

# 物 性 工 学

## 問題 I

図 1 のような一辺が  $L$  の立方体の三次元量子箱に閉じ込められた有効質量  $m$  の電子を考察する。

電子のポテンシャルは、 $V(x, y, z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$ 、

$$V_x(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0) \\ 0 & (0 \leq x \leq L) \\ \infty & (x > L) \end{cases}, \quad V_y(y) = \begin{cases} \infty & (y < 0) \\ 0 & (0 \leq y \leq L) \\ \infty & (y > L) \end{cases}, \quad V_z(z) = \begin{cases} \infty & (z < 0) \\ 0 & (0 \leq z \leq L) \\ \infty & (z > L) \end{cases}$$

であるとする。

このとき、以下の設問に答えよ。

I - 1 ) 波動関数を  $\psi(x, y, z)$ 、エネルギー固有値を  $E$  として、

Schrödinger 方程式を書け。

I - 2 ) 波動関数に対する境界条件を書け。

I - 3 ) 波動関数を  $\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$  のように変数分離

するとこの Schrödinger 方程式は解ける。量子箱の外側及び内側での  $X(x)$ 、 $Y(y)$ 、 $Z(z)$  を書け。

I - 4 ) エネルギーの固有値を表す式を書け。

I - 5 ) 第一励起状態は何重に縮退しているか？

I - 6 ) 基底状態と第一励起状態のエネルギー差  $\Delta E$  を表す式を書け。

I - 7 ) 一般に  $\Delta E$  が、室温の熱エネルギーと同程度以上になると、量子効果が顕著に現れる。 $\Delta E$  が室温のエネルギーと等しくなるときの  $L$  の値を計算せよ。但し、電子は有効質量  $m = 0.663m_0$  ( $m_0$  は電子の質量で、 $m_0 = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$ ) を持っているとし、室温は  $T = 300 \text{ K}$  とせよ。プランク定数は  $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$ 、ボルツマン定数は  $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$  で与えられる。 $L$  の単位を  $\text{nm}$  とし有効数字 1 桁で答えよ。尚、解答欄には、計算の途中経過も示せ。

I - 8 ) I - 7 ) で得た数値と、近年話題となっているテクノロジーとの関連性について 100 字程度で述べよ。

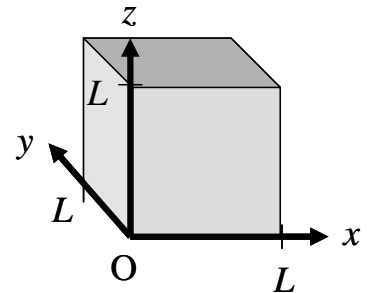


図 1 三次元量子箱

## 問題 II

結晶による X 線の回折現象は、Miller 指数が  $(hkl)$  の結晶面による Bragg 反射として記述できる。ところが、例えば体心立方格子の場合、 $(100)$ 、 $(300)$ 、 $(111)$  面等に対応する回折線は現れずに、 $(200)$ 、 $(110)$  面等に対応する回折線が現れる。これは、Bragg 反射の条件以外にも回折線の強度に対する規則性（選択則）が存在するからである。一般に回折線の強度は、以下のような構造因子  $S(hkl)$  の絶対値の 2 乗に比例する。

$$S(hkl) = \sum_j f_j \exp[-i2\pi(x_j h + y_j k + z_j l)]$$

ここで、 $f_j$  は単位胞内の  $j$  番目の原子の原子散乱因子である。また、結晶の基本並進ベクトルを  $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{b}$ 、 $\mathbf{c}$  とすると単位胞内の  $j$  番目の原子位置は、 $\mathbf{r}_j = x_j \mathbf{a} + y_j \mathbf{b} + z_j \mathbf{c}$  と表される。 $\sum_j$  は単位胞に含まれる原子についての和である。

以上を踏まえて、以下の設問に答えよ。

II - 1 ) 1 種類の原子のみで構成される体心立方格子について、 $S(hkl)$  の式を求めよ。但し、単位胞は、立方体を用いよ。回答には導出の過程も書け。

II - 2 ) II - 1 ) の結果を考察し、 $h$ 、 $k$ 、 $l$  がどのような条件を満たす時、回折線が現れる (強度  $\neq 0$ ) か、消える (強度 = 0) か、を述べよ。

以上