

令和2年度第1次募集（令和元年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) スピン量子数  $s = \frac{1}{2}$  の粒子を考える。スピン角運動量  $\mathbf{s}$  の  $z$  成分  $s_z$  に対応する演算子を  $\hat{s}_z$  とし、規格化された固有状態を  $|\frac{1}{2}, m_s\rangle$  と表すと次の固有値方程式、

$$\hat{s}_z \left| \frac{1}{2}, m_s \right\rangle = m_s \hbar \left| \frac{1}{2}, m_s \right\rangle,$$

が成り立つ。ここで、 $m_s = \pm \frac{1}{2}$  である。以下の問①～④に答えよ。

① 状態が  $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$  であるときの、 $s_z$  の期待値を書け。

②  $m_s \neq m'_s$  であるとき、以下の関係が成り立つことを示せ。

$$\left\langle \frac{1}{2}, m'_s \left| \frac{1}{2}, m_s \right\rangle = 0$$

③ 規格化された重ね合わせの状態

$$|\alpha\rangle = C_1 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + C_2 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle,$$

を考える。 $C_1^2 + C_2^2 = 1$  であることを示せ。ここで  $C_1, C_2$  は実数であるとする。

④ 電子はスピン角運動量  $\mathbf{s}$  による磁気モーメント

$$\boldsymbol{\mu}_s = -g \frac{e}{2m} \mathbf{s},$$

を持ち、磁束密度  $\mathbf{B}$  の中に置かれたときのポテンシャルエネルギー  $U$  は  $-\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}$  である。電子が問③の状態にあるとき、 $U$  の期待値を求めよ。ただし、 $\mathbf{B}$  は  $z$  軸に平行であるとし、その大きさを  $B$  とする。また、 $-e$  は電子の電荷、 $m$  は電子の質量、 $g$  は定数である。

[次ページに続く]

(2) 角運動量 $\mathbf{J}$ に対応する演算子 $\hat{\mathbf{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$ には以下の交換関係,

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

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

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

が成り立つ。以下の問①～④に答えよ。

①  $[\hat{J}_z^2, \hat{J}_z] = 0$ であることを示せ。

②  $[\hat{J}_x^2, \hat{J}_z] = -i\hbar(\hat{J}_x\hat{J}_y + \hat{J}_y\hat{J}_x)$ であることを示せ。必要であれば以下の交換関係,

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

を用いても良い。ここで、 $\hat{A}$ 、 $\hat{B}$ および $\hat{C}$ は任意の演算子である。

③  $\hat{\mathbf{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の交換関係を求めよ。

④  $\hat{J}_z$ の固有関数を $\psi$ 、固有値を $\mu$ とし、縮退はないものとする。 $\psi$ は $\hat{\mathbf{J}}^2$ の固有関数でもあることを、前問③の結果を用いて示せ。

[ II ] 質量  $m$  の単原子分子の理想気体  $n$  モルを古典近似で扱い、状態方程式を求める。以下の設問 (1) ~ (8) に答えよ。ボルツマン定数を  $k_B$ 、温度を  $T$ 、気体  $n$  モルの分子数を  $N$  とする。必要であれば、ガウス積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi}$$

を用いよ。

(1)  $i$  番目の分子の運動量を  $\mathbf{p}_i = (p_{ix}, p_{iy}, p_{iz})$  とする。 $i$  番目の分子のハミルトニアン  $H_i$  を書け。

(2) 一般に、エネルギー準位が  $\epsilon_r$  で与えられるとき、温度  $T$  における 1 分子の分配関数  $z_0$  を  $\epsilon_r$ ,  $k_B$ ,  $T$  で表せ。

(3) 古典近似では、1 分子の分配関数は、

$$z_0 = \frac{1}{h^3} \int \cdots \int \exp(-H_i/k_B T) dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz} dx_i dy_i dz_i$$

となる。 $N$  分子系の分配関数  $Z$  を  $z_0$  を用いて表せ。ここで、 $h$  はプランク定数、 $(x_i, y_i, z_i)$  は  $i$  番目の分子の座標である。ただし、 $-\infty < p_{ix}, p_{iy}, p_{iz} < \infty$  とする。

(4) 設問 (1) と (3) を使って  $z_0$  を求めよ。

(5)  $N$  分子系の分配関数が、

$$Z = \frac{1}{N!} \frac{V^N}{h^{3N}} (2\pi m k_B T)^{3N/2}$$

となることを示せ。

(6) ヘルムホルツの自由エネルギーが、

$$F = -k_B T \left( N \log V + \frac{3N}{2} \log T + A \right)$$

となることを示せ。ここで、 $V$  は気体の体積、 $A$  は  $V$  と  $T$  を含まない項である。

(7) 気体の圧力を  $p$  とする。熱力学関係式、

$$p = - \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_T$$

が成り立つことを示せ。

(8) 設問 (6) と (7) の結果を使って、理想気体の状態方程式を導け。

[Ⅲ] 半導体に関する以下の設問 (1) と (2) に答えよ。

- (1) 電子のエネルギー  $E$  に対する状態密度  $N(E)$ 、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  $n(E)$  の変化の様子を、電子のエネルギー  $E$  を縦軸として、それぞれ図 1(a), (b) および (c) に示す。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。

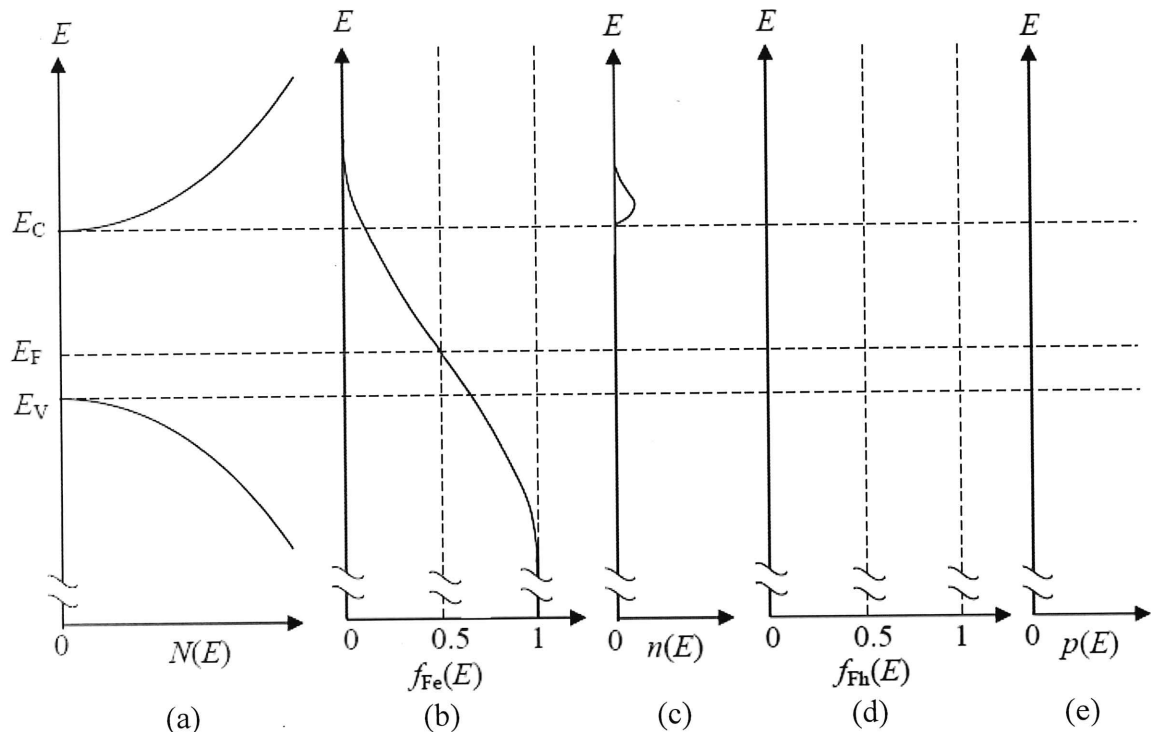


図 1. 電子のエネルギー  $E$  に対する (a) 状態密度  $N(E)$ , (b) 電子のフェルミ・ディラック分布関数  $f_{Fe}(E)$ , (c) 伝導帯の電子分布  $n(E)$ , (d) 正孔のフェルミ・ディラック分布関数  $f_{Fh}(E)$ , (e) 価電子帯の正孔分布  $p(E)$

- ① 電子に関するフェルミ・ディラック分布関数は、エネルギー  $E$  の状態

を電子が占有する割合を示し、 $f_{Fe}(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/kT}}$  と表せる。ここで、 $k$  および  $T$  のそれぞれはボルツマン定数および温度である。伝導帯内の電子に

おいては、 $E - E_F \gg kT$  に対応しているとみなせるとして、 $f_{Fe}(E)$  を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 伝導帯の電子濃度  $n$  が  $\int_{E_C}^{\infty} f_{Fe}(E) N(E) dE$  と表せるとき、伝導帯の状態密

[次ページに続く]

度  $N(E)$  を  $\frac{4\pi}{h^3}(2m_e^*)^{3/2}(E-E_C)^{1/2}$  として,  $n = N_C e^{-(E_C-E_F)/kT}$  の関係式を導け。

この関係式を導く過程で, 伝導帯の有効状態密度  $N_C$  が,  $2\left(\frac{2\pi m_e^* kT}{h^2}\right)^{3/2}$  であることも示せ。  $h$  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。なお, 導出の過程において,  $(E-E_C)/kT = x$  と置くことで

$$\int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-x} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \text{ を用いることができる。}$$

- ③ 正孔に関するフェルミ・ディラック分布関数  $f_{\text{Fh}}(E)$  は, エネルギー  $E$  の状態を正孔が占有する割合を示す関数である。この  $f_{\text{Fh}}(E)$  を,  $E$ ,  $E_F$ ,  $k$  および  $T$  を用いた式で表せ。また, その  $f_{\text{Fh}}(E)$  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) 階段形の pn 接合について, 問①~⑤に答えよ。
- ① 熱平衡状態における電荷中性領域での p 形の伝導帯下端のエネルギー  $E_{\text{Cp}}$  と n 形の伝導帯下端のエネルギー  $E_{\text{Cn}}$  との差  $(E_{\text{Cp}} - E_{\text{Cn}})$  を, 拡散電位  $V_D$  および電子の電荷の大きさ  $q$  ( $q > 0$ ) を用いて表せ。
- ② 熱平衡状態で p 形領域の電子濃度  $n_{p0}$  および n 形領域の電子濃度  $n_{n0}$  は, それぞれ  $n_{p0} = N_C e^{-(E_{\text{Cp}}-E_{\text{Fp}})/kT}$  および  $n_{n0} = N_C e^{-(E_{\text{Cn}}-E_{\text{Fn}})/kT}$  と表せる。ここで,  $N_C$  は伝導帯の有効状態密度,  $k$  はボルツマン定数,  $T$  は温度である。  $n_{p0}$  を  $n_{n0}$  と  $V_D$  を用いて表せ。
- ③ pn 接合にバイアス電圧  $V$  を印加した。このときの  $(E_{\text{Cp}} - E_{\text{Cn}})$  を,  $V$  を用いて表せ。ただし, 順方向にバイアス電圧  $V$  を印加したとき  $V > 0$  とする。
- ④ pn 接合にバイアス電圧  $V$  を印加したとき, p 形中性領域の空乏層側端における電子濃度  $n_p$  を,  $V$  を用いて表せ。
- ⑤ pn 接合の逆バイアス状態においては, 逆バイアス電圧を大きくしても電流が流れにくい。この特性を, p 形中性領域の空乏層側端の電子濃度の逆バイアス電圧に対する変化の観点から説明せよ。

[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次元蜂の巣格子(正六角形で敷き詰められた空間で、正六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。 $e_x$  と  $e_y$  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。

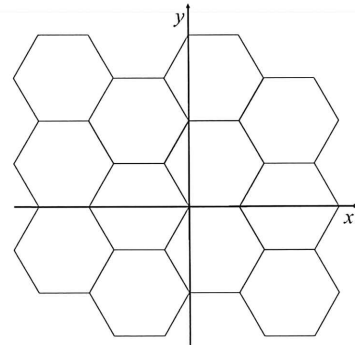


図1 蜂の巣格子

① 基本並進ベクトル  $\mathbf{a}_i$  ( $i = 1, 2$ ) を  $a$  と  $e_x$  と  $e_y$  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  $\mathbf{b}_i$  ( $i = 1, 2$ ) を求めよ。

(2) 基本並進ベクトル  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  を持つ結晶を考える。この結晶中を動く電子のシュレーディンガー方程式は周期的ポテンシャル  $V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r})$  を用いて

$$H\psi(\mathbf{r}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = \epsilon\psi(\mathbf{r})$$

と書ける。ここで、 $m$  は電子の質量であり、 $\hbar$  はプランク定数を  $2\pi$  で割った量である。また、 $\mathbf{R} = m_1\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2 + m_3\mathbf{a}_3$  は結晶の並進ベクトルであり、 $m_1$  と  $m_2$  と  $m_3$  は任意の整数である。このとき、ポテンシャルの周期性により全系を並進ベクトル  $\mathbf{R}$  だけずらしてもハミルトニアン  $H$  は不変である。 $\psi(\mathbf{r})$  は縮退していないものとして、以下の問①~⑤に答えよ。

① 結晶中の全ての座標を  $\mathbf{R}$  だけずらす演算子を  $T_{\mathbf{R}}$  とすると、 $T_{\mathbf{R}}$  と  $H$  の間の関係式を示せ。

②  $H\psi(\mathbf{r}) = \epsilon\psi(\mathbf{r})$  であるとき、前問①の結果を用いて状態  $T_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r})$  の固有エネルギーを求めよ。

③ ブロッホの定理  $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r})$  を満たす波動関数を  $\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u(\mathbf{r})$  と書いたとき、ブロッホの定理を用いて  $u(\mathbf{r})$  の満たす性質を求めよ。

④ 問①の結果を踏まえて、 $T_{\mathbf{a}_1}\psi(\mathbf{r})$  と  $T_{\mathbf{a}_2}\psi(\mathbf{r})$  と  $T_{\mathbf{a}_3}\psi(\mathbf{r})$  のそれぞれを  $\psi(\mathbf{r})$  を用いて記述せよ。ただし、 $T_{\mathbf{a}_i}\psi(\mathbf{r})$  は規格化されているものとする。

⑤ 前問④で得られた結果と  $T_{\mathbf{R}} = (T_{\mathbf{a}_1})^{m_1}(T_{\mathbf{a}_2})^{m_2}(T_{\mathbf{a}_3})^{m_3}$  の関係を用いて、ブロッホの定理を導出せよ。ただし、波数ベクトルは  $\mathbf{k} = k_1\mathbf{b}_1 + k_2\mathbf{b}_2 + k_3\mathbf{b}_3$  で与えられているものとする。 $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$  は逆格子基本ベクトルである。