平成１８年度　大学院博士前期課程　入学試験問題

選択科目：　量子電子物性

平成１７年８月２３日（火）　13：00〜16：00

問題１　次の問１から問３に答えよ。なお、問題文中に与えられていない記号や文字を用いる場合はそれらについても説明せよ。（４０点）

問１　以下について答えよ。

(a)　電子は粒子性と同時に波動性を持つ。運動量 $\vec{p}=(p_x,p_y,p_z)$ およびエネルギー ε をそれぞれ波数ベクトル $\vec{k}=(k_x,k_y,k_z)$ および角周波数 ω を使って表せ。

(b)　光は波動性と同時に粒子（光子）としての性質をもつ。この光の粒子性を示す実験結果に光電効果があるが、これについて説明せよ。

問２　量子力学では観測可能な物理量は対応する演算子の固有値として表す。いま 2 つの観測可能な物理量 A、B に対する演算子 $\hat{A}$ および $\hat{B}$ の交換子 $[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$ を考える。この交換子を任意の関数 $\Psi(x,y,z,t)$ に作用させたとき、その値が 0 にならない場合、これら 2 つの物理量の間には不確定性関係が成り立つことが知られている。例えば、x 軸方向の一次元運動をする粒子について考えた場合、位置 x と運動量 p_x、および時間 t とエネルギー ε はそれぞれお互いに不確定性関係にある。これら物理量に対する演算子をそれぞれ $\hat{x}$、$\hat{p}_x$、$\hat{t}$、$\hat{\varepsilon}$ とするとき、以下について答えよ。

(a)　演算子 $\hat{x}$、$\hat{p}_x$、$\hat{t}$、$\hat{\varepsilon}$ を具体的に表せ。

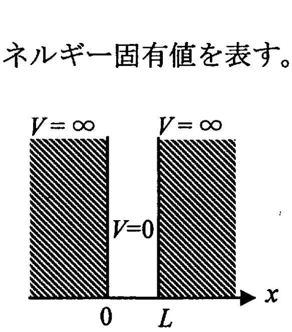
(b)　$[\hat{x},\hat{p}_x]\Psi(x,t)$ および $[\hat{t},\hat{\varepsilon}]\Psi(x,t)$ を計算し最も簡単な数式で表せ。ただし、C を定数として $\Psi(x,t)=C\exp[i(k_x x-\omega t)]$ とする。

問３　一般に、三次元空間のポテンシャル場 $V(x,y,z)$ の中で運動する粒子（質量 m）の波動関数を $\Phi(x,y,z)$ とするとき、満たすべきシュレーディンガー方程式は次式で与えられる。

$$\left[\frac{\hat{p}_x{}^2+\hat{p}_y{}^2+\hat{p}_z{}^2}{2m}+V(x,y,z)\right]\Phi(x,y,z)=\varepsilon\Phi(x,y,z)$$

ただし、$\hat{p}_x$、$\hat{p}_y$、$\hat{p}_z$ はそれぞれ x、y、z 方向の運動量演算子、ε はエネルギー固有値を表す。

一次元空間において図のような無限大の高さをもつポテンシャル障壁（$V=\infty$）に囲まれた空間（$V=0$）で運動する粒子（質量 m）があるとき、以下について答えよ。



(a)　この粒子の波動関数を $\phi(x)$ とするとき、満たすべきシュレーデ

ィンガー方程式および$\phi(x)$が満足すべき境界条件を示せ。

(b) (a) のシュレーディンガー方程式を解くと、そのエネルギーは量子化されていることがわかる。適当な量子数nに対応する状態のエネルギー固有値ε_nと波動関数$\phi_n(x)$を求めよ。

(c) (b) で求めた波動関数の規格化条件を示し、実際に規格化波動関数を求めよ。

(d) (c) で求めた波動関数を使って位置の期待値を求めよ。

(e) (c) で求めた波動関数を使って運動量の期待値を求めよ。また、得られた結果から粒子の運動についてどのようなことがいえるか。

(f) この粒子について考えた場合、その位置と運動量の間には不確定性関係が成立することを示せ。

問題2 次の文章を読んで、以下の問に答えよ。（４０点）

電子密度nの金属結晶中において、有効質量m^*、電荷$-e$（<0）の電子の運動を考える。電子は、外部電界が印加されていない状態では、概ねフェルミ速度v_Fでブラウン運動している。これに対して、外部から電界$\vec{E}$が印加された状態では、電子はドリフト運動する。この時、電子の速度を$\vec{v}$、n個の電子の平均速度を$\langle\vec{v}\rangle$、平均散乱時間をτとして、

$$m^*\frac{d\langle\vec{v}\rangle}{dt}=-e\vec{E}-\frac{m^*\langle\vec{v}\rangle}{\tau}$$

の関係が成り立つ。移動度μは、単位電界が印加されたときの電子の平均速度（大きさ）と定義されるので、

$$\mu=(\quad ① \quad)$$

と記述できる。

一方、電界が一定で、かつ、オームの法則が成り立つ状態において、金属中を流れる電流密度$\vec{J}$は

$$\vec{J}=(-e)\,n\langle\vec{v}\rangle=\sigma\vec{E}$$

の関係を満たすことから、導電率σは

$$\sigma=(\quad ② \quad)$$

と記述できる。

外部から角周波数ωの交流電界$\vec{E}(t)=\vec{E}_0\exp(-i\omega t)$が印加されたとすると、$\langle\vec{v}(t)\rangle=\langle\vec{v}_0\rangle\exp(-i\omega t)$が成り立つとして、

$$\langle\vec{v}(t)\rangle=-(\quad ① \quad)\times(\quad ③ \quad)\vec{E}$$

より、動的な導電率$\sigma(\omega)$は

$\sigma(\omega) =$ (②) × (③)

となる。これより、複素導電率の実数部σ_{RE} および虚数部σ_{IM} は、

$\sigma_{RE}(\omega) =$ (②) × (④), $\sigma_{IM}(\omega) =$ (②) × (⑤)

と記述できる。ここで、複素導電率は、印加電界と流れる電流の関係において、位相差が生じることを意味している。

金属の抵抗は有限であり、電流が流れると発熱する。従って、流すことのできる電流には制限がある。一方、金属の多くは、極低温にすると超伝導状態に転移し、抵抗が零となる。超伝導材料は、大きな電流が必要とされる電磁石などの線材として広く普及している。

問１　上の文章の空欄（ ① ）～（ ⑤ ）を式で埋めよ。

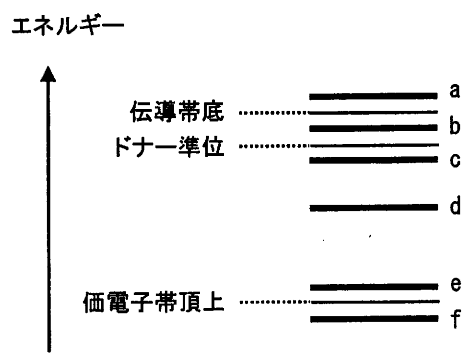
問２　有効質量、ブラウン運動、ドリフト運動、および超伝導状態を簡潔に説明せよ。

問３　交流電界 $\vec{E}(t) = \vec{E}_0 \exp(-i\omega t)$ が印加されたとき、同様にして比抵抗の実数部と虚数部を求め、散乱過程や周波数等と、どのような関係にあるか説明せよ。

問題３　次の半導体に関する文章を読んで、以下の問に答えよ。（４０点）

ただし、半導体の電子密度を n、正孔密度を p、真性電子密度を n_i、ドナー密度を N_d（一定値）、アクセプター密度を N_a（一定値）、誘電率を κ とする。またボルツマン定数を k_B、絶対温度を T、電子の電荷の絶対値を e とする。尚、ｎ型半導体ではドナー不純物のみ、ｐ型半導体ではアクセプター不純物のみを含むものとする。

問１　電子が出払い領域にあり縮退していないｎ型 Si において、真性フェルミエネルギー E_i 及びフェルミエネルギー E_{fn} として最も ふさわしいものを、下記概念図中の準位ａからｆより選択せよ。



問２　次の文章中の空欄（　①　）～（　④　）に適当な数式を入れよ。

電子が出払い領域にあるｎ型半導体においては、電子密度 n はドナー密度 N_d に一致するとみなせる。また、ボルツマン分布が適用でき、電子密度 n は

$$n = n_i \exp[\,(\quad ①\quad)\,]$$

と表せるものとする。この関係式を用いて、フェルミエネルギー E_{fn} と真性フェルミエネルギー E_i の差を、電子密度 n を使わないで表すと

$$E_{fn} - E_i = (\quad ②\quad)$$

となる。ｐ型半導体も同様の手順で、真性フェルミエネルギー E_i とｐ型半導体のフェルミエネルギー E_{fp} の差を求めることができ、

$$E_i - E_{fp} = (\quad ③\quad)$$

となる。これらのｎ型半導体とｐ型半導体で段階型 pn 接合を作製する。拡散電位 V_d（正の値）は、$E_{fn} - E_{fp} = eV_d$ なる関係より、

$$V_d = (\quad ④\quad)$$

となる。但し、ここでの E_{fn} 及び E_{fp} は接合前の値を表す。

問３　段階型 pn 接合において、接合後のｎ型半導体のフェルミエネルギー E_{fn} とｐ型半導体のフェルミエネルギー E_{fp} の差を求めよ。

問４　次の文章を読んで、下記の（ａ）および（ｂ）に答えよ。

段階型 pn 接合において、ｎ型領域の空乏層厚を x_n（x_n は正の値）とする。また、ｐ型領域の空乏層厚を x_p（x_p は正の値）とする。電位を V で表すと、$0 \leqq x \leqq x_n$ の範囲におけるポアソンの方程式は

$$d^2V/dx^2 = (\quad ⑤\quad)$$

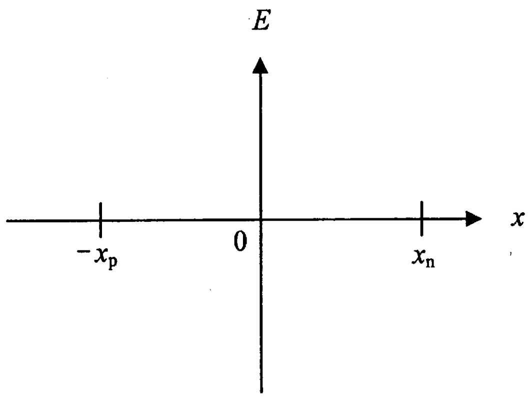
となる。$-x_p \leqq x \leqq 0$ の範囲におけるポアソンの方程式は

$$d^2V/dx^2 = (\quad ⑥\quad)$$

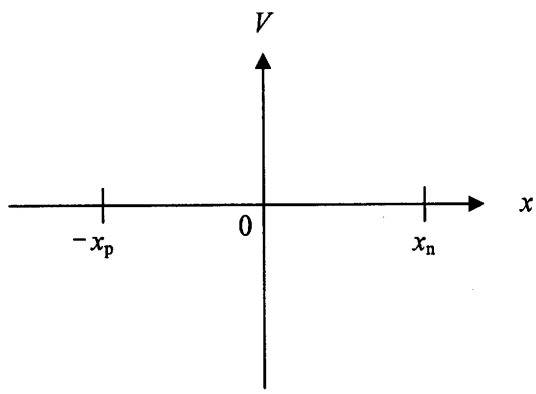
となる。電界 E は $E = -dV/dx$ で与えられる。電界強度(絶対値)の最大値 E_{max} は（　⑦　）になる。

（ａ）　文章中の空欄（　⑤　）～（　⑦　）に適当な数式を入れよ。$x = -x_p,\ 0,\ x_n$ での境界条件は、物理現象に基づき各自で考えること。

（ｂ）　ｎ型とｐ型の両領域における電界 E の値を右の図に書き入れ、図の全てを解答用紙に書き写せ。



問５　問４の段階型 pn 接合の電位 V の値を、右の図に書き入れよ。ただし、$x=0$ での電位を 0 とする。また、拡散電位 V_d を図に書き示せ。図の全てを解答用紙に書き写せ。



問６　問４の段階型 pn 接合において、N_a と N_d の値がそれぞれ $1\times10^{15}\,\mathrm{cm}^{-3}$ および $1\times10^{16}\,\mathrm{cm}^{-3}$ ならば、x_p と x_n はどちらが大きいか。また、その比はいくらか。

問７　pn 接合よりなるダイオードの電圧 V と電流 I の関係を、飽和電流 I_s を使って数式で表せ。次に、無バイアス時の電流値に注意して、電圧を横軸、電流を縦軸にしてグラフに示せ。電圧と電流は共に順方向を正とする。また、飽和電流 I_s をグラフに書き示せ。

問題４　次の分極に関する文章を読んで、以下の問に答えよ。（４０点）

[Ⅰ] 原子は、正電荷をもった原子核とそれを雲のようにとりまく負電荷の電子から成っていると考えることができる。簡単のため $+Ze$ の正電荷をもった原子核のまわりを、半径 r_0 の球内に一様に分布した負電荷 $-Ze$ の電子がとりまいているものとする。静電界を印加すると電子分布の中心が O から O' へ変位する。その変位の大きさ x が十分に小さいとすると、原子核をとりまく電子のうち中心 O'、半径 x の球内にある電子は原子核に力を及ぼすが、球の外側に分布する電子は打ち消しあって原子核に力を及ぼさない。したがって、このときの電子と原子核との間に働くクーロン力は、真空中の誘電率 ε_0 を用いて

$$f = (\quad ① \quad)\, x$$

となり、変位 x に比例する。一方、この原子に作用する電界を E_{loc} とすると、電子と原子核との間に働くクーロン力 f は、電界から受ける力と等しいから、変位 x は E_{loc} を用いて、

$$x = (\quad ② \quad)$$

と表される。

この電子の変位によって双極子モーメント μ が誘起されるが、一般に μ は E_{loc} に比例し、その比例係数を（　③　）と呼ぶ。この場合の（　③　）α_1 は、電子雲の半径 r_0 を用いて

$$\alpha_1 = (\quad ④ \quad)$$

と表すことができ、原子が大きくなるにつれて大きくなることがわかる。

以上のような原理で誘起される分極を（　⑤　）分極と呼ぶ。

[II] イオン結晶に電界を印加すると、正イオンは電界方向に負イオンは電界と反対方向に変位して、イオン間に相対変位が発生する。この相対変位によって双極子モーメントが誘起され、電界と平行な方向に分極が発生する。このような原理で誘起される分極を（　⑥　）分極と呼ぶ。いま、結晶格子が$\pm Ze$の電荷を持った二種類のイオンからなっており、単位体積にN_2個のイオン対が存在するとする。このイオン結晶に電界E_{loc}が作用して、正負のイオンが電界と同じ向きにそれぞれu_+、u_-だけ変位し、また、それらのイオン自体の（　⑤　）分極の（　③　）がそれぞれα_+、α_-であるとすると、このとき発生する分極の大きさは

$P_2 =$（　⑦　）

と表すことができる。

[III] 永久双極子モーメントμ_0と電界E_{loc}との相互作用により発生する分極を、（　⑧　）分極と呼ぶ。この分極の大きさは、電気的なエネルギー$\mu_0 E_{\mathrm{loc}}$と熱的なエネルギー$k_{\mathrm{B}}T$とのバランスで決まる。ここで、k_{B}はボルツマン定数、Tは絶対温度である。そこで、$t = \dfrac{\mu_0 E_{\mathrm{loc}}}{k_{\mathrm{B}}T}$とおくと、電界$E_{\mathrm{loc}}$によって誘起される（　⑧　）分極$P_3$は、$P_3 = N_3\mu_0 L(t)$で与えられる。ここで、$N_3$は、単位体積あたりの永久双極子モーメントの数で、$L(t)$は、$L(t) = \coth t - \dfrac{1}{t}$で、（　⑨　）関数と呼ばれる。ここで、$\coth t = 1/t + t/3 - t^3/45 + \cdots$であり、また、一般に、極低温をのぞいて$t \ll 1$であることを考えると、（　⑧　）分極の（　③　）$\alpha_3$は、

$\alpha_3 =$（　⑩　）

で与えられる。

問１　上の文の空欄（　①　）～（　⑩　）に、適当な語句あるいは数式を入れよ。

問２　（　⑧　）分極の原理を図を用いて簡潔に説明せよ。

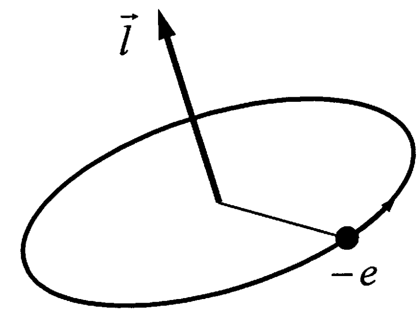
問３　（　⑤　）分極、（　⑥　）分極、（　⑧　）分極の温度依存性について簡潔に説明せよ。

問４　物質に周波数ωの交流電界を印加した場合、（　⑤　）分極、（　⑥　）分極、（　⑧　）分極に基づく誘電率の実数部κ'と虚数部κ''の周波数依存性の概略図を示せ。

問題５　次の磁性に関する文章を読んで、以下の問に答えよ。（４０点）

静磁界に対する物質の磁性の担い手は主に電子であり、磁性は電子の運動に起因している。その運動には軌道運動と内部自由度であるスピンとがあり、これらの運動が磁気モーメントを誘起

している。外部静磁界を与えたとき、磁気モーメントが外部磁界方向に応答して、常磁性体では外部磁界方向と（　①　）に磁化が現れる。一方、反磁性体では外部磁界方向と（　②　）に磁化が現れる。



ここで、原子内にある１個の電子の軌道運動に基づく軌道磁気モーメントについて考えよう。右図に示すように、電荷 $-e$ (<0)、質量 m の電子が半径 r の円運動をしているとして扱える。今、その角周波数を ω とすると、この環状電流 I は（　③　）であるから、軌道磁気モーメント $\vec{\mu}_{\mathrm{m}}$ の大きさは（　④　）と表され、その方向は右ねじの法則で電流と関係づけられる。一方、軌道運動の角運動量 $\vec{l}$ の大きさは（　⑤　）であるから、$\vec{\mu}_{\mathrm{m}}$ は角運動量 $\vec{l}$ を用いて（　⑥　）と書ける。

量子力学によれば、軌道角運動量 $\hbar\vec{l}$ を用いて軌道磁気モーメント $\vec{\mu}_l$ は、$\vec{\mu}_l = -\frac{e\hbar}{2m}\vec{l}$ と書き表される。もう一つの電子の角運動量であるスピンは $\hbar\vec{s}$ で表される。このスピンに付随した電子固有の磁気モーメントはスピン磁気モーメント $\vec{\mu}_s$ と呼ばれ、$\vec{\mu}_s = -\frac{e\hbar}{m}\vec{s}$ の関係にある。また、１個の電子の全角運動量ベクトル $\vec{j}$ は $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ と書き表される。

いくつかの電子をもっている原子の場合には、ふつう、まず各電子の $\vec{l}$ をベクトル的に合成して $\vec{L}$ をつくり、$\vec{s}$ もそれぞれベクトル的に合成して $\vec{S}$ をつくる。ついで、この両者を合成して全角運動量ベクトル $\vec{J}$ をつくる。したがって、$\vec{J}$ は $\vec{L}$ と $\vec{S}$ とを用いて、（　⑦　）と表される。一方、原子の磁気モーメント $\vec{\mu}$ は、$\vec{L}$ を用いて表される磁気モーメントと $\vec{S}$ で表されるそれとのベクトル的な合成となる。それゆえ、原子の磁気モーメント $\vec{\mu}$ はこの $\vec{L}$ と $\vec{S}$ とを用いると（　⑧　）と書き表される。

問１　説明文中の空欄（　①　）と（　②　）に該当する適切な語句を、空欄（　③　）～（　⑧　）には数式を入れて文章を完成せよ。

問２　遷移金属元素である Cr は不完全殻を持っており、そのイオンは磁性を担う。クロムカリみょうばんでは、Cr^{3+} が磁気モーメントを持ち、$(3d)^3$ である。フントの規則を適用して、その基底状態の電子配置と $\vec{S}$、$\vec{L}$ および $\vec{J}$ の各量子数（角運動量の大きさを定める量子数）S、L および J を求めよ。

問３　クロムカリみょうばんはキュリー型常磁性を示す。固有磁気モーメントをもつ原子を含んだ物質では、強磁性、反強磁性およびフェリ磁性が現れる。これら４種類の違いを磁気モーメントの観点から述べよ。

問４　希ガス原子は固有の（磁界が０の時でも存在するという意味での）磁気モーメントを持たない。電子配置 $(1s)^2(2s)^2(2p)^6$ を持つ Ne を例にとり、$\vec{S}$ と $\vec{L}$ の各量子数（角運動量の大きさ

を定める量子数）S および L を示して説明せよ。

問5　原子に磁界（磁束密度の大きさ B）を加えた時の、原子核の周りを回る電子の運動は、$B=0$ の時の運動に角速度 $\omega_{\mathrm{L}}=\dfrac{e}{2m}B$ の回転運動（ラーマの歳差運動）を重ねたものとして扱える。

（a）　1個の電子によるラーマの歳差運動に基づいたループ電流を求めよ。

（b）　（a）の結果を基に、Z 個の電子を持つ原子の磁気モーメントを求めよ。新たな文字（変数）が必要であれば定義して使用すること。

（c）　（b）の結果を基に、希ガス原子は反磁性を示すことを説明せよ。