

平成19年8月21日(火)

13:00~16:00

平成20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10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次元空間のポテンシャル  $V(x,y,z)$  の中で運動する質量  $m$  の電子 1 個の定常状態におけるシュレーディンガーの波動方程式は以下の式で与えられる。

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x,y,z) \right\} \psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \quad (1)$$

ここで、 $\hbar = h/2\pi$ 、 $h$  はプランク定数、 $E$  はこの電子のエネルギー、 $\psi(x,y,z)$  は波動関数である。

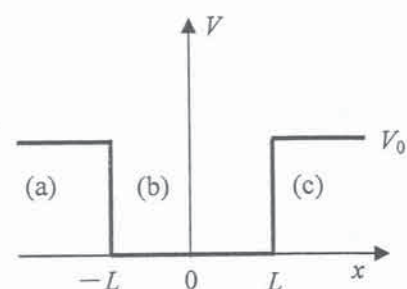


図 1

電子 1 個の運動を  $x$  方向だけに制限した 1 次元モデルを考え、図 1 と式(2)で示される井戸型ポテンシャルを  $V(x)$  とする。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (|x| < L) \\ V_0 & (|x| \geq L) \end{cases} \quad (2)$$

$V_0 > E > 0$  の場合について、1 次元のシュレーディンガーの波動方程式を (a)  $x \leq -L$ 、(b)  $-L < x < L$ 、(c)  $x \geq L$  の 3 つの領域に分けて考える。(a) と (c) の領域では、

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (3)$$

と定義すると、シュレーディンガーの波動方程式は以下の式で与えられる。

$$\left( \begin{bmatrix} \text{①} \end{bmatrix} \right) \psi(x) = 0 \quad (4)$$

したがって、(a) の領域における波動方程式の一般解は、以下の式で与えられる。

$$\psi_1(x) = C_1 \exp(\alpha x) + C_2 \exp(-\alpha x) \quad (5)$$

但し、 $C_1$ 、 $C_2$  は振幅を表す定数である。

同様に、(c) の領域における波動方程式の一般解は、以下の式で与えられる。

$$\psi_3(x) = C_3 \exp(\alpha x) + C_4 \exp(-\alpha x) \quad (6)$$

但し、 $C_3$ 、 $C_4$  は振幅を表す定数である。一方、(b) の領域では、

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (7)$$

と定義すると、シュレーディンガーの波動方程式は以下の式で与えられる。

$$\left( \begin{bmatrix} \text{②} \end{bmatrix} \right) \psi(x) = 0 \quad (8)$$

したがって、(b) の領域における波動方程式の一般解は、以下の式で与えられる。

$$\psi_2(x) = C_5 \exp(ikx) + C_6 \exp(-ikx) \quad (9)$$

但し、 $C_5$ 、 $C_6$  は振幅を表す定数である。

次に、境界条件を考える。 $x = -\infty$ 、および  $x = \infty$  で電子の存在確率が 0 であることから、

$$C_2 = C_3 = [ \text{③} ] \quad (10)$$

また、 $x = -L$  で波動関数が滑らかに接続していなければならないことから、波動関数の間に以下の関係式が得られる。

$$\psi_1(-L) = [ \text{④} ], \quad \frac{d}{dx}\psi_1(x)\Big|_{x=-L} = [ \text{⑤} ] \quad (11)$$

また、 $x = L$  で波動関数が滑らかに接続していなければならないことから、波動関数の間に以下の関係式が得られる。

$$\psi_2(L) = [ \text{⑥} ], \quad \frac{d}{dx}\psi_2(x)\Big|_{x=L} = [ \text{⑦} ] \quad (12)$$

式(10)～式(12)から、 $L$ 、 $k$ 、 $\alpha$  だけの関係式が以下のように得られる。

$$\tan(kL) = [ \text{⑧} ] \text{ または } [ \text{⑨} ] \quad (13)$$

式(3)、式(7)、式(13)から電子のエネルギーが離散的な値をとることがわかる。

また、規格化の条件は以下の式で与えられる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = [ \text{⑩} ] \quad (14)$$

式(10)～式(14)から定数  $C_1$  を実数として計算すると、 $\alpha$ 、 $L$ 、 $k$  を用いて以下の式で与えられる。

$$C_1 = \frac{\exp(\alpha L)}{[ \text{⑪} ]} \quad (15)$$

井戸の外側 ( $|x| \geq L$ ) の部分の波動関数は、指数関数的に減衰するが 0 ではない。したがって、井戸の外側の部分でも、電子の存在確率 ( $|\psi(x)|^2$ ) は 0 ではない。もし、井戸の数が複数あり、井戸の間の壁の厚さが十分に薄い場合、波動関数は壁の外までしみだしてしまう。これは、電子がポテンシャルの壁をすり抜けて井戸間を移動する確率が 0 でないことを示している。このように電子がポテンシャルの壁をすり抜ける効果を [ (ア) ] という。

問 1 上の文章の空欄 [ ① ] ～ [ ⑪ ] に最も適切な数式または数値を入れ、[ (ア) ] に適切な語句を入れよ。

問 2 式(13)において  $kL = \beta$ 、 $\alpha L = \gamma$  としたとき、図 2 に示すように横軸を  $\beta$ 、縦軸を  $\gamma$  とおいて、式(13)の関係式を図示せよ (グラフが横軸と交わる時の  $\beta$  の値も図中に記入すること)。但し、図示する領域は、 $0 \leq \beta < 2\pi$ 、 $0 \leq \gamma$  とする。

問 3 問 2 で図示されたグラフおよび式(3)、式(7)を参考にして、井戸の中に 3 つのエネルギー準位が存在する場合の井戸のポテンシャル  $V_0$  の範囲を  $L$ 、 $m$ 、 $\hbar$  を用いて式で表せ。但し、導出過程も示すこと。

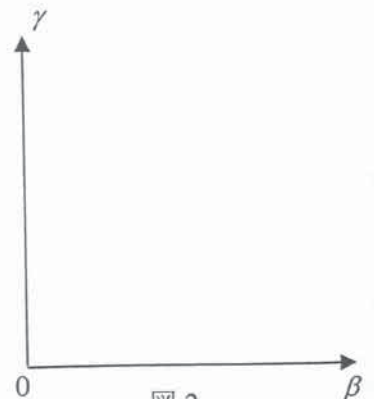


図 2

問題2 以下の〔I〕および〔II〕に答えよ。(40点)

〔I〕表1は金属カリウムの結晶格子、格子定数および、ホール係数についてそれぞれ示したものである。これについて以下の問1～問6に答えよ。但し、数値による解答が必要な場合は有効数字2桁で答えよ。また、電子の電荷量が必要であれば $-1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$  を使え。

表1. カリウムの諸要素

物質	結晶格子の名称	格子定数 $a [\text{nm}]$	*ホール係数 $R_H [\text{cm}^3/\text{C}]$
カリウム	体心立方格子	0.52	$-4.2 \times 10^{-4}$

\*AIP Handbook" 3<sup>rd</sup> ed. 1972 年版より

問1 カリウムの結晶格子が属する結晶系を何と言うか。また、この結晶系にはあと二種類のブラベー格子がある。その名称および単位格子中の格子点の数について答えよ。

問2 図1に示すように、平坦な表面を持つカリウム多結晶試料表面に対し、波長  $\lambda [\text{nm}]$  の X 線を角度  $\theta$  で入射し、試料表面から角度  $\theta$  で反射してくる X 線の強度を X 線検出器で観測する。ただし、入射および反射 X 線はともに紙面に沿っているものとする。この角度  $\theta$  の値を 0 度付近から次第に大きくしていくと、各結晶面での回折を反映して、ある特定の  $\theta$  において X 線の強い反射強度が得られる。このとき、カリウム (110) 結晶面によって反射強度が強くなる  $\theta$  の条件を求めよ。ただし、結晶面での X 線の格子点での反射は弾性的でその光子のエネルギーは変化しないものとし、また簡単のためカリウムの格子定数には  $a [\text{nm}]$  を用いよ。

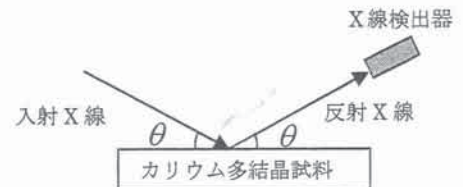


図1. カリウム多結晶試料表面への X 線の入射および反射の様子。

問3 問2のような反射条件を何というか。また、このような現象を生じさせるために必要な入射電磁波の条件を述べよ。

問4 この表に与えられたホール係数を使って、カリウム試料中の自由電子密度を求めよ。

問5 カリウム単結晶試料において、原子一個が一つの自由電子を結晶内に提供するとした場合のホール係数を求めよ。ただし、計算過程も示すこと。



問 6 図 2 は、異なるカリウム試料 A および B の温度 20 K 以下での電気抵抗を示す。これについて以下の(i)～(iii)の問いに答えよ。

- (i) 電気抵抗の温度に対する変化の割合は、2 つの試料 A および B で殆ど同じである。この電気抵抗の温度変化を与える主な散乱因子は何か。
- (ii) 電気抵抗の測定値を温度 0 K まで外挿した値を残留抵抗という。図からは、この残留抵抗の値が 2 つの試料 A および B で大きく異なっている様子がわかる。この結果から、試料 A、B についてどのようなことが言えるか。
- (iii) 上記(i)、(ii)のような電気抵抗の振る舞いを説明する法則を何と言うか。

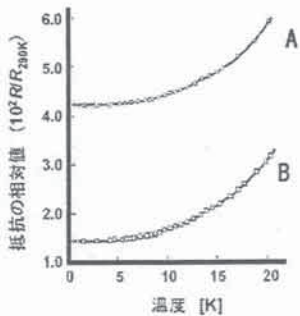


図 2. 温度 20 K 以下でのカリウムの電気抵抗。K. C. McDonald らによる。ただし、 $R/R_{290K}$  は温度 290 K の電気抵抗で規格化した値を示す。

[Ⅱ] 表 2 は、ある元素の第 1 イオン化エネルギーおよび第 2 イオン化エネルギーを示したものである。第 1 イオン化エネルギーと第 2 イオン化エネルギーについて説明せよ。また①から③の元素は各々、アルカリ金属、アルカリ土類金属または希ガスのいずれかに属する元素である。①から③に相当する元素を選択肢から選べ。

表 2. 元素のイオン化エネルギー (National Bureau of Standards Circular 467 より)

元素	①	②	③
第 1 イオン化エネルギー [eV]	21.56	7.64	5.14
第 2 イオン化エネルギー [eV]	62.63	22.67	52.43

{選択肢 : F、Na、Cu、Mg、Ne、H、Mn}

問題3 半導体に関する次の文章を読み、下記の問いに答えよ。(40 点)

ドナー(密度  $N_D$ )とアクセプタ(密度  $N_A$ )を有する自由電子密度  $n$  の  $n$  型半導体を考える。ただし、 $N_D \gg N_A$  である。イオン化して正に帯電したドナー密度を  $N_D^+$ 、イオン化して負に帯電したアクセプタ密度を  $N_A^-$  とする。また、ドナーにとらえられた電子の密度(イオン化していないドナー密度と同じ)を  $n_D$  とする。 $n_D$  および  $N_A^-$  はそれぞれ式(1)、式(2)になる。但し、 $k_B$  はボルツマン定数、 $T$  は絶対温度、 $\varepsilon_F$  はフェルミ準位、 $\varepsilon_c$  は伝導帯の下端のエネルギー、 $\varepsilon_v$  は価電子帯の上端のエネルギーである。また、 $\varepsilon_D$ 、 $\varepsilon_A$  はそれぞれドナーおよびアクセプタ準位であり、 $f_D(\varepsilon_D)$ 、 $f_A(\varepsilon_A)$  はそれぞれドナーとアクセプタを電子が占有する確率である。

$$n_D = N_D f_D(\varepsilon_D) = \frac{N_D}{\frac{1}{2} \exp((\varepsilon_D - \varepsilon_F)/k_B T) + 1} \quad (1)$$

$$N_A^- = N_A f_A(\varepsilon_A) = \frac{N_A}{2 \exp((\varepsilon_A - \varepsilon_F)/k_B T) + 1} \quad (2)$$

$\varepsilon_G = \varepsilon_c - \varepsilon_v$  とすると、この  $\varepsilon_G$  は [ (ア) ] の大きさを与える。電気的中性条件より、正孔密度を  $p$  とすると次式が成立する。

$$n + N_A^- = [ \quad \text{①} \quad ] \quad (3)$$

$N_D^+$  を  $N_D$  および  $f_D(\varepsilon_D)$  を用いて表すと

$$N_D^+ = N_D - n_D = N_D ( [ \quad \text{②} \quad ] ) \quad (4)$$

となる。またアクセプタ準位  $\varepsilon_A$  はドナー準位  $\varepsilon_D$  よりも低い位置にあるのでドナーの電子の一部はアクセプタに落ち込み、全てのアクセプタ準位は負に帯電していると考えられる。つまり、 $N_A^- = N_A$  とみなすことができる。仮定により  $n$  型半導体では  $N_D \gg N_A$  であるから、真性半導体 ( $n \cong p \gg N_D - N_A$ ) となるような温度領域を除くと  $n \gg p$  なる関係が成立する。

式(3)と式(4)において、 $p$  を無視して

$$n + N_A = N_D ( [ \quad \text{③} \quad ] ) \quad (5)$$

これより、

$$N_D - N_A - n = [ \quad \text{④} \quad ] \quad (6)$$

と、書くことができる。式(5)を式(6)で割ると

$$\frac{n + N_A}{N_D - N_A - n} = \frac{1}{2} \exp( [ \quad \text{⑤} \quad ] ) \quad (7)$$

となる。電子はボルツマン統計に従うと仮定すると、

$$n = N_c \exp\left(-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_F}{k_B T}\right) \quad (8)$$

となる。ここで  $N_c$  は伝導帯の [ (イ) ] である ( $N_v$  は価電子帯の [ (イ) ] である)。式(7)と式(8)から

$$\frac{n(n+N_A)}{N_D-N_A-n} = \frac{1}{2} N_c \exp\left(-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_D}{k_B T}\right) \quad (9)$$

となる。以下 A から D のような温度領域に分けて自由電子密度  $n$  の変化を考える。

- A. 非常に低温で、ドナー準位から伝導帯への電子の励起が少ないが、さらにアクセプタ密度に比べても電子密度が少ない場合、即ち  $N_A \gg n$  の場合を考える。このとき、式(9)は

$$[ \quad \textcircled{6} \quad ] \quad (10)$$

と近似されるから、電子密度  $n$  は次式(11)となる。

$$n = [ \quad \textcircled{7} \quad ] \quad (11)$$

- B. 低温ではあるが、 $N_D \gg n \gg N_A$  となる場合、式(9)は次のように近似される。

$$[ \quad \textcircled{8} \quad ] \quad (12)$$

この温度領域で電子密度  $n$  は、次式(13)となる。

$$n = [ \quad \textcircled{9} \quad ] \quad (13)$$

上記の A および B の電子密度が温度とともに変化する温度領域は [ (ウ) ] 領域と呼ばれる。

- C. 高温で  $n \approx N_D - N_A$  の場合、温度が上昇すると、式(9)右辺の指数関数は 1 に近づくから、式(9)の右辺はほぼ [  $\textcircled{10}$  ] になる。このとき、ドナー電子のうちアクセプタを帯電させたものを除けば全て伝導帯に励起されている状態になっている。このことからこの温度領域を [ (エ) ] 領域と呼ぶ。

- D. 非常に高温の場合、さらに温度が上昇して、価電子帯の電子が伝導帯に励起され、電子密度  $n$  および正孔密度  $p$  がドナーおよびアクセプタ密度より大きくなり、 $n \cong p \gg N_D - N_A$  と考えてよい。このとき、電子密度  $n$  は

$$n \cong p \cong [ \quad \textcircled{11} \quad ] \quad (14)$$

で与えられ、この温度領域は [ (オ) ] 領域と呼ばれる。

問 1 文章中の [ (ア) ] ~ [ (オ) ] に当てはまる語句を答え、[  $\textcircled{1}$  ] ~ [  $\textcircled{11}$  ] には適切な数式を記せ。

問 2 横軸を  $1/k_B T$ 、縦軸を  $\log n$  として電子密度と温度の関係をグラフに示せ。また図中に A から D の温度領域を示し、グラフの傾きも明記せよ。



問題4 次の誘電体に関する文章の空欄〔ア〕～〔ス〕に適切な語句を、〔①〕～〔④〕に適切な式を入れよ。また、〔a〕～〔c〕は、適切な語句を括弧内から1つ選択せよ。(40点)

〔Ⅰ〕誘電体の巨視的物理量である比誘電率(以下誘電率)と、物質中の各構成要素に着目した微視的な分極率との関係式として知られている〔ア〕の式を以下の手順で導く。

印加電界 $\vec{E}$ によって分極 $\vec{P}$ が生じる誘電体を考える。微視的な観点で、誘電体が $j$ 種の分極起源をもち、それぞれの起源 $i$  ( $i=1, 2, \dots, j$ ) の分極率を $\alpha_i$ 、密度を $N_i$ とする。起源 $i$ に一定の局所電界 $\vec{E}_{\text{loc}}$ が作用すると、双極子モーメント $\vec{\mu}_i$

$$\vec{\mu}_i = [ \text{①} ]$$

が誘起される。分極 $\vec{P}$ は分極率 $\alpha_i$ などを用いて

$$\vec{P} = [ \text{②} ]$$

となる。ここで、真空中の誘電率を $\epsilon_0$ 、局所電界として $\vec{E}_{\text{loc}} = \vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}$ を仮定した場合、誘電率 $\kappa$ を用いて〔ア〕の式

$$[ \text{③} ]$$

が得られる。

〔Ⅱ〕アルカリハライド結晶に振動電界が印加されると、結晶内の隣り合う〔イ〕が互いに反対方向に変位して、振動双極子モーメントが誘起される。このような振動は電磁波の〔a〕赤外線・可視・紫外線領域に吸収を生じることから、〔ウ〕フォノンとよばれる。また、〔ウ〕フォノンの横波の角周波数を $\omega_T$ 、縦波の角周波数を $\omega_L$ とし、静電誘電率を $\kappa_0$ 、 $\omega \gg \omega_T$ なる角周波数に対する誘電率を $\kappa_\infty$ とすると、これらは〔エ〕の式として知られる

$$[ \text{④} ]$$

の関係をもつ。なお、 $\kappa_\infty$ は〔ウ〕誘電率ともよばれ、〔オ〕分極が関与している。

〔Ⅲ〕有機分子 $\text{CH}_4$ 、 $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 、 $\text{CCl}_4$ の中で、〔カ〕は〔キ〕モーメントを持つことから、〔ク〕性分子とよばれている。これらの分子の低密度の気体は、電界印加に対して〔キ〕モーメントが電界の方向に向こうとする傾向が生じ、結果として〔ケ〕分極が生じる。この時、気体の絶対温度が高くなると、静電誘電率は〔b〕低く・高くなる。



[IV] ペロブスカイト族で有名なチタン酸バリウム ( $\text{BaTiO}_3$ ) は、結晶温度が 393K に上昇すると、[ (コ) ] 相から [ (サ) ] 相に相転移し、自発分極を失う。[ (サ) ] 相において、誘電率は [ (シ) ] の法則で表される温度依存性を示し、結晶温度が高くなるほど [ (c) 低く・高く ] なる。また、[ (コ) ] 相の結晶内部では、自発分極の向きが領域によって異なっている場合があり、それらの領域は一般的に [ (ス) ] とよばれている。

問題5 次の磁性に関する文章および表の [ (ア) ] ~ [ (タ) ] に適する語句、[ ① ] ~ [ ⑪ ] に適する数式または数値を記入して、それぞれを完成せよ。ただし、温度を  $T$ 、比例係数を  $C$  とし、その他必要な物性定数には適当な記号を定義して用いよ。(40 点)

[ I ] ある 1 個の原子の中の電子系がもつ磁気双極子モーメントを求めるには、全電子の軌道角運動量  $L$  と全スピン角運動量  $S$  と全角運動量  $J$  を知らなければならない。不完全殻をもつ原子において、基底状態の電子軌道を決めるには、次のフントの規則を適用すればよい。フントの規則は、

- (1) 全スピン角運動量の大きさ  $S$  が [ (ア) ] となるようなスピン配置が、最も安定である。
- (2)  $S$  が [ (ア) ] のものが複数ある場合には、軌道角運動量  $L$  が [ (イ) ] の軌道配置が最も安定である。
- (3) 電子殻が電子で半分以下が占められているときは全角運動量  $J = [ \text{①} ]$  となり、電子殻が電子で半分以上占められているときは全角運動量  $J = [ \text{②} ]$  になる。

	3d 軌道	全スピン角運動量 $S$	軌道角運動量 $L$	全角運動量 $J$
$\text{Cr}^{2+}$	$3d^4$	[ ③ ]	[ ④ ]	[ ⑤ ]
$\text{Fe}^{2+}$	$3d^6$	[ ⑥ ]	[ ⑦ ]	[ ⑧ ]

[ II ] Fe、Co、Ni、Mn などの原子の 3d 電子殻は完成されておらず、隣接する原子のスピンに関係する量子力学的な相互作用が働き、スピンを [ (ウ) ] あるいは [ (エ) ] にしようとする。この相互作用は [ (オ) ] と呼ばれる。スピン  $\vec{S}_i$  と  $\vec{S}_j$  を持つ原子  $i$  と原子  $j$  の間の相互作用のエネルギーは、交換積分と呼ばれる量  $J_e$  を用いて、 $E = -2J_e ([ \text{⑨} ])$  の形で表わされる。これを [ (カ) ] モデルという。

$J_e$  が正の場合は、 $\vec{S}_i$  と  $\vec{S}_j$  が [ (ウ) ] の状態がエネルギーの低い安定状態で、原子のスピンは [ (キ) ] 向きに配列する。このような磁性を [ (ク) ] という。 $J_e$  が大きいほどスピンを [ (ウ) ] にそ

ろえる力が強く、[ (ケ) ]温度が高くなる。磁化の磁界依存性は[ (コ) ]を示し、強い外部磁界では、その磁化は[ (サ) ]を示す。温度が高く[ (ク) ]体が常磁性相に相転移した場合、磁化率  $\chi_m$  の温度変化は、 $\chi_m$ =[ ⑩ ]の式で表わされる。

$J_e$  が負の場合は、 $\vec{S}_i$  と  $\vec{S}_j$  が[ (エ) ]の状態がエネルギーの低い安定状態で、隣接する原子のスピンが[ (シ) ]向きに配列する。このような磁性を[ (ス) ]という。スピンは[ (オ) ]のために[ (エ) ]に整列しており、外部磁界が印加されても容易には向きを変えない。温度が上昇するとスピンの配列の程度が低下して、ある温度に達すると原子の熱運動がスピンの配列を破壊する。この温度を[ (セ) ]温度という。磁化率はこの温度で、[ (ソ) ]を示す。また、この温度以上では、磁化率の温度変化は、 $\chi_m$ =[ ⑪ ]の式で表わされる。

スピンは[ (エ) ]に配列するが、隣接する原子の磁気モーメントの大きさが異なる場合には、打ち消し合いが不完全で自発磁化が残る。このような磁性を[ (タ) ]という。