

令和5年度第1次募集（令和4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（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 4問中3問を選択し，解答用紙の表紙にあるチェック欄に○をつけること。
- 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) ~ (7) に答えよ。

- (1) 非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ に対して、直交した 2 つの固有状態 $|a\rangle, |b\rangle$ が
あり、以下の関係,

$$\hat{H}_0|a\rangle = E_a|a\rangle,$$

$$\hat{H}_0|b\rangle = E_b|b\rangle$$

が成り立つとする。ここで $|a\rangle, |b\rangle$ は規格化されており、 E_a と E_b はそれぞれの状態に対応するエネルギー固有値である。 $|a\rangle, |b\rangle$ を基底として $\hat{H}_0$ を行列で表せ。

- (2) 摂動ハミルトニアン $\hat{V} = \hat{V}_{ab} + \hat{V}_{ba}$ がある。前設問 (1) の $|a\rangle, |b\rangle$ に対して、演算子 $\hat{V}_{ab}$ および $\hat{V}_{ba}$ に関しては、

$$\hat{V}_{ab}|a\rangle = 0,$$

$$\hat{V}_{ab}|b\rangle = V|a\rangle,$$

$$\hat{V}_{ba}|a\rangle = V|b\rangle,$$

$$\hat{V}_{ba}|b\rangle = 0$$

が成り立つとする。ここで V は実数である。 $|a\rangle, |b\rangle$ を基底として $\hat{V}$ を行列で表せ。

- (3) 前設問 (2) の結果は $|a\rangle, |b\rangle$ が $\hat{V}$ の固有状態ではないことを示す。その理由を書け。

- (4) $\frac{1}{\sqrt{2}}(|a\rangle + |b\rangle)$ と $\frac{1}{\sqrt{2}}(|a\rangle - |b\rangle)$ は $\hat{V}$ の固有状態である。それぞれの固有値を求めよ。

- (5) 全ハミルトニアン $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ に関しては以下の関係,

$$\hat{H}|a\rangle = E_a|a\rangle + V|b\rangle,$$

$$\hat{H}|b\rangle = V|a\rangle + E_b|b\rangle$$

が成り立つとする。 $|a\rangle, |b\rangle$ を基底として $\hat{H}$ を行列で表せ。

- (6) 前設問 (5) の $\hat{H}$ の 2 つの固有値を求めよ。

- (7) $E_a = E_b$ であるとき、 $\hat{H}$ の 2 つの固有状態間のエネルギー差 $|\Delta E|$ を求めよ。

[II] 熱・統計物理学に関する以下の設問 (1) と (2) に答えよ。

(1) 熱力学第 3 法則に関する以下の問①～⑤に答えよ。

- ① 熱力学第 3 法則とはどういうものをエントロピーという言葉を用いて答えよ。
- ② g_0 重に縮退したエネルギー E_0 の基底状態と g_1 重に縮退したエネルギー E_1 ($E_1 > E_0$) の第 1 励起状態があると仮定する。 $E > E_1$ のエネルギーの固有状態の寄与を無視して、分配関数 Z を計算せよ。
- ③ 前問②の自由エネルギー F が十分低温 $k_B T \ll E_1 - E_0$ において

$$F \approx E_0 - k_B T \log g_0 - k_B T \frac{g_1}{g_0} e^{-\frac{E_1 - E_0}{k_B T}}$$

となることを示せ。

- ④ 前問③の自由エネルギーを用いて、十分低温におけるエントロピー S を計算せよ。
- ⑤ 問②の系が熱力学第 3 法則を満たすための条件を答えよ。

(2) 1 種類の粒子から成る系の 2 つの異なる相 A と相 B の相境界線上での性質に関する以下の問①～④に答えよ。

- ① ギブスの相律を用いて、この系の相境界線上における自由度 f を求めよ。
- ② 横軸を温度 T で縦軸を圧力 p としたこの系の相図の、相境界線上における非常に近接した 2 つの点を (T_0, p_0) と $(T_0 + \delta T, p_0 + \delta p)$ とする。また、相 A と相 B の化学ポテンシャルをそれぞれ μ_A と μ_B とする。点 (T_0, p_0) における μ_A と μ_B の関係式、および点 $(T_0 + \delta T, p_0 + \delta p)$ における μ_A と μ_B の関係式を答えよ。
- ③ 前問②で得られた点 $(T_0 + \delta T, p_0 + \delta p)$ での関係式を (T_0, p_0) の周りでテイラー展開せよ。
- ④ μ と T と p の間には熱力学の関係式

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_p = -s, \quad \left(\frac{\partial \mu}{\partial p} \right)_T = v$$

がある。ここで s と v はそれぞれ 1 粒子あたりのエントロピーと体積である。前問③で得られた結果を用いて、相境界線上の点 (T_0, p_0) における傾き $\frac{dp}{dT}$ を s_A と v_A と s_B と v_B を使って表せ。ただし、相 A での 1 粒子あたりのエントロピーと体積をそれぞれ s_A と v_A 、相 B での 1 粒子あたりのエントロピーと体積をそれぞれ s_B と v_B とした。

[Ⅲ] 半導体に関する以下の設問 (1) と (2) に答えよ。

(1) ドナーのみを添加した n 形半導体について、以下の問①～④に答えよ。

① すべてのドナーがイオン化されておらず、価電子帯から伝導帯へ励起された電子数は無視できるほど少ない不純物領域の温度範囲において、イオン化したドナーの濃度 N_D^+ は $N_D e^{-(E_F - E_D)/kT}$ と表せ、電子濃度 n は $N_C e^{-(E_C - E_F)/kT}$ と表せるとする。ここで N_C は伝導帯の有効状態密度、 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、 k はボルツマン定数、 T は温度、 N_D はドナー濃度、 E_D はドナー準位のエネルギーである。このとき、 E_F を、 E_C 、 E_D 、 N_C 、 N_D 、 k 及び T を用いて表せ。なお、導出過程も示すこと。

② 前問①の解答を用いて、不純物領域において電子濃度 n が $e^{-(E_C - E_D)/2kT}$ に比例することを示す式を導け。

③ 図 1 は、真性領域より低温における電子濃度 n の温度に対する依存性を示している (縦軸は電子濃度の対数で、横軸は温度の逆数であることに注意せよ)。図 1 の点 A と点 B からドナーのイオン化エネルギーを有効桁 2 桁で求めよ (単位を忘れないこと)。導出過程も記述せよ。ただし、 N_C の温度依存性は無視できるものとし、 $k = 8.6 \times 10^{-5}$ eV/K、 $\log_{10} e = 0.43$ とする。

④ 図 1 において、電子濃度 n が一定値となる温度領域が存在する理由を説明せよ。また、ドナー濃度 N_D の値を答えよ。

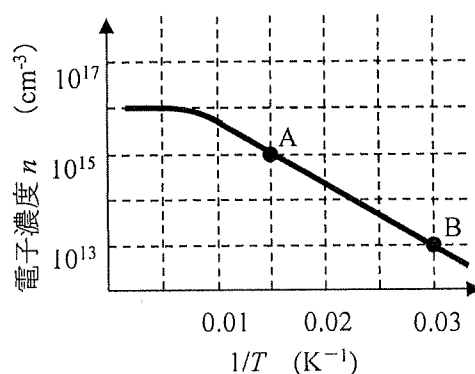


図 1. 電子濃度 n の温度依存性

[次ページに続く]

(2) p 形半導体基板を用いた金属－絶縁体－半導体構造のエンハンスメント形 MIS 電界効果トランジスタの構造の概略モデルと、その通常動作のための電極と配線の様子の一部を図 2 に示す。以下の問①～⑤に答えよ。

- ① 2つの直流電源の記号 $\text{---}|$ と $\text{---}|$ を、解答用紙に記載してある図 1 と同じである図(a)に書き加えて、MIS 電界効果トランジスタが通常動作するときのバイアス条件を示せ。なお、 $\text{---}|$ は $\text{---}|$ よりも大きな直流電圧を出力できる電源を意味する。
- ② ゲート電圧 V_G (ゲート－ソース間電圧: $V_G > 0$) が一定のとき、ドレーン電圧 V_{DS} (ドレーン－ソース間電圧: $V_{DS} > 0$) に対するドレーン電流 I_D の依存性を図 3 に示す。ここで、図 3 の点 B は V_{DS} がピンチオフ電圧 V_P に等しい場合に対応しており、このときの n チャネル (反転層) の様子は図 2 及び図 4 に示されている。この図 4 を参照し、解答用紙の図(b)及び図(c)のそれぞれに、図 3 の点 A 及び点 C の場合の n チャネル (反転層) の様子を描け。
- ③ 図 3 において、 I_D は V_{DS} の増加に対して、点 A 付近では増加する一方で、点 C 付近ではほぼ一定となる理由を説明せよ。
- ④ V_G を大きくすると、 V_P も大きくなる。その理由を説明せよ。
- ⑤ 図 3 において、 V_G をより大きな値で一定とした場合の V_{DS} に対する I_D の変化の様子を図(d)に描き加えよ。また、そのように I_D が変化する理由を説明せよ。

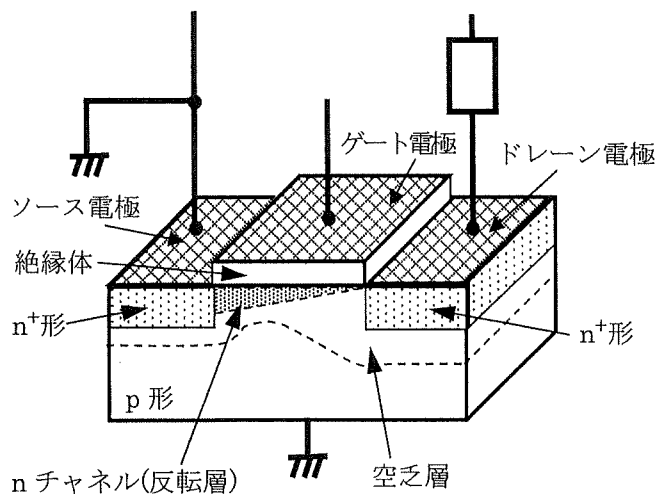


図 2

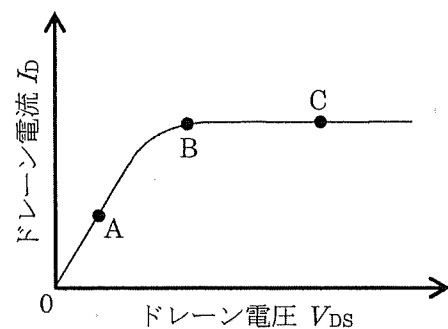


図 3

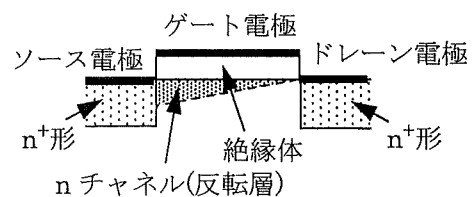


図 4

[IV] 結晶格子と X 線散乱に関する以下の設問 (1) ~ (3) に答えよ。

(1) 図 1 は塩化セシウム構造である。この構造は以下の 3 つのどれか答えよ。

単純立方格子, 体心立方格子, 面心立方格子

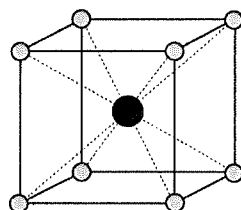


図 1 塩化セシウム構造

(2) 面心立方格子に関する以下の問 ① ~ ⑤ に答えよ。

① 面心立方格子の単位格子 (unit cell) に含まれる格子点の数を答えよ。

② 格子定数 a の面心立方格子に対して, 基本単位格子 (primitive cell) の基本並進ベクトルは, $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$ を直交座標系の単位ベクトルとして,

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y}), \mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}a(\hat{y} + \hat{z}), \mathbf{a}_3 = \frac{1}{2}a(\hat{z} + \hat{x})$$

である。基本単位格子の体積 V は, $V = |\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)|$ で与えられる。 $V = \frac{1}{4}a^3$ となることを計算によって求めよ。

③ 前問 ② において, 体積が a^3 の $\frac{1}{4}$ になる理由を, 格子点, 基本単位格子という言葉を使って説明せよ。

④ 逆格子の基本並進ベクトル $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$, $\mathbf{b}_3$ は,

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

で定義される。この中の 1 つ, $\mathbf{b}_1$ を計算せよ。

⑤ 前問 ④ と同様に $\mathbf{b}_2$ と $\mathbf{b}_3$ を求めることによって, 逆格子を構築できる。面心立方格子の逆格子は, 以下の 3 つのどれか答えよ。

単純立方格子, 体心立方格子, 面心立方格子

[次ページに続く]

(3) 図2のように、体心立方格子の軸ベクトルを $\mathbf{a}'_1$, $\mathbf{a}'_2$, $\mathbf{a}'_3$ とし、対応する逆格子の基本ベクトル $\mathbf{b}'_1$, $\mathbf{b}'_2$, $\mathbf{b}'_3$ を

$$\mathbf{a}'_i \cdot \mathbf{b}'_j = 2\pi\delta_{ij}$$

によって定義する。 δ_{ij} はクロネッカーのデルタである。逆格子ベクトル $\mathbf{G}$ は、 $\mathbf{b}'_1$, $\mathbf{b}'_2$, $\mathbf{b}'_3$ を用いて、

$$\mathbf{G} = h\mathbf{b}'_1 + k\mathbf{b}'_2 + l\mathbf{b}'_3, \quad (h, k, l \text{ は整数})$$

である。

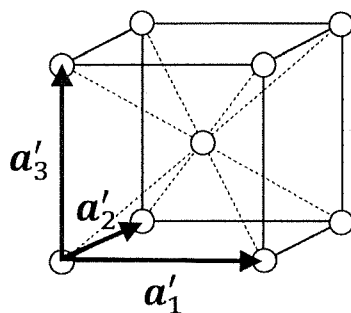


図2 体心立方格子

N 個の単位格子をもつ結晶によって散乱されたX線の散乱振幅 $F_{\mathbf{G}}$ は、構造因子 $S_{\mathbf{G}}$ を用いて、

$$F_{\mathbf{G}} = NS_{\mathbf{G}},$$

$$S_{\mathbf{G}} = \sum_j f_j \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j)$$

となる。 f_j , $\mathbf{r}_j$ は j 番目の原子の原子散乱因子と位置ベクトル、和は単位格子内の原子についてとる。 $\mathbf{r}_j$ を、

$$\mathbf{r}_j = x_j\mathbf{a}'_1 + y_j\mathbf{a}'_2 + z_j\mathbf{a}'_3, \quad (0 \leq x_j, y_j, z_j \leq 1)$$

とする。

- ① $\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j$ を求めよ。
- ② 体心立方格子に対して、構造因子 $S_{\mathbf{G}}$ を求めよ。単位構造 (basis) は原子1個とする。
- ③ 前問②の結果から、体心立方格子ではどのような指数 (hkl) の回折線が消失するか説明せよ。