令和２年度第２次募集

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）～（8）に答えよ。$\hbar = h/(2\pi)$であり，hはプランク定数である。

（1） 粒子の質量をm，角振動数をω，位置をxとして１次元調和振動子を考える。運動量と位置，それぞれに対応する演算子$\hat{p}$と$\hat{x}$を用いてハミルトニアン$\hat{H}$を書け。ただし，$x = 0$ におけるポテンシャルを0とする。

（2） 互いにエルミート共役な演算子，

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right),$$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right),$$

を定義し，前設問（1）の$\hat{H}$を，

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right),$$

と書く。$\hat{a}$と$\hat{H}$の交換関係が$[\hat{a}, \hat{H}] = \hbar\omega\hat{a}$であることを示せ。必要であれば$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$の関係を用いよ。

（3） $\hat{H}$の固有値がεの固有関数を$u_\varepsilon(x)$とすると，$\hat{a}u_\varepsilon(x)$も$\hat{H}$の固有関数であることを示し，その固有値を求めよ。

（4） 前設問（3）の結果から，$\hat{a}$を$u_\varepsilon(x)$にm回作用させることによって，$\hat{H}$の固有値が$m\hbar\omega$だけ小さい固有関数を作りだせることがわかる。しかし，この$\hat{H}$の固有値は0以上であり，

$$\hat{a}u_{\varepsilon_0}(x) = 0,$$

を満たす固有値が最低の固有関数$u_{\varepsilon_0}(x)$が存在する。$u_{\varepsilon_0}(x)$を求めよ。ただし，規格化定数をN_0とせよ。

（5） 前設問（4）の規格化定数N_0を求めよ。必要であれば以下の公式，

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-bx^2)\,dx = \sqrt{\frac{\pi}{b}},$$

を用いよ。ただし，bは正の定数である。

［次ページに続く］

（6） $u_{\varepsilon_0}(x)$に対する基底状態の固有値ε_0を求めよ。

（7） $\hat{a}^\dagger$を$u_{\varepsilon_0}(x)$にn回作用させると，$\hat{H}$の固有値が$n\hbar\omega$だけ大きい固有関数を作り出すことができ，これを規格化した関数を$u_{\varepsilon_n}(x)$とする。$u_{\varepsilon_n}(x)$に対する$\hat{H}$の固有値ε_nを書け。

（8） $\hat{a}^\dagger u_{\varepsilon_n}(x) = C u_{\varepsilon_{n+1}}(x)$と書くことができる。定数$C$を求めよ。ここで，$u_{\varepsilon_{n+1}}(x)$は規格化されており，$u_{\varepsilon_n}(x)$に対する$\hat{a}^\dagger \hat{a}$の固有値が$n$であることを用いよ。

[II] N 個の独立な粒子から成る系が温度 T の熱平衡状態にある。各粒子はエネルギーが $\epsilon_1 = 0$ と $\epsilon_2 = \Delta > 0$ の 2 つの値しかとりえないとする。以下の設問（1）〜（9）に答えよ。ボルツマン定数を k とする。

（1） 1 粒子の分配関数 z を求めよ。

（2） 1 粒子の自由エネルギー f を求めよ。

（3）N 粒子系の自由エネルギー F は $F = Nf$ である。エントロピーを S として熱力学関係式,

$$S = -\frac{dF}{dT}$$

が成り立つことを示せ。ただし，体積は一定とする。

（4）前設問（3）の結果を使ってエントロピーを求めよ。

（5）前設問（4）の結果から $\Delta/kT \to 0$ の極限におけるエントロピーを求めよ。

（6）設問（4）の結果から $\Delta/kT \to \infty$ におけるエントロピーを求めよ。

（7）ボルツマンの原理 $S = k \log W$ から設問（5）と（6）の結果を解釈せよ。ここで, W は量子状態の数である。

（8）横軸を kT/Δ，縦軸をエントロピーとしてエントロピーの温度変化の概略を図示せよ。主要な値は明記せよ。

（9）エネルギー準位 ϵ_1 を占める粒子数を N_1，エネルギー準位 ϵ_2 を占める粒子数を N_2 とする。$T = 300\mathrm{K}$，$\Delta/k = 30\mathrm{K}$ のとき，$\dfrac{N_2}{N_1}$ の値を有効数字 1 桁で求めよ。

［Ⅲ］半導体に関する以下の設問（1）と（2）に答えよ。

（1）シリコン結晶の半導体について，以下の問①〜⑥に答えよ。

① 真性半導体の価電子帯の電子を共有結合と関連付けて説明せよ。

② 真性半導体の伝導帯の電子が伝導に寄与するキャリヤとみなせることを，共有結合と関連付けて説明せよ。

③ 真性半導体の価電子帯の正孔が伝導に寄与するキャリヤとみなせることを，共有結合と関連付けて説明せよ。

④ 禁制帯幅を，共有結合と関連付けて説明せよ。

⑤ ドナーとして振舞う不純物のイオン化エネルギーが，禁制帯幅のエネルギー値よりも小さい理由を，共有結合と関連付けて説明せよ。

⑥ ドナーのイオン化エネルギーが何 eV かを，ボーアの水素原子模型を用いて求めよ。ただし，ボーアの理論における水素原子のエネルギー準位は，電子の電荷の大きさq，電子の質量m，真空の誘電率ε_0，プランク定数h，主量子数nを用いた次式で表され，

$$E_n = -\frac{q^4 m}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2},$$

$n=1$の基底状態におけるエネルギーの絶対値を 14eV とする。ただし，比誘電率ε_{S}は 12，電子の有効質量m_{e}は$0.33m$とする。

（2）p 形及び n 形領域のそれぞれにアクセプタ及びドナーのみが一様に添加されている階段形の pn 接合について，以下の問①〜④に答えよ。

① 熱平衡状態において，pn 接合界面領域にキャリヤが存在しない空乏層が生じる理由を述べよ。

② 接合界面に垂直でn形領域からp形領域への向きを正とする軸をx軸とし，n 形領域に対して p 形領域に印加したバイアス電圧をV（$V>0$）とすると，電子電流密度$j_{\mathrm{e}}(x)$は p 形領域の空乏層端（$x=x_{\mathrm{p}}$）で$j_{\mathrm{e}}(x_{\mathrm{p}}) = -\frac{qD_{\mathrm{e}}}{L_{\mathrm{e}}} n_{\mathrm{p0}}\left(e^{qV/kT}-1\right)$，正孔電流密度$j_{\mathrm{h}}(x)$は n 形領域の空乏層端（$x=x_{\mathrm{n}}$）で$j_{\mathrm{h}}(x_{\mathrm{n}}) = -\frac{qD_{\mathrm{h}}}{L_{\mathrm{h}}} p_{\mathrm{n0}}\left(e^{qV/kT}-1\right)$と表される。ここで，p 形領域の電子の熱平衡濃度はn_{p0}，n 形領域の正孔の熱平衡濃度はp_{n0}，電子の拡散

［次ページに続く］

定数はD_{e}，正孔の拡散定数はD_{h}，電子の拡散距離はL_{e}，正孔の拡散距離はL_{h}，電子の電荷の大きさはq，ボルツマン定数はkおよび温度はTである。空乏層内では電子と正孔が再結合しないものとして，全電流密度jを求めよ。なお，j_{e}およびj_{h}はx軸の正方向の流れを正として表すが，jはx軸の負方向の流れを正として表すものとする。

③　逆方向にバイアス電圧を印加した場合$(V<0)$の飽和電流密度j_{s}を，D_{e}，D_{h}，L_{e}，L_{h}，q，N_{A}，N_{D}およびn_{i}を用いて表せ。ここで，N_{A}，N_{D}およびn_{i}は，それぞれアクセプタ濃度，ドナー濃度および真性キャリヤ濃度である。ただし，ドナーとアクセプタは完全にイオン化しているものとする。

④　逆方向のバイアス電圧での飽和電流密度は，禁制帯幅が大きくなると，どのように変化すると考えられるかを，その理由と共に述べよ。ただし，イオン化している不純物の濃度，キャリヤの拡散定数と拡散距離は変化しないものとする。

[IV]　固体物性に関する以下の設問 (1) と (2) に答えよ。

(1) 原子間の相互作用について以下の問①～④に答えよ。
原子の最外殻に軌道縮退を持たない電子軌道があるものとする。以下では原子２つの中にある１電子状態を考える。この一般的な波動関数は $\psi(\mathbf{r}) = c_1\phi_1(\mathbf{r}) + c_2\phi_2(\mathbf{r})$ と書ける。ここで，$\phi_1(\mathbf{r})$ は原子１のこの電子軌道にある状態の位置ベクトル $\mathbf{r}$ における電子の波動関数，$\phi_2(\mathbf{r})$ は原子２のこの電子軌道にある状態の位置ベクトル $\mathbf{r}$ における電子の波動関数である。ただし，$\phi_i(\mathbf{r})$ は規格化されているが，互いに直交していない実波動関数とする (i =1，2)。

① 波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ をシュレーディンガー方程式 $H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$ （H と E はそれぞれこの系のハミルトニアンと固有エネルギー）に代入し，

$$H_{ij} = \int d\mathbf{r}\phi_i^*(\mathbf{r})H\phi_j(\mathbf{r}) = H_{ji}, \qquad \varepsilon_0 = H_{ii} \quad (i = 1, 2), \qquad S_{12} = \int d\mathbf{r}\phi_1^*(\mathbf{r})\phi_2(\mathbf{r}) = S_{21}$$

を用いて，以下の関係式が成り立つことを示せ。

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_0 - E & H_{12} - ES_{12} \\ H_{12} - ES_{12} & \varepsilon_0 - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

② 前問①の関係式を満たす２つの固有エネルギー E を求めよ。

③ 前問②の２つの固有エネルギーに対応する電子軌道の名称と性質をそれぞれ答えよ。

④ 原子２つの中に電子が２つ存在するとき，２つの原子が無限に離れているとき ($H_{12} = S_{12} = 0$) と比べて，どのような状態が安定になるかを説明せよ。ただし、$\varepsilon_0 S_{12} > H_{12}$ であるとする。

(2) 間隔 a の無限に長い１次元鎖の格子点に原子 A と原子 B が交互に配列している。原子 A, B はそれぞれ質量 M_{A}，M_{B} を持ち，鎖の方向に振動しているものとする。この時，単位胞には原子 A と原子 B を１つずつ含むことに注意すると，j-番目の単位胞内の原子 A, B はそれぞれ鎖の方向にその平衡点からの変位 $q_{j,\mathrm{A}}, q_{j,\mathrm{B}}$ を持つことになる。これらの変位により，各原子は弾性ポテンシャルを受けていることになる。
格子振動について以下の問①～③に答えよ。

① 弾性ポテンシャルのバネ定数を K とした時，この系のラグランジアンを求めよ。

② 古典力学に従って j-番目の単位胞内の原子 A, B に対する運動方程式を書け。

③ 運動方程式の解が，$q_{j,\mathrm{A}} = Q_{\mathrm{A}}e^{iqja-i\omega t}$，$q_{j,\mathrm{B}} = Q_{\mathrm{B}}e^{iqja-i\omega t}$ であるとする。このとき，これらの運動方程式を解くことにより，２つの振動数の表式を求めよ。