平成２８年度第１次募集（平成２７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）以下の問①と②に答えよ。ただし，プランク定数 $h = 6.6 \times 10^{-34}$ J・s，光速 $c = 3.0 \times 10^{8}$m/s とする。

① 波長が 1Å の光子の運動量を求めよ。

② 波長が 1Å の光子のエネルギーを求めよ。

（２）非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ に対して固有状態が２つあり，次のシュレーディンガー方程式が成り立つとする。

$$\hat{H}_0|\phi_1\rangle = \epsilon_1|\phi_1\rangle \quad , \qquad \hat{H}_0|\phi_2\rangle = \epsilon_2|\phi_2\rangle$$

ここで，$|\phi_1\rangle$ と $|\phi_2\rangle$ は規格化された固有関数，ϵ_1 と ϵ_2 はエネルギー固有値である。摂動項を $\hat{V}$，全ハミルトニアンを $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ とする。以下の問①～⑥に答えよ。

① $\epsilon_1 \neq \epsilon_2$ のとき，$\langle\phi_1|\phi_2\rangle = 0$ となることを示せ。

② $|\phi_1\rangle$ と $|\phi_2\rangle$ を基底として，非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ を２行２列の行列で表せ。

③ $\hat{H}$ の固有関数を $|\psi\rangle = a|\phi_1\rangle + b|\phi_2\rangle$ とする。$|\psi\rangle$ が規格化されているとき，a と b の間に成り立つ関係式を求めよ。

④ 前問③の $|\psi\rangle$ に対して，シュレーディンガー方程式 $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ が成り立つ。E はエネルギー固有値である。$H_{ij} = \langle\phi_i|\hat{H}|\phi_j\rangle$, $V_{ij} = \langle\phi_i|\hat{V}|\phi_j\rangle = V_{ji}^*$ とおくと，

$$H_{11}a + V_{12}b = Ea$$

が成り立つことを示せ。ここで，$*$ は複素共役を意味する。

[次ページへ続く]

⑤ 前問 ④ と同様にして，$V_{21}a + H_{22}b = Eb$ が成り立つので，

$$\begin{pmatrix} H_{11} & V_{12} \\ V_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

と表される。$a = b = 0$ 以外の解をもつ条件から，

$$E = E_{\pm} = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4|V_{12}|^2} \quad \text{（複号同順）}$$

となることを示せ。

⑥ $V_{11} = V_{22} = 0$，$|\epsilon_1 - \epsilon_2| \gg |V_{12}|$ のとき，

$$E_+ \approx \epsilon_1 + \frac{|V_{12}|^2}{\epsilon_1 - \epsilon_2}$$

となることを示せ。

[II] 熱・統計物理学に関する以下の設問（1）と（2）に答えよ。

（1）ある物理系のミクロな状態が$1 \sim k$までの整数で番号付けされるとし，それぞれのエネルギーを$E_1 \sim E_k$とする。この系が温度Tの熱平衡状態にあるとき，以下の問①〜⑤に答えよ。ただし，ボルツマン定数をk_Bとし，逆温度を$\beta = (k_\mathrm{B}T)^{-1}$とする。

① 分配関数Zを，βを用いて書け。

② あるn番目の状態が実現する確率を，βを用いて書け。

③ エネルギーの平均値が，分配関数Zを用いて

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z$$

で与えられることを証明せよ。ただし log は自然対数とする。

④ エネルギーの平均値$\langle E \rangle$とエネルギーの二乗平均$\langle E^2 \rangle$を用いて，$\sigma = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}$とおく。$\sigma$がエネルギーの揺らぎを表すことを説明せよ。

⑤ この系の比熱が，エネルギーの揺らぎを用いて，$C = k_\mathrm{B}\beta^2\sigma^2$と表せることを示せ。

（2）N個の原子からなる物質が磁場中に置かれ，温度Tの熱平衡状態にある。各原子は$\uparrow$と$\downarrow$の2つのスピン状態をとることができ，磁場の大きさHに対して，それぞれのエネルギーは$\epsilon_\uparrow = -\mu H$と$\epsilon_\downarrow = \mu H$である。ただし，磁気モーメントの大きさを$\mu$，ボルツマン定数を$k_\mathrm{B}$，逆温度を$\beta = (k_\mathrm{B}T)^{-1}$とする。以下の問①〜⑤に答えよ。

① 原子1個当りの分配関数Z_1を，βを用いて書け。

② 原子N個の分配関数Z_Nを，Z_1を用いて表せ。理由も書くこと。

③ エネルギーの平均値$\langle E \rangle$を計算せよ。

④ 前問③における$\langle E \rangle$について，Hを一定として，横軸Tに対するグラフの概形を描け。

⑤ $\uparrow$および$\downarrow$状態をもつ原子数の平均値をそれぞれ$N_\uparrow$および$N_\downarrow$とおけば，磁化の大きさは$M = \mu(N_\uparrow - N_\downarrow)$と与えられる。$M$を$H$の関数として求めよ。

［Ⅲ］半導体に関する以下の設問（1）～（3）に答えよ。

（1）半導体は，ドナーまたはアクセプタの不純物添加の有無に関わらず，低温では導電性が低く，高温では導電性が高い。その理由を述べよ。

（2）半導体における電子の運動に関して，電子の電荷を $-q$（ただし $q>0$）として，以下の問①～④に答えよ。

① 電子濃度 n が一様な半導体中において，ある方向を x 軸とし，その x 軸の正方向に電界 E を加えた。ここで $E>0$ とする。このとき，電子の移動度を μ_e として，電子による電流密度 j_e の大きさと向きを答えよ。

② 電子濃度 n が x 軸方向に対して不均一で，$\dfrac{dn}{dx}>0$ である。このとき，電子の拡散定数を D_e として，電子による電流密度 j_e の大きさと向きを答えよ。ただし $E=0$ である。

③ p 形半導体において，電子濃度 n_p が平衡状態での電子濃度 n_{p0} よりやや増加した場合について考える。ただし，その増加分は正孔濃度よりずっと小さいものとする。このとき，単位時間に発生する電子濃度を G_e，単位時間に消滅する電子濃度を $\dfrac{n_p-n_{p0}}{\tau_e}$ として，$\dfrac{\partial n_p}{\partial t}$ を G_e 及び τ_e を用いた式で表せ。ここで，G_e は電子の発生率，τ_e は電子の寿命とみなせる。

④ 前問③の p 形半導体の微小領域において，$\dfrac{\partial E}{\partial x}\neq 0$ および $\dfrac{\partial n_p}{\partial x}\neq 0$ であるとする。このとき，その微小領域での $\dfrac{\partial n_p}{\partial t}$ を，発生率 G_e，寿命 τ_e，移動度 μ_e，電界 E および拡散定数 D_e を用いた式で示せ。

（3）pnp 形トランジスタにおいて，通常動作のバイアス電圧条件となるように直流電源を接続したベース接地回路の概略を図 1 に示す。なお，⊣||⊢ は ⊣|⊢ よりも大きな電圧を出力する直流電源である。以下の問①～③に答えよ。

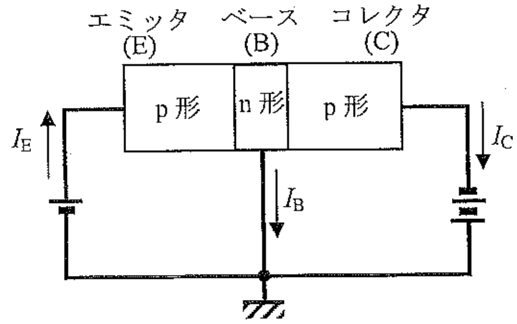

図 1. pnp 形トランジスタのベース接地回路の概略図

［次ページに続く］

① 図2は，バイアス電圧を印加していないpnp形トランジスタの熱平衡状態でのエネルギー帯図で，エミッターベース間およびコレクターベース間のエネルギー障壁はそれぞれqV_{D1}およびqV_{D2}である。ここで，V_{D1}（$V_{D1}>0$）およびV_{D2}（$V_{D2}>0$）はそれぞれエミッターベース間およびコレクターベース間の拡散電位で，q（$q>0$）は電子の電荷の大きさである。また，実線は伝導帯下端E_Cと価電子帯上端E_Vを表し，一点鎖線はフェルミ準位E_Fを表す。図1のバイアス電圧条件におけるエミッターベース間電圧およびコレクターベース間電圧をそれぞれV_{EB}（$V_{EB}>0$）およびV_{CB}（$V_{CB}<0$）とするとき，エミッターベース間およびコレクターベース間のエネルギー障壁のそれぞれの大きさを答えよ。

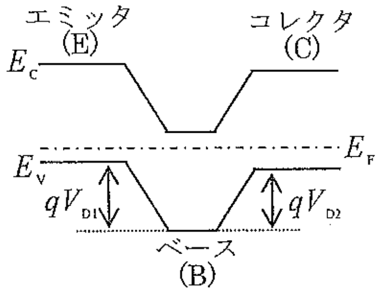

図2. 無バイアス条件でのpnp形トランジスタのバンド帯図

② 図1のバイアス電圧条件におけるpnp形トランジスタのエネルギー帯図を描け。なお，図2のように，伝導帯下端E_Cと価電子帯上端E_Vは実線で，フェルミ準位E_Fは一点鎖線で表せ。

③ ベース電流I_Bはエミッタ電流I_Eおよびコレクタ電流I_Cに比べて小さく，エミッタ電流I_Eとコレクタ電流I_Cはほぼ等しいと近似できる。すなわち，$I_E=I_C+I_B\approx I_C$と近似できる。この理由を説明せよ。

[IV] 固体物性に関する以下の設問（1）～（12）に解答せよ。

金属を記述するモデルとして，立方体に閉じ込められた電子を考える。簡単のため，まず電子が1個の場合，①電子には力が働かないとし，量子力学を適用すると，電子の波動関数は$\Phi(\vec{r}) = A\exp[i\vec{k}\cdot\vec{r}]$ （Aは規格化定数，$\vec{k}$は波数）と書ける。ここで，$\vec{k}$は②この電子の量子力学的状態を記述する物理量のひとつであり，③電子のエネルギーは，波数の大きさを用いて書ける。④電子が閉じ込められている立方体の一辺の長さをLとして，周期的境界条件を適用すると，⑤波数は量子化される。

つぎに，自由電子が多数の場合を考える。簡単のため，電子系は絶対零度にあり，⑥電子同士の相互作用を無視すると，1個の電子に対する波動関数を適用することができる。

（1） 下線部①の近似の名称を答えよ。

（2） 下線部②において，電子の量子力学的状態を記述する物理量は波数の他にひとつある。この物理量を答えよ。

（3） 下線部③において，電子のエネルギーεを，電子の質量mと換算プランク定数$\hbar(=h/2\pi)$を用いて書け。結果のみでよい。

（4） 下線部④における周期的境界条件を数式で示せ。$\vec{r}=(x,y,z)$とせよ。

（5） 下線部⑤において，波数のx成分k_xを求めよ。途中の過程も記せ。

（6） 下線部⑥の近似の名称を答えよ。

（7） すべての電子が波数$\vec{k}=\vec{0}$をとるときに，この電子系のエネルギーが最小となるはずであるが，現実にはそうはならない。この理由を簡潔に述べよ。

（8） 金属中の自由電子は$\vec{k}$空間におけるフェルミ球を構成する。フェルミ球の半径k_Fと，フェルミ球面における電子のエネルギーε_Fの間に成り立つ関係式を書け。結果のみでよい。

（9） フェルミ球の半径k_Fを，全電子数N，立方体の一辺の長さLを用いて求めよ。途中の経過も記せ。

（10） フェルミ球面上にある波数$\vec{k}=(0,0,k_F)$の電子は，実空間でどのような運動をするか。その速度を答えよ。

（11） フェルミ球面内の電子は実空間で運動しているにもかかわらず，電圧が加えられない限り，この金属に電流は流れない。この理由を簡潔に答えよ。

（12） フェルミ球面上の電子が実空間で持つ速度をフェルミ速度と呼ぶ。通常の金属で，フェルミ速度は秒速でどの程度か。結果のみでよい。