取り良い量子数となるが，この系に対して離散的な k の値を求めよ。

④ 前問③で考えた長さ L の 1 次元系において，格子間隔 a の格子点を導入し $L = Na$ とする。ただし，N は格子点の数であり，この格子点はこの段階ではポテンシャルを生じないものとする。このとき，波数空間における第 1 ブリルアン・ゾーン (すなわち k の範囲) を答えよ。

⑤ 問②で得られた電子のエネルギー ε_k の k-依存性を還元ゾーン形式で解答用紙の図 2 に描き，このときの電子の良い量子数を答えよ。

［次ページに続く］

⑥ 固有関数 $\psi_k(x)$ と $\psi_{k-K}(x)$ のエネルギーをそれぞれ ε_k と ε_{k-K} とし，これら2つの状態で周期的ポテンシャル $V(x)$ を挟んで得られる行列要素が $\langle k|V(x)|k-K\rangle = \langle k-K|V(x)|k\rangle = \tilde{V}$ を満たすとき，電子の固有エネルギーと固有関数は $V(x)$ の導入により変更される。このときの固有エネルギー E を求めよ。ここで，K は逆格子ベクトルである。

⑦ 問⑤では，ある波数 k とある逆格子ベクトル K において，エネルギー ε_k と ε_{k-K} が $\varepsilon_k = \varepsilon_{k-K}$ を満たす。各格子点に同種のイオンを置き，系に周期的ポテンシャル $V(x)$ を導入することにより何が起こるか説明せよ。