平成２０年８月１９日（火）
１３：００～１６：００

平成２１年度大学院博士前期課程入学試験問題

大阪大学大学院工学研究科電気電子情報工学専攻

選択科目：量子電子物性

試験問題

【注意事項】

１．　問題は全部で５題あり、以下のように問題ごとに解答用紙が指定されている。解答は必ず指定された解答用紙に記入すること。

問題１．白色の解答用紙
問題２．赤色の解答用紙
問題３．青色の解答用紙
問題４．黄色の解答用紙
問題５．水色の解答用紙

２．　解答が答案用紙の表面に書ききれない場合は、その用紙の裏面を使用してよい。ただし、その場合、裏面に記入がある旨を表面に記載すること。

３．　問題用紙はこの表紙を含めて９ページある。落丁や不鮮明な箇所等があれば、手を挙げて監督者にその旨を伝えること。なお、問題の内容に関する質問には応じられない。

４．　試験が終了したら、答案用紙を若い番号順にそろえて監督者の指示を待つこと。

問題１　次の文章を読み、下記の問いに答えよ。(40 点)

3 次元空間で運動する質量 m の 1 つの電子の定常状態におけるシュレーディンガー方程式は、この電子のエネルギーを ε 、波動関数を $\Psi(x,y,z)$ 、ポテンシャルエネルギーを $V(x,y,z)$ とすると、$\hbar = h/2\pi$ （h はプランク定数）を用いて以下のように表わされる。

$$[\quad ① \quad] = \varepsilon\,\Psi(x,y,z) \qquad (1)$$

次に、図 1 に示すような、1 辺の長さ a の立方体の中に完全に閉じ込められた 1 つの電子の一様なポテンシャル中における運動について考える。この場合、立方体の外では $V(x,y,z)=\infty$ 、立方体の中では、$V(x,y,z)=0$ 、とすることができ、立方体内における、この電子の定常状態の規格化された 3 次元波動関数を $\Phi(x,y,z)$ とすると、

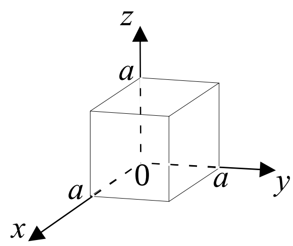

図 1

$$\Phi(x,y,z) = \varphi_1(x)\,\varphi_2(y)\,\varphi_3(z) \qquad (2)$$

とおける。ここで、$\varphi_1(x)$、$\varphi_2(y)$、$\varphi_3(z)$ は、それぞれ、x、y、z に関する 1 次元のシュレーディンガー方程式を満たす波動関数である。例えば、x については、規格化された固有関数 $\varphi_1(x)$ が満たすべき方程式は、そのエネルギー固有値を ε_x とすると、1 次元ポテンシャルエネルギーはゼロとおけるので、以下のように書ける。

$$[\quad ② \quad] = \varepsilon_x \varphi_1(x) \qquad (3)$$

式(3) と同様なシュレーディンガー方程式が、y、z についても成立するため、この場合の 3 次元空間の問題は、1 次元空間の問題に帰着できる。

そこで、x に関する 1 次元のシュレーディンガー方程式（式(3)）を解くことにする。電子が立方体の中に完全に閉じ込められていることから、$\varphi_1(x)$ については以下の境界条件を満たさなければならない。

$$\varphi_1(0) = \varphi_1(a) = [\quad ③ \quad] \qquad (4)$$

式(3) において物理的に意味のある解が存在するためには、$\varepsilon_x > 0$ でなければならないので、式(3) の微分方程式の一般解は、任意定数 A 、B を用いて次式のように表わせる。

$$\varphi_1(x) = \mathrm{A}\sin k_x x + \mathrm{B}\cos k_x x \qquad (5)$$

但し、$k_x > 0$ とおけるが、式(4) より、許される k_x は限定され、正の整数 n_x を用いて 式(6) のように表わされる。

$$k_x = [\quad ④ \quad] \qquad (6)$$

また、下線ⓐ<u>任意定数 A 、B は、境界条件及び規格化条件から求めることができ</u>、n_x を量子数とする規格化された波動関数が得られる。

同様にして、y 、z に関して、それぞれ、正の整数 n_y 、n_z を量子数とする規格化された波動関数

が得られる。これらより、波動関数 $\Phi(x, y, z)$ に対応するエネルギー固有値 ε_Φ は、量子数 n_x 、n_y 、n_z を用いて、以下のように表わされる。

$$\varepsilon_\Phi = [\quad ⑤ \quad] \tag{7}$$

式(7) より、エネルギーの最小値は、［　⑥　］となる。このようにエネルギーが最も低い状態は、量子論では［　⑦　］状態と呼ばれる。また、エネルギーは同一でもそれに対応する量子数（波動関数）が異なる場合があることがわかる。量子論では、このような場合、下線ⓑ［　⑧　］している、と言う。

問１　上の文章中の空欄［　①　］～［　⑧　］に最も適切な数式、数値または語句を入れよ。

問２　(ｉ) 文章中の下線ⓐを参考にして、式(5) の A 、B を求めよ。但し、導出過程も示すこと。

(ⅱ) 規格化された波動関数 $\Phi(x, y, z)$ を、量子数 n_x 、n_y 、n_z を用いて具体的に表わせ。但し導出過程も示すこと。

(ⅲ) (ⅱ)で求めた波動関数 $\Phi(x, y, z)$ に対して、下線ⓑで記した「［　⑧　］している」ε を 1 つあげ、それを与える $\Phi(x, y, z)$ の量子数を全て示せ。

(ⅳ) (ⅱ)で求めた波動関数 $\Phi(x, y, z)$ に対して、座標 x 、運動量 p_x 及びその 2 乗 $p_x{}^2$ の期待値を求めよ。ただし、導出過程も示すこと。なお、x 座標に対応する運動量演算子は、$-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ と表わされる。

問３　一般に、3 次元空間で運動する 1 つの電子に対する波動関数 $\Psi(x, y, z)$ について、周期的境界条件が成立する場合、$\Psi(x, y, z)$ を用いて周期的境界条件を表わせ。ただし、x 、y 、z 方向の周期は全て l とする。

問題２　金属の性質の多くは自由電子モデルによって理解することができる。このモデルでは、電子の持つエネルギーとして運動エネルギーのみを考慮する。この自由電子モデルに関連した以下の問いに答えよ。ただし、電子の質量を m、プランク定数を $h(=2\pi\hbar)$ とする。（40 点）

問１　絶対０度において２次元の正方形（面積 S）中に閉じ込められた N_0 個の自由電子系について考える。

（１）　フェルミ波数を k_F とするとき、フェルミエネルギーε_F を k_F を使って表わせ。

（２）　N_0 個の電子が占める k 空間の面積を k_F を使って表わせ。

（３）　k 空間内でただ１個の波数ベクトルが占める面積は $4\pi^2/S$ で与えられる。このとき、N_0 を k_F を使って表わせ。（注：スピンも考慮すること）

（４）　フェルミ速度 v_F を N_0 を使って表わせ。

（５）　エネルギーε以下における状態の数 $N(\varepsilon)$を求めよ。

（６）　単位エネルギー当りの状態の数 $\mathcal{D}(\varepsilon)$はエネルギーに依存せず、一定であることを示せ。

問２　絶対０度において３次元の立方体（体積 V）中に閉じ込められた N_0 個の自由電子系について考える。

（１）　k 空間内でただ１個の波数ベクトルが占める体積を V を使って表わせ。

（２）　N_0 をフェルミ波数 k_F を使って表わせ。

（３）　単位エネルギー当りの状態の数 $\mathcal{D}(\varepsilon)$は $\sqrt{\varepsilon}$ に比例することを示せ。

問題３　次の半導体に関する文章を読み、下記の問いに答えよ。(40 点)

単結晶 n 型 Si にアクセプタとなる不純物を拡散して作製する pn 接合について考える。簡略化のために、イオン化した添加不純物による空乏層内の電荷 $Q(x)$ の分布を、図 1 に示すとおりの 1 次元の直線傾斜とする。その勾配係数を a とすると、$Q(x) = qax$ となる。ここで、q は素電荷（q =1. 6x10^{-19} C）を表わす。今、n 型領域における空乏層幅を b とする。

電気的中性条件より、p 型領域における空乏層幅（絶対値）は、［　　①　　］となる。

電位 $V(x)$ を求めるために、

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{Q(x)}{\kappa}$$

なるポアソン方程式を用いる。

ここで、κ は Si の誘電率（比誘電率と真空の誘電率の積）を示す。

電界 $E(x)$ は、

$$E(x) = -\frac{dV}{dx}$$

と表わされ、n 型領域の空乏層端における境界条件 $E(b) = 0$ を用いると、$E(x) =$ ［　　②　　］と求まる。そして、電位 $V(x)$ は、pn 接合面における境界条件 $V(0) = 0$ を用いると、$V(x) =$ ［　　③　　］と求まる。

本 pn 接合の無バイアス時の拡散電位を V_d とすると、n 型領域の空乏層端における拡散電位は $V_d/2$ となる。$V(b) = V_d/2$ なる条件より、n 型領域の空乏層幅 b を拡散電位 V_d の関数として表わすと、$b =$ ［　　④　　］となる。

電界 $E(x)$ の大きさ（絶対値）の最大値は、$x =$ ［　　⑤　　］の位置であり、その値 E_{max} を V_d の関数として表わすと E_{max} = ［　　⑥　　］となる。

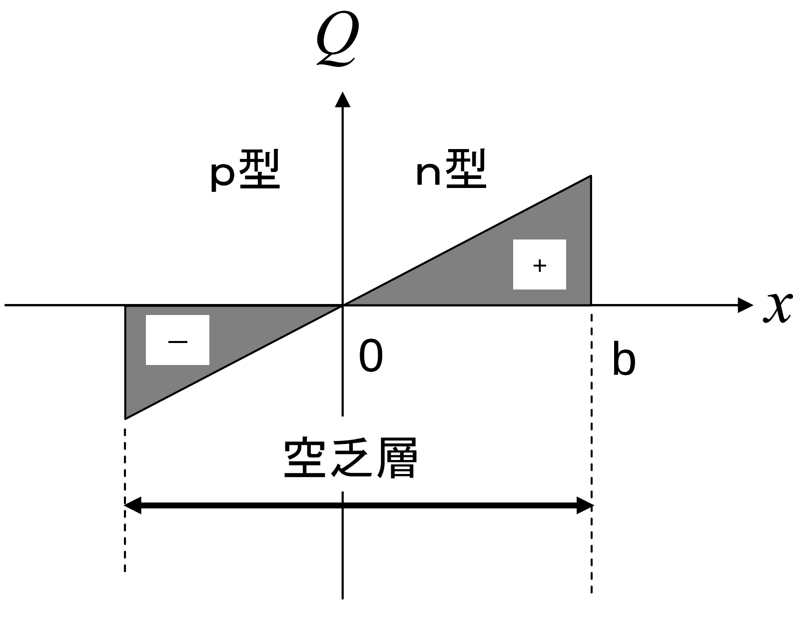

図 1

問１　上の文章の空欄［　　①　　］から［　　⑥　　］に最も適切な数値または数式を入れよ。

問２　立方晶系に属する単結晶 Si の結晶構造は何型か答えよ。

問３　単結晶 Si のバンドギャップにおける光学遷移は何型か答えよ。

問４　単結晶 GaAs のバンドギャップにおける光学遷移は何型か答えよ。

問５　GaP_xAs_{1-x} のバルク単結晶中に作製した pn 接合を用いて、発光ダイオードを作る。発光ピーク波長を 680 nm にするには、GaP_xAs_{1-x} のバンドギャップの大きさは幾らであるべきかを、　単位を eV とし有効数字２桁で答えよ。ここでは、プランク定数 h =6.6×10^{-34} J・s、光速 c =3.0×10^{8}　m/s とする。

問題４　次の誘電体に関する文章を読み、下記の問いに答えよ。(40 点)

電界を印加しなくとも分極を有し、その分極の向きを電界によって変えることができる物質を［　（ア）　］体と呼び、その分極を［　（イ）　］分極と言う。一方、［　（ア）　］体と類似した構造の物質のなかで、例えば隣り合った分極が反対方向を向き、無電界下では［　（イ）　］分極を持たないものもあり、このような物質を［　（ウ）　］ 体と呼ぶ。以下では、双極子理論に基づいて考えた［　（ア）　］体の特性について述べる。

誘電体に外部から大きさ E の電界 $\vec{E}$ を加えた場合、一般に誘電体の構成原子・分子にかかる電界は $\vec{E}$ とは異なる $\vec{E}_\mathrm{a}$ を考える必要がある。この電界 $\vec{E}_\mathrm{a}$ は［　（エ）　］と呼ばれ、真空中の誘電率を ε_0、誘電体に誘起される分極を $\vec{P}$ とすれば、

$$\vec{E}_\mathrm{a} = \vec{E} + \frac{\gamma}{3\varepsilon_0}\vec{P} \qquad (1)$$

となる。ここで、γ は［　（オ）　］とよばれ、以下では $\gamma = 1$ とする。

一方、大きさ μ_0 の永久双極子モーメント $\vec{\mu}_0$ が単位体積中に N_0 個あり、大きさを E_a の電界 $\vec{E}_\mathrm{a}$ の中におかれた場合を考える。ここで、永久双極子モーメントの回転は、気体や液体のように比較的自由であるものとする。このとき、$\vec{E}_\mathrm{a}$ と $\vec{\mu}_0$ とのなす角を θ とすると、絶対温度 T における電界 $\vec{E}_\mathrm{a}$ 方向の平均の双極子モーメントの大きさ $\langle \mu_0 \cos\theta \rangle$ は、

$$\langle \mu_0 \cos\theta \rangle = \mu_0 \cdot L\left(\frac{\mu_0 E_{\mathrm{a}}}{k_{\mathrm{B}} T}\right) \qquad (2)$$

と表わすことができる。ここで、k_{B} はボルツマン定数、$L(x) = \coth x - 1/x$ は、[　（カ）　] 関数と呼ばれるものである。したがって、式 (2) から、$\vec{E}_{\mathrm{a}}$ により誘起される分極 $\vec{P}$ の大きさ P は、[　（カ）　] 関数を用いて

$$P = [\quad ① \quad] \qquad (3)$$

と表わすことができる。

そこで、常誘電相における帯電率 χ の温度依存性を考える。帯電率 χ は、分極 P 、外部電界 E および真空中の誘電率 ε_0 を用いて

$$\chi = [\quad ② \quad] \qquad (4)$$

と書ける。ここで、一般に、極低温をのぞくと、誘起される分極は [　（カ）　] 関数を近似して、

$$P = [\quad ③ \quad] \qquad (5)$$

と書けるから、式 (4) は、式 (1) および式 (5) を用いて整理すると

$$\chi = \frac{C}{T - T_0} \qquad (6)$$

なる関係式が導かれる。ここで、T_0 、C は、いずれも N_0 、μ_0 、ε_0 、k_{B} を用いて表わされ、

$$T_0 = [\quad ④ \quad] \qquad (7)$$

$$C = [\quad ⑤ \quad] \qquad (8)$$

である。これが、 [　（キ）　] の法則であり、$T = T_0$ で χ が発散することがわかる。

次に、[　（イ）　] 分極 $\vec{P}_{\mathrm{s}}$ について考えてみる。すなわち、$\vec{P}_{\mathrm{s}}$ の大きさ P_{s} の満たすべき関係式は、式 (1) および式 (3) を参考にして、[　（カ）　] 関数を用いて、

$$P_{\mathrm{s}} = [\quad ⑥ \quad] \qquad (9)$$

と表わされるが、この式 (9) が $P_{\mathrm{s}} = 0$ 以外の解を持つとき [　（イ）　] 分極が存在することになる。ここで､式 (9) の [　（カ）　]関数の変数を t とおくと､完全配向した分極（$N_0\mu_0$）で規格化した [　（イ）　] 分極は、N_0 、μ_0 、ε_0、k_{B}、T 、t を用いて、

$$\frac{P_{\mathrm{s}}}{N_0 \mu_0} = [\quad ⑦ \quad] \cdot t \qquad (10)$$

と表わされ、さらに、式 (7) の T_0 を用いて書き直すと

$$\frac{P_{\mathrm{s}}}{N_0 \mu_0} = [\quad ⑧ \quad] \cdot \frac{t}{3} \qquad (11)$$

となる。

一方、規格化した [　（イ）　] 分極は、式 (9) より [　（カ）　] 関数および t を用いて、

$$\frac{P_{\mathrm{s}}}{N_0\mu_0} = [\quad ⑨ \quad] \tag{12}$$

とも表わされるので、<u>式 (11) と式 (12) を用いて P_{s} の温度依存性が議論できる。</u>

問１　上の文章の空欄［　（ア）　］～［　（キ）　］に適切な語句を、また、空欄［　①　］～［　⑨　］に数式を入れよ。

問２　上の文章中で述べている［　（ア）　］体および［　（ウ）　］体の具体的な例（物質名）を、それぞれ一つずつ答えよ。

問３　上の文章中の下線部で述べているように、$T < T_0$ の温度で［　（イ）　］分極が発現することと、P_{s} の温度依存性について、図を用いて定性的に説明せよ。

問題５　物質の磁性に関する次の文章を読み、下記の問いに答えよ。(40 点)

物質は磁界によって磁化され、その方向や大きさは物質によって異なっている。常磁性物質の磁化率 χ_{m} は正である。イオン性結晶の示す常磁性は、構成原子が不完全殻を持っていることに起因している。これらの対をつくらない電子 (不対電子) の［　①　］と、その電子の内部自由度である［　②　］により、原子（イオン）に磁気モーメントがもたらされる。外部磁界がない時には、これらの磁気モーメントは［　③　］に配列している。外部磁界を加えると、個々の磁気モーメントにおいて磁界の方向を向く確率が逆方向を向く確率より［　④　］なり、全体として磁化が現れる。下線 A <u>その確率、すなわち磁化は、温度 T にも依存する。</u>

一方、常磁性を示す金属の磁化率の温度依存性は、それとは異なった振る舞いをする。金属中に多数存在する伝導電子の示す常磁性を考えよう。電子は［　②　］による磁気モーメントを持っているので、常磁性イオン性結晶と同様な磁化率の温度依存性を示すと考えられる。しかし、外部静磁界を印加した時、その［　②　］の方向を磁界に対して平行に変えられるのは、［　⑤　］のため、フェルミ・ディラック分布 $\dfrac{1}{1+\exp[(\varepsilon-\varepsilon_{\mathrm{F}})/k_{\mathrm{B}}T]}$ の ε_{F} 近傍の［　⑥　］程度のエネルギー範囲にある電子だけである。その結果、伝導電子の常磁性磁化率は温度に無関係となる。ここで、ε はエネルギー、ε_{F} はフェルミエネルギー、T は温度、k_{B} はボルツマン定数である。

強磁性を示すイオン性結晶には、下線 B 固有の磁気モーメントを持つ構成原子が含まれており、それらの磁気モーメント間には互いに［　⑦　］に配列しようとする相互作用が働いている。その結果、外部磁界がない場合でも磁化を持ち、これを［　⑧　］という。磁気モーメント間にこのような秩序が保たれるのは物質により定まる特定の温度 T_c 以下だけであり、この温度以上では［　⑨　］状態となる。この特性温度 T_c を［　⑩　］と呼ぶ。

磁化率 χ_m が負である物質を［　⑪　］という。この物質を磁界中に置いた時、物質内の磁束密度は外部のそれに比べて［　⑫　］する。このことは、印加磁界と［　⑬　］向きの磁界が物質内に生じていることを意味しており、不均一な磁界中にこの物質を置くと、物質は磁界の強さの［　⑭　］ところへと移動する。［　⑪　］の代表的物質として、閉殻電子構造を持つ He などの希ガス原子、NaCl などのイオン結晶、Si などの共有結晶があげられる。これら物質の構成原子は、電子が 2 個ずつ対をなす電子構造を持っており、これらの電子は互いに逆向きの［　①　］と［　②　］を持っている場合がほとんどである。そのため、原子の磁気モーメントは［　⑮　］となっている。

問１　上の文章の空欄［　①　］～［　⑮　］を適切な語句または数式で補い、文章を完成させよ。

問２　下線 A に記されている常磁性体の磁化率 χ_m の逆数の温度依存性を図示せよ。縦軸に磁化率 χ_m の逆数を、横軸に温度をとり、原点を明記せよ。

問３　強磁性体の磁化率 χ_m の逆数の温度依存性を、$T > T_c$ の温度領域について図示せよ。縦軸に磁化率 χ_m の逆数を、横軸に温度をとり、原点と T_c を明記せよ。

問４　下線 B に記されている様な原子の固有磁気モーメントは、フントの法則に従って、自由原子の持つ基底状態のそれとして求めることが出来る。2 価の自由イオン Ni^{2+} $(3d^8)$ について、全スピン角運動量量子数 S、全軌道角運動量量子数 L および全角運動量量子数 J を求めよ。