

平成18年 8 月22日 (火)

13:00~16:00

平成 19 年度大学院博士前期課程入学試験

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、以下のように問題毎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良い。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. 問題用紙はこの頁を除いて8頁ある。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揃え、監督者の指示を待つこと。

問題1 次の文章を読んで、以下の問に答えよ。

(40点)

[I] 前期量子力学を時系列でたどる。1900年にプランクは「プランクの輻射公式」とよばれる、(①)のスペクトル分布を表す式(1)を提案した。

$$I(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu}{\exp(h\nu/kT) - 1} \nu^2 \quad (1)$$

ここで、 ν は周波数、 c は光速、 k はボルツマン定数、 T は絶対温度である。定数 h はプランク定数と呼ばれ、量子力学の普遍定数となっている。式(1)はエネルギーが量子で成り立っているという仮説を立てるとつじつまが合う。これをもとに光量子仮説を提案したのは(②)である。(②)は、光が波としての性質の他に粒子としての性質も備えていると考え、光のエネルギー ε と周波数 ν について式(2)を仮定し、(③)の現象を説明した。

$$\varepsilon = (\text{④}) \quad (2)$$

この二重性が電子のような物質粒子に対しても成り立つと考えたのが(⑤)であり、運動量の大きさ p と物質波の波長 λ との関係を次式で表した。

$$p = (\text{⑥}) \quad (3)$$

[II] 区間 $[0, a]$ に完全に閉じ込められている1次元の量子力学的粒子の運動について考える($a > 0$)。その粒子の時間に依存しない波動関数を $\varphi(x)$ とし、区間 $[0, a]$ を領域(i)、それ以外を領域(ii)と呼ぶことにする。また、領域(i)内のポテンシャルは一定で0とする。

この場合の $\varphi(x)$ に関する境界条件は次の2式で表される。

$$\varphi(0) = 0 \quad (4)$$

$$\varphi(a) = 0 \quad (5)$$

また、シュレーディンガー方程式を満たす $\varphi(x)$ は、領域(i)では次式で与えられる。

$$\varphi(x) = A \exp(ipx/\hbar) + B \exp(-ipx/\hbar) \quad (6)$$

ただし、 A 、 B は定数、 p は実数である。なお、 $\hbar = h/2\pi$ である。式(4)及び式(5)の境界条件に式(6)を適用すると、それぞれ

$$(\text{⑦}) = 0 \quad (7)$$

$$(\text{⑧}) = 0 \quad (8)$$

となる。また、領域(ii)における波動関数は

$$\varphi(x) = (\text{⑨}) \quad (9)$$

であるので、波動関数の規格化条件は有限範囲の積分を用いて、次式で表される。

$$(\text{⑩}) = 1 \quad (10)$$

これらより、領域(i)における波動関数を求めると、次式で表すことができる(証明不要)。

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (11)$$

[Ⅲ] 量子力学では物理量は演算子の期待値として表される。例えば、 x 方向の運動量演算子を \hat{p}_x 、シュレーディンガー方程式を満たす1次元波動関数を $\phi(x)$ とすると、 \hat{p}_x の期待値 $\langle \hat{p}_x \rangle$ 及び \hat{p}_x^2 の期待値 $\langle \hat{p}_x^2 \rangle$ を、 $\phi(x)$ を用いて表すと、

$$\langle \hat{p}_x \rangle = (\text{⑪}) \quad (12)$$

$$\langle \hat{p}_x^2 \rangle = (\text{⑫}) \quad (13)$$

となる。ただし、 \hat{p}_x を微分形式で表すと、

$$\hat{p}_x = (\text{⑬}) \quad (14)$$

である。

[Ⅳ] 図 1.1 のように定義される基本ベクトル \vec{a} 、 \vec{b} 、 \vec{c} とそれらのなす角度 α 、 β 、 γ で表される単位格子を持つ結晶系について考える。 \vec{a} 、 \vec{b} 、 \vec{c} の絶対値をそれぞれ a 、 b 、 c とすると、例えば $a=b \neq c$ かつ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ の場合の結晶系は(⑭)と呼ばれる。

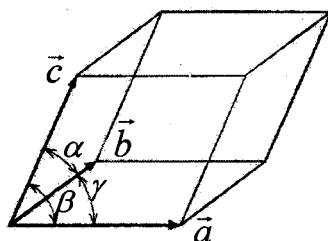


図 1.1

- 問1 上の文の空欄(①)～(⑭)に、適当な語句あるいは数式を入れよ。
- 問2 [Ⅱ]で定義されているポテンシャルは何と呼ばれるか。
- 問3 式(7)及び式(8)を用いて、物理的に意味のある p ($p > 0$)を求めよ。ただし導出過程を書くこと。
- 問4 [Ⅱ]で定義されているポテンシャル下で運動する粒子の $\langle \hat{p}_x^2 \rangle$ を、式(11)を用いて計算し最も簡単な形で表せ。
- 問5 結晶面を指定するのにミラー指数が用いられる。図 1.1 で示される結晶系について、(221)面を図示せよ。なお、ベクトル \vec{a} 、 \vec{b} 、 \vec{c} との関係が分かるように図示すること。
- 問6 固体(単結晶)は構成原子の結合の種類で分類できる。そのような結合の種類を2つ書け。
- 問7 図 1.1 の結晶系における電子の波動関数 $\psi(x, y, z)$ について、周期的境界条件を書け。ただし、 \vec{a} 、 \vec{b} 、 \vec{c} と平行にそれぞれ x 軸、 y 軸、 z 軸を取り、結晶の x 軸、 y 軸、 z 軸方向の周期をそれぞれ La 、 Mb 、 Nc (L 、 M 、 N は正の整数)とする。

問題2 以下の問に答えよ。

(40点)

[I] 電気伝導に関する次の文章を読んで、文章中の空欄 (①) ~ (⑦) に最も適切な数式を入れよ。

電界 \vec{E} と磁束密度 \vec{B} が存在する金属中の電子の運動について考える。ドリフト速度 $\langle \vec{v} \rangle$ 、有効質量 m^* 、電荷 $-q$ 、緩和時間 τ (定数) の電子の運動方程式は、以下のように表されるものとする。

$$m^* \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \langle \vec{v} \rangle = -q (\vec{E} + \langle \vec{v} \rangle \times \vec{B})$$

まず、磁界のない場合、すなわち $|\vec{B}| = 0$ の場合における定常状態を考える。このとき、電子のドリフト速度 $\langle \vec{v} \rangle$ は、以下のように求まる。

$$\langle \vec{v} \rangle = (\text{①}) \vec{E}$$

電流密度を \vec{j} とすると、 $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ である。したがって、導電率 σ は、電子の密度を n とし、次式で与えられる。

$$\sigma = (\text{②})$$

次に、磁界がある場合、すなわち $|\vec{B}| \neq 0$ の場合について考える。ここで、電界、磁束密度、ドリフト速度、電流密度の x 軸、 y 軸、 z 軸方向の各成分をそれぞれ、 $\vec{E} = (E_x, E_y, E_z)$ 、 $\vec{B} = (B_x, B_y, B_z)$ 、 $\langle \vec{v} \rangle = (\langle v_x \rangle, \langle v_y \rangle, \langle v_z \rangle)$ 、 $\vec{j} = (j_x, j_y, j_z)$ とし、 z 軸方向に磁束密度 B_z の磁界を印加した時の運動方程式を x 軸、 y 軸、 z 軸方向の各成分に分けて示すと、次式のようになる。

$$m^* \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \langle v_x \rangle = (\text{③})$$

$$m^* \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \langle v_y \rangle = (\text{④})$$

$$m^* \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \langle v_z \rangle = (\text{⑤})$$

ここで、定常状態において、 x 軸方向にのみ電流が流れるものとする、

$$E_y = (\text{⑥}) E_x$$

となる。このとき、 j_x を用いて表された $\frac{E_y}{j_x B_z}$ はホール係数 R_H と定義され、次のように、 n と q を用いた式で表される。

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B_z} = (\text{⑦})$$

[II] 超伝導に関する次の文章を読んで、以下の問に答えよ。

1911 年、K. Onnes によって発見された超伝導は、その後多くの研究者により実験的研究がなされ多くの成果が得られた。一方、1957 年、J. Bardeen、L. Cooper、J. R. Schrieffer は後に (⑧) 理論と呼ばれる理論を発表し、理論的にもこの現象についての一応の解決がなされた。

この理論によれば、臨界温度 T_c 以下の温度でゼロ抵抗の超伝導状態を実現するためには電子系が何らかの凝集状態 (コヒーレント状態) にある必要があるが、電子は (⑨) を持つ (⑩) 粒子であり、そのままでは (⑪) の原理により同じ状態に 2 個以上の電子が入ることが禁止される。よって、何らかの相互作用により電子が対を形成し (⑫) 粒子のようになり、アボガドロ数程度の巨大な数の粒子が同じ運動をする必要がある。このためには、電子間の斥力に打ち勝つだけの有効な引力が働く必要がある。この理論では、電子-格子相互作用を介して電子同士が (⑬) を仮想的に交換 (或いは (⑬) を介して運動量を交換) することによって、お互いに反対向きの (⑨) と運動量を持つ電子同士に引力が働くと考ええる。この引力によって生じる電子対を (⑭) 対と言う。

一般に金属の抵抗は温度の降下とともに減少していくが、超伝導電流が抵抗ゼロの状態で流れるのは、オームの法則に従う電流の極低温での極限というのではなく、全く別の状態での電気伝導機構によるものである。またこれは、磁気的な性質とも密接な関係を持っている。

この磁気的な性質として、超伝導体はある程度の外部磁界中ではその内部が完全に反磁性状態になる (⑮) 効果があることが知られている。特に、第一種超伝導体では、臨界磁界 H_c (熱力学的臨界磁界ともいう) までこの状態が保たれ、これ以上の磁界のもとでは磁束の侵入が生じ超伝導状態は壊れ常伝導状態に転移する。この (⑮) 効果は、(⑯) 理論によってうまく説明することができる。この理論によれば、超伝導体表面から侵入する磁束は、表面から非常に短い距離 λ 程度入ったところで、ほぼ e^{-1} (e は自然対数の底) に減衰してしまうことがわかる。この (a) 距離 λ を磁場侵入長 (磁束侵入長) と呼び、超伝導体内部では実質的に完全反磁性状態が保たれることがわかる。

この超伝導体を使った応用として、発見当初から超伝導電磁石の開発が試みられてきたが、50 年近く実用化することができなかった。これは、第一種超伝導体では、一般に臨界磁界 H_c の値が小さく、電磁石が作り出した磁界により超伝導状態が壊れてしまうためであった。この問題を解決したのが、第二種超伝導体の発見であった。(b) 第二種超伝導体では、熱力学的臨界磁界 H_c よりも低い第一臨界磁界 H_{c1} 以下の磁界では、第一種超伝導体と同様完全反磁性状態をとるが、磁界が増加すると H_{c1} で磁束が超伝導体内部に侵入しはじめる。さらに、熱力学的臨界磁界 H_c よりも大きな第二臨界磁界 H_{c2} では完全に磁束が侵入し常伝導状態へと転移する。磁界が H_{c1} と H_{c2} の間にあるときは、磁束が量子化された形で侵入した (⑰) 状態をとる。第二種超伝導体では、材料によっては H_{c2} が H_c の 100 倍にもなるので、磁界発生用超伝導線材として用いることが可能である。この第二種超伝導体である Nb_3Sn (T_c : 18 K、 H_{c2} : 約 20 T) の発見が 1961 年になされて以来、超伝導電磁石実用化への道がようやく開かれることになった。

問1 文章中の空欄 (⑧) ～ (⑰) に最も適切な語句を入れよ。

問2 下線部(a)における Λ は次の式で与えられる。

$$\Lambda = \sqrt{\frac{m}{\mu_0 n_s q^2}}$$

ここで、 m と $-q$ は電子の質量と電荷量、 μ_0 は真空の透磁率、 n_s は電子対密度である。
 $m = 9.1 \times 10^{-31}$ kg、 $q = 1.6 \times 10^{-19}$ C、 $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ Hm $^{-1}$ 、 $n_s = 1.0 \times 10^{28}$ m $^{-3}$ とするとき、 Λ の単位と大きさを求めよ。ただし、解答は導出過程を示し、有効数字 1 桁で答えよ。

問3 下線部(b)の第二種超伝導体について、この超伝導体に外部磁界 \vec{H} の強さを 0 から H_{C2} まで変えた場合の超伝導体内部での磁化 \vec{M} と外部磁界 \vec{H} の大きさ M と H の関係についてグラフで示せ。ただし、一般的に磁束密度 \vec{B} 、外部磁界 \vec{H} および磁化 \vec{M} の間には $\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M})$ の関係がある。

問題3 次の文章を読んで、以下の問に答えよ。

(40点)

キャリア密度がボルツマン分布で近似できる、ある真性半導体を考える。その半導体の伝導帯及び価電子帯の有効状態密度を、それぞれ、 N_C 及び N_V とする。伝導帯底及び価電子帯頂上のエネルギー、フェルミエネルギーを、それぞれ、 ε_C 、 ε_V 、 ε_F とする。また、ボルツマン定数を k 、絶対温度を T 、電子の電荷の絶対値を q 、自然対数の底を e とする。

電子密度 n は、

$$n = N_C \exp[-\{ (\text{①}) - \varepsilon_F \} / kT]$$

となる。同様に、正孔密度 p は、

$$p = N_V \exp[-\{ (\text{②}) - \varepsilon_V \} / kT]$$

となる。従って、電子密度 n と正孔密度 p の積は、

$$np = (\text{③})$$

となる。これを、(④) の法則と呼ぶ。この積は、変数 (⑤) のみの関数となる。また、電気的中性条件により、真性電子密度 n_i を、バンドギャップ ε_G を用いて表すと、

$$n_i = (\text{⑥})$$

となる。フェルミエネルギーは、

$$\varepsilon_F = (\varepsilon_C + \varepsilon_V) / 2 + (\text{⑦})$$

となる。代表的な半導体である Si や GaAs においては、上式の第2項の大きさは第1項の大きさに比べて十分 (⑧) ので、フェルミエネルギーはバンドギャップの (⑨) に位置する。

問1 上記の空欄 (①) ~ (⑨) に適切な数式か語句を入れよ。

問2 GaAs 真性半導体の室温における伝導帯底とフェルミエネルギーとのエネルギー差を、eV を単位として小数点第1位まで答えよ。なお、GaAs は 850 nm 帯半導体レーザの活性層材用に使用される場合があることを参考にしても良い。ここでは、プランク定数 $h = 6.6 \times 10^{-34}$ Js、光速 $c = 3.0 \times 10^8$ m/s、 $1 \text{ J} = 6.2 \times 10^{18} \text{ eV}$ とする。(計算は、有効数字2桁で行うこと。)

問3 GaAs の光吸収を考える。吸収係数が 10000 cm^{-1} の場合、光強度が $1/e$ になる侵入長はいくらか、有効数字1桁で答えよ。

問4 まず、GaAs の遷移型を答えよ。次に、室温における GaAs の吸収係数のスペクトルの概略を、遷移型を考慮して描け。縦軸を「吸収係数 (cm^{-1})」横軸を「フォトンエネルギー (eV)」とし、両軸とも線形とする。また、バンドギャップ ε_G を図中に示せ。

問題4 次の文章を読んで以下の問に答えよ。

(40点)

誘電体に電界を加えると、内部に分極が誘起される。誘電体の巨視的物理量である比誘電率 (以下誘電率と呼ぶ) 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は (①) の式として知られている。また、各分極はその発現機構からいくつかの種類に分類される。電荷のずれによって生じる変位分極には、可視光から紫外線領域の吸収と関係する (②)、赤外線領域の吸収と関係する (③) の2種類がある。一方、永久双極子を持つ物質では、印加電界に対して双極子が方向を揃える (④) を生じる場合がある。印加した交流電界の周波数帯域が (②) や (③) の分極の固有角周波数に近い場合、電気エネルギーが強く吸収される。このようなエネルギー損失を (⑤) という。(④) が支配的な交流電界の周波数帯域では、角周波数 ω における誘電率 $\kappa(\omega)$ は (②) 及び (③) の周波数依存性が無視できるので、次のような近似式で表される。

$$\kappa(\omega) = \kappa_{\text{hf}} + \frac{\kappa_0 - \kappa_{\text{hf}}}{1 - i\omega\tau}$$
$$\tau = \frac{\kappa_0 + 2}{\kappa_{\text{hf}} + 2} \tau_p$$

ここで、 κ_0 は静電誘電率 ($\omega = 0$)、 κ_{hf} は (④) の寄与しない高周波域における誘電率、 τ_p は (④) の緩和時間を表す。この表現式を (⑥) という。

また、電界によって反転可能な自発分極を持つ物質は、一般に (⑦) と呼ばれている。この物質の特徴として、キュリー温度以上で相転移し、(⑧) 相に変化をすることが知られている。キュリー温度以上の温度 T における (⑦) の誘電率 $\kappa(T)$ は、次の (⑨)

の法則に従うことが確認されている。

$$\kappa(T) = \frac{C}{T - T_0}$$

ここで、 T_0 は特性温度、 C はキュリー一定数と呼ばれる。

その他に、機械的な応力やひずみを加えることで分極が生じる物質を特に (⑩) 物質といい、水晶やチタン酸バリウムなどが知られている。

問1 文中の空欄 (①) ~ (⑩) に適当な語句を入れよ。

問2 上記の下線部について、印加電界 \vec{E} によって分極 \vec{P} が誘起される誘電体を考える。 \vec{P} が \vec{E} に比例する場合、誘電体中の電束密度 \vec{D} は $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \kappa \epsilon_0 \vec{E}$ で表される。ここで、 κ は比誘電率 (誘電率)、 ϵ_0 は真空中の誘電率である。微視的な観点で、誘電体が j 種の分極起源をもち、起源 i ($i=1,2,\dots,j$) の分極率と密度を、それぞれ、 α_i と N_i とし、一定の局所電界 \vec{E}_{loc}

$$\vec{E}_{\text{loc}} = \vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}$$

が作用すると考える。この時、 κ と α_i とのよく知られた (①) の関係式を導け。ただし、途中の導出過程も記述すること。

問3 (②)、(③)、(④) の3種の分極を生じることができる物質について、印加電界の角周波数 (又は周波数) における誘電率の実数部及び虚数部の関係を図示し、その特徴を述べよ。ただし、簡略化のため、その物質は3種の分極起源をそれぞれ1つずつ持つと仮定する。

問4 (⑦) の物質に交流電界 \vec{E} を加えた場合、誘起される分極 \vec{P} を \vec{E} に対して図示すると、ヒステリシスループと呼ばれる特徴的な閉曲線を示すことが知られている。電界の印加によって生じる、この閉曲線の様子をグラフに示し、現象について詳しく説明せよ。ただし、初期状態では自発分極の方向はランダムに分布し、全体として $|\vec{P}|=0$ とする。

問題5 以下の問に答えよ。

(40点)

問1 イオン性結晶の示す磁性は、その構成原子の持つ磁気モーメントとその配列から、反磁性、常磁性、強磁性、反強磁性およびフェリ磁性に大別される。反磁性、強磁性および反強磁性について、その構成原子の磁気モーメントの有無を答えよ。その

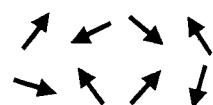


図 5.1

中で構成原子が磁気モーメントを持つ場合には、図 5.1 の例にならい、磁界がない時の磁気モーメントの配列を模式的に図示せよ。ここで、図 5.1 の矢印は原子の持つ磁気モーメントを表している。

問2 以下の文章中の空欄 (①) ~ (⑮) に適切な語句または数式を補い、文章を完成せよ。必要であれば真空の透磁率 μ_0 を用いてよい。

全軌道角運動量量子数 L が 0 で全スピン角運動量量子数 S が $1/2$ の原子からなる常磁性体に静磁界を印加したときの磁化を考える。磁束密度 \vec{B} の静磁界を印加すると、スピンも磁気モーメント $\vec{\mu}$ をともなうので、 $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ なるエネルギーを持つこととなり、このスピンからなる原子のエネルギー準位は 2 つに分裂する。そのエネルギー差は磁気モーメントの大きさ μ を用いて (①) と表され、低いエネルギー状態での磁気モーメントの向きは磁界と (②) になる。絶対温度 T における熱平衡状態では、この低エネルギー状態と高エネルギー状態の占有率は、

$$\frac{N_1}{N} = (\text{③}), \quad (1)$$

$$\frac{N_2}{N} = (\text{④}) \quad (2)$$

となる。ここで、 N_1 と N_2 はそれぞれ低エネルギー状態と高エネルギー状態の単位体積あたりの数であり、 $N = N_1 + N_2$ は単位体積あたりの原子数、 k はボルツマン定数である。磁界方向の磁化 M は、 μ 、 N_1 と N_2 を用いて

$$M = (\text{⑤})$$

と書き表されるから、式 (1) と式 (2) より

$$M = N\mu \tanh(\mu B/kT)$$

となる。 $\mu B \ll kT$ のとき、磁化率 χ_m は

$$\chi_m = (\text{⑥})$$

と近似でき、「常磁性体の磁化率は温度に (⑦) する」というキュリーの法則が導かれる。全角運動量量子数が J である原子を磁界中におくと、そのエネルギー準位は (⑧) 個に等間隔に分裂する。この場合も上述と同様な計算により磁化率が求められる。

イオン性結晶中の遷移金属イオンは不完全殻を持っており、その不完全殻への電子の詰まり方はフントの法則に従うことが知られている。 Mn^{3+} ($3d^4$) の場合、 $3d$ 殻には (⑨) 個の異なる軌道状態があり、それぞれ異なるスピンを持つ電子を収容できる。この (⑩) 個の状態に (⑪) 個の電子を詰めるやり方は多数あるが、その基底状態の配位はフントの法則にしたがって求めることができる。全スピン角運動量 \vec{S} に対する法則からその量子数は (⑫)、全軌道角運動量 \vec{L} に対する法則からその量子数は (⑬) と求まるが、ベクトル \vec{L} 、 \vec{S} の向きの選び方に対して、いくつかの可能な状態がある。それらの間のエネルギー差をもたらすのは (⑭) であり、そのエネルギーを最小にする条件から、基底状態の全角運動量量子数 J は (⑮) と求まる。