

平成21年8月25日(火)

13:00～16:00

平成22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。

(配点率 20%)

一次元空間で運動する質量 m の一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 $\Psi(x)$ 、ポテンシャルエネルギーを $V(x)$ とすると、 $\hbar = h/2\pi$ (h はプランク定数) を用いて次式で表される。

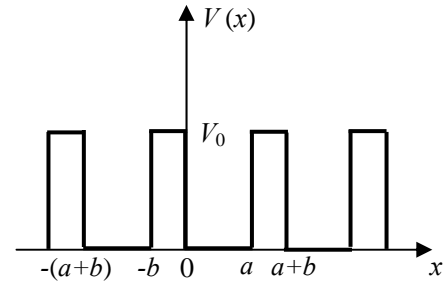


図 1-1

上式において、図 1-1 に示す周期的ポテンシャルを与え、 $0 < \varepsilon < V_0$ の場合を考える。

$0 < x < a$ の範囲では、シュレーディンガー方程式の一般解は、次式で与えられる。

$$\Psi(x) = A \exp(i\alpha x) + B \exp(-i\alpha x)$$

ただし、 A 、 B は定数、 $\alpha = [\text{②}] (>0)$ である。

一方、 $-b < x < 0$ の範囲では、シュレーディンガー方程式の一般解は、次式で与えられる。

$$\Psi(x) = C \exp(\beta x) + D \exp(-\beta x)$$

ただし、 C 、 D は定数、 $\beta = [\text{③}] (>0)$ である。

次に、 $x=0$ と $x=a$ における境界条件について考える。まず、 $x=0$ では、波動関数とその導関数が連続であることから以下の関係が成り立つ。

$$A + B = [\text{④}]$$

$$i\alpha(A - B) = [\text{⑤}]$$

次に、 $x=a$ での連続性を考える場合、 $a < x < a+b$ における波動関数 $\Psi_{a,a+b}(x)$ を求める必要がある。 $-b < x < 0$ における波動関数 $\Psi_{-b,0}(x)$ を用いると、下線④ブロッホの定理より、波数を k として、 $\Psi_{a,a+b}(x)$ は次式で表される。

$$\Psi_{a,a+b}(x' + a + b) = \Psi_{-b,0}(x') \exp(ik(a + b)) \quad (-b < x' < 0)$$

したがって、 $x=a$ における波動関数とその導関数の連続性より、以下の関係が成り立つ。

$$A \exp(i\alpha a) + B \exp(-i\alpha a) = [\text{⑥}]$$

$$i\alpha \{ A \exp(i\alpha a) - B \exp(-i\alpha a) \} = [\text{⑦}]$$

これらの境界条件から次の関係式が得られる。

$$\cos k(a + b) = (\beta^2 - \alpha^2) \sinh \beta b \frac{\sin \alpha a}{2\alpha\beta} + \cosh \beta b \cos \alpha a \quad (1)$$

式(1) は、 $\beta^2 ba/2 = P$ が有限な値をもつように、 $b \rightarrow 0$ 、 $V_0 \rightarrow \infty$ とすれば、次のように簡単化される。

$$\cos ka = P \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a \quad (2)$$

問 1 上の文章中の [①] ～ [⑦] に適切な数式を入れよ。

問 2 (i) 下線①のブロッホの定理に関連して、一次元周期的ポテンシャルの周期を d として、ブロッホ関数を記せ。ただし、文中で定義されていない記号を使う場合、それを定義して解答せよ。

(ii) 式(2) の右辺を $f(\alpha a)$ とすると、 $P=2$ の場合、 $f(\alpha a)$ は図 1-2 に示すようになる。図 1-2 を利用して、式(2) が成立する αa の範囲を αa 軸上に図示せよ。解答は、図 1-2 の概略を解答用紙に写して図示せよ。

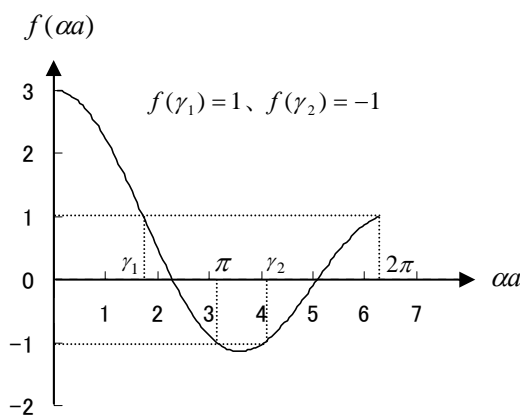


図 1-2

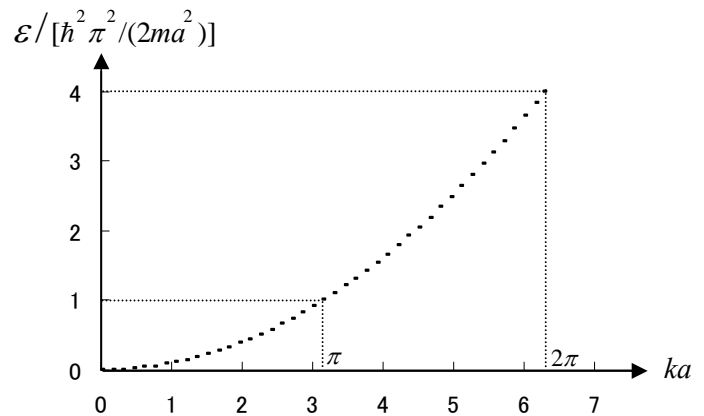


図 1-3

(iii) 図 1-2 を利用して、式(2)を満たす ε と ka の関係の概略を $0 \leq ka \leq 2\pi$ の範囲で図示せよ。解答は、図 1-3 の概略を解答用紙に写して図示せよ。なお、図 1-3 の破線は、 $\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$ の関係を示しており、 ε の単位は、 $\hbar^2 \pi^2 / (2ma^2)$ である。

問 3 問 2 から、電子が取りえるエネルギー帯（エネルギー領域）と電子が取りえないエネルギー帯が存在することが分かる。前者および後者のエネルギー帯をそれぞれ何と呼ぶか答えよ。

問題2 次の文章を読み、下記の問いに答えよ。ここで、金属内部の自由電子のエネルギーを ε 、電子の質量を m 、素電荷を e 、プランク定数を h ($\hbar = h/2\pi$)、ボルツマン定数を k_B で表し、解答に用いてよい。
(配点率 20%)

絶対零度における一般的な金属の単位体積あたりの全電子数は以下のような手順で見積もることができる。

自由電子ガスモデルに従う金属内部の自由電子（以下、電子）に対するシュレーディンガー方程式は、

$$[\text{①}] \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi + \varepsilon \Psi = 0 \quad (1)$$

と記述される。ここで、 Ψ は一電子近似で記述した電子の波動関数である。式(1)を満たす波動関数は、波数ベクトルの x 、 y 、 z 成分をそれぞれ k_x 、 k_y 、 k_z とすると、

$$\Psi(x, y, z) = A \exp[i(k_x x + k_y y + k_z z)] \quad (2)$$

とおくことができる。ここで A は定数である。

周期的境界条件（周期 L ）を採用することにより、

$$\Psi(x, y, z) = \Psi(x + L, y, z) = \Psi(x, y + L, z) = \Psi(x, y, z + L) \quad (3)$$

となるので、 k_x 、 k_y 、 k_z は次の関係を満たさなければならない。

$$k_x = \left(\frac{2\pi}{L} \right) n_x, \quad k_y = \left(\frac{2\pi}{L} \right) n_y, \quad k_z = \left(\frac{2\pi}{L} \right) n_z \quad (4)$$

ただし、ここでは、 $n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ の整数値をとるものとする。

式(2) および式(4) を式(1) に代入して、電子のエネルギーは、

$$\varepsilon = [\text{②}] \left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \right) \quad (5)$$

と求められる。

次に、式(5)を用いて、あるエネルギー ε の状態密度を求める。体積 $V (= L^3)$ 内のエネルギー 0 から ε までの間にある準位の数 N_g は、このエネルギー範囲で式(5)を満たす整数 (n_x, n_y, n_z) の組の数から求められる。いま、 N_g は非常に大きな数なので、

$$\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \right)^{1/2} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{[\text{②}]}} \quad (6)$$

を半径とする球の体積が N_g に等しいと考えられる。したがって、

$$N_g = V [\text{③}] \quad (7)$$

となる。

体積 V 内でエネルギーが ε と $\varepsilon + d\varepsilon$ の間にある状態の数 $D(\varepsilon)d\varepsilon$ は、式(7) を ε について微分して、 $D(\varepsilon)d\varepsilon = V$ [④] $d\varepsilon$ となる。

以上の結果より、エネルギー ε における単位体積当たりの状態密度 $g(\varepsilon)$ は、

$$g(\varepsilon) = [\text{④}] \quad (8)$$

と求めることができる。

一般に、電子がエネルギーの準位を占める確率は、フェルミ・ディラック分布関数 $f(\varepsilon)$ で与えられるので、エネルギー ε と $\varepsilon + d\varepsilon$ の間の電子密度 $n(\varepsilon)$ は、スピンも考慮して、

$$n(\varepsilon) = 2f(\varepsilon)g(\varepsilon)d\varepsilon \quad (9)$$

で与えられる。ここで、係数“2”は、一つの準位に異なるスピンを持つ二つの電子が存在できることを考慮している。したがって、単位体積あたりの全電子数 N は

$$N = 2 \int_0^{\infty} f(\varepsilon)g(\varepsilon)d\varepsilon \quad (10)$$

となる。

ここで、有限温度 T における $f(\varepsilon)$ は、フェルミエネルギーを ε_F として、

$$f(\varepsilon) = [\text{⑤}] \quad (11)$$

と表されるので、絶対零度における金属の単位体積あたりの全電子数 N は、 ε_F の関数として、

$$N = [\text{⑥}] \quad (12)$$

と求めることができる。

問1 上の文章中の [①] ～ [⑤] に適切な数式を入れよ。

問2 式(10)、(11) より、式(12) の [⑥] を求めよ。ただし、導出過程を書くこと。

問3 絶対零度におけるフェルミエネルギー ε_F 、フェルミ温度 T_F 、フェルミ速度 v_F 、フェルミ波数 k_F を、単位体積当たりの全電子数 N で表せ。また、電子密度 $9\pi \times 10^{27} \text{ m}^{-3}$ の金属について、絶対零度における ε_F (eV) および v_F ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) を有効数字1桁で求め、与えられた単位 (eV および $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) であることを示せ。必要ならば、次の値を用いてもよい。

$$\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}, \quad k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}, \quad m = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}, \quad e = 1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$$

問題3 次の文章を読み、下記の問いに答えよ。

(配点率 20%)

MOSFET (Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor) は集積回路を構成する代表的な素子として知られている。n チャンネル MOSFET (エンハンスメント型) の構造図を図 3-1 に示す。p 型シリコン (Si) 基板の表面にシリコン酸化膜 (SiO_2) が形成され、ゲート (G) が設けられる。ゲートの両側にソース (S) およびドレイン (D) として、n 型領域が作製される。p 型 Si 基板結晶には [(ア)] 不純物が添加されており、通常、室温において [(イ)] が価電子帯に供給され、MOSFET はキャリア密度が温度依存性をほとんど持たない [(ウ)] 領域と呼ばれる温度領域で用いられる。 SiO_2 膜は、9 eV 程度の [(エ)] を有しており、良好な絶縁材料としてゲート酸化膜に適用されている。

以下、MOSFET の動作について考える。ただし、Si 基板結晶には単一の不純物のみが添加され、結晶欠陥や界面準位は無視できるものとする。

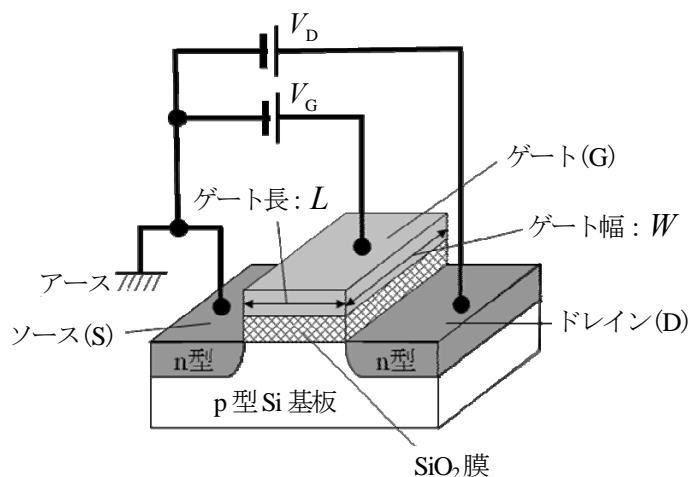


図 3-1

図 3-1 に示すゲート電圧 V_G がゼロの場合 (フラットバンド状態にあるとする)、 SiO_2 膜

直下の p 型 Si 基板中には、[(イ)] およびイオン化した [(ア)] が同数存在する。ここで、微小電圧 $V_G (>0)$ を印加すると、 SiO_2 膜直下に存在している [(イ)] が Si と SiO_2 膜との界面から Si 基板内部へ移動し、界面付近の Si 基板側にはイオン化した [(ア)] により帯電した [(オ)] 層が形成される。使用する p 型 Si 基板の [(ア)] 密度が低くなると、一般に、[(オ)] 層の厚みは [(カ)] 薄くなる、厚くなる、変化しない []。また、それとともに、キャリアの移動度は、[(キ)] 低下する、上昇する、変化しない []。

更に、 $V_G (>0)$ を増加させると、p 型基板であるにもかかわらず、 SiO_2 膜直下には伝導キャリアが多量に発生するようになる。この状態は [(ク)] 状態と呼ばれ、ソース - ドレイン間 (以下、S - D 間) でチャネルを形成する。

[(ク)] 状態における S - D 間に流れるドレイン電流は、次のようにして近似的に求めることができる。単位面積あたりの SiO_2 絶縁膜の容量を C_{ox} 、S - D 間に印加する電圧を V_D 、チャネルにキャリアを誘起するための閾値電圧を V_{th} ($V_G > V_{\text{th}}$) とすると、 $0 < V_D \ll V_G - V_{\text{th}}$ の領域では、ソース端およびドレイン端における [(ク)] 電子密度は、それぞれ、

$$n_s = |Q_s|/e = C_{\text{ox}} (V_G - V_{\text{th}})/e \quad (1)$$

$$n_d = |Q_d|/e = [\text{①}] \quad (2)$$

と表せる。ここで、 e は素電荷、 Q_s および Q_d はそれぞれ、ソース端およびドレイン端に誘起される単

位面積あたりの電荷量である。チャネル内で平均した〔（ク）〕電子密度を n_{SD} とすると、
 $n_{SD} = (n_S + n_D)/2$ と表せる。また、チャネル中の平均電界 E は、ゲート長 L を用いて、

$$E = [\text{②}] \quad (3)$$

となる。

したがって、ドレイン電流 I_D は、電子の移動度を μ_e とし、ゲート幅 W を考慮して、

$$I_D = [\text{③}] \quad (4)$$

と表せる。以上述べた、 $V_D \ll V_G - V_{th}$ における MOSFET の動作領域は、〔（ケ）〕領域とよばれる。

これに対して、 $V_D > V_G - V_{th}$ の領域では、 I_D は飽和し、

$$I_D = \frac{W}{L} \mu_e C_{ox} \left[\frac{1}{2} (V_G - V_{th})^2 \right] \quad (5)$$

と表せる。

また、MOSFET の性能を表す重要な特性パラメータの一つに、相互コンダクタンス g_m がある。

この飽和領域における g_m は、 I_D を含めずに表すと、以下のようにになる。

$$g_m = [\text{④}] \quad (6)$$

問 1 上の文章中の〔（ア）〕～〔（ケ）〕に適切な語句を入れよ。ただし、〔（カ）〕、〔（キ）〕
 は適切な語句を一つ選ぶこと。また、〔①〕～〔④〕には適切な数式を入れよ。ただし、〔③〕
 は、 e 、 V_D 、 μ_e 、 n_{SD} 、 W 、 L の内から必要な記号を用いて解答すること。

問 2 文中の〔（ク）〕の状態における、 SiO_2 膜と Si 基板領域のエネルギーバンド図を描け。ただし、
 解答の図中には、フェルミ準位 ε_F 、伝導帯下端のエネルギー ε_C 、価電子帯上端のエネルギー ε_V な
 ど必要な名称を記入すること。

問 3 SiO_2 膜の単位面積あたりの容量 $C_{ox} = 0.8 \mu\text{F} \cdot \text{cm}^{-2}$ 、ゲート長 $L = 0.5 \mu\text{m}$ 、ゲート幅 $W = 5 \mu\text{m}$ の構造
 で、 $V_{th} = 0.5 \text{ V}$ の MOSFET の動作を考える。 $V_G = 2 \text{ V}$ の印加状態で、 $V_D = 0.1 \text{ V}$ における I_D を有
 効数字 1 桁で求めよ。ただし、電子の移動度は $\mu_e = 400 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ とし、ショートチャネル効果など、
 微細化特有の効果は無視できるものとする。必要ならば、 SiO_2 膜の比誘電率を 4、真空の誘電率を 9
 $\text{pF} \cdot \text{m}^{-1}$ として用いてよい。

問題4 次の文章を読み、下記の問いに答えよ。

(配点率 20%)

[I] 誘電体の分極には、電子分極、[(ア)] 分極、[(イ)] 分極の3種がある。振動電界に対して各分極は応答速度が異なり、最も遅いのは[(イ)] 分極である。各分極率と巨視的な誘電率との関係は、[(ウ)] の式によって表現される。また、誘電率の周波数依存性は、[(エ)] とよばれている。

次に、電子分極の[(エ)] について考察する。誘電体中の原子内にある質量 m 、電荷 $-e$ の一つの電子に対し、振動電界 $E \exp(-i\omega t)$ が x 方向に印加され、分極による電子の変位が x 方向のみに生じる場合を考える。 E は振動電界の振幅、 ω は角周波数、 t は時間である。他の電子や原子はこの分極に影響を与えないとすると、電子の運動方程式は次式で表される。

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + m\Gamma \frac{dx}{dt} + m\omega_0^2 x = [\text{①}] \quad (1)$$

ここで Γ は[(オ)] とよばれ、左辺第2項はエネルギー損失に寄与する。 ω_0 は[(カ)] 角周波数とよばれる。変位 x は印加電界に追随して振動することから、運動方程式の解は

$$x = [\text{②}] \times \exp(-i\omega t) \quad (2)$$

となる。変位 x に対する双極子モーメントを考えると、電子分極率 α_e は

$$\alpha_e = [\text{③}] \quad (3)$$

と求まる。

一般に誘電率は複素数で表される。ここで複素誘電率 κ の実数部を κ' 、虚数部を κ'' として、

$$\kappa = \kappa' + i\kappa'' \quad (4)$$

とおく。 $\kappa - 1 \ll 1$ として局所電界は印加電界に等しく、誘電体の分極は単位体積中にある上記の電子 N 個からの電子分極のみにより生じるものと仮定する。[(ウ)] の式を用いると、 κ' と κ'' は、真空の誘電率を κ_0 として具体的に

$$\kappa' = [\text{④}] \quad (5)$$

$$\kappa'' = [\text{⑤}] \quad (6)$$

で表される。

[II] 強誘電体は内部に[(キ)] 分極を有し、電界印加によってその向きを変えることができる。結晶成長後の強誘電性結晶内部では、小さな領域において[(キ)] 分極の向きはそろっているが、全体では乱雑になっている。この小領域を[(ク)] とよぶ。静電界を徐々に増加しながら加えると、各[(ク)] の分極は静電界の印加方向に向きをそろえ、全体が単一の[(ク)] となって分極変化が飽和する。一度[(キ)] 分極がそろえると、静電界の印加を止めても分極が残った状

態になる。この分極を残留分極とよび、それを取り除くには静電界を逆向きに印加し、約半分の分極を反転させる必要がある。この反転に必要な電界は〔 (ケ) 〕電界とよばれている。

代表的な強誘電体としてチタン酸バリウムがあり、化学式〔 (コ) 〕で表される。この結晶は遷移温度 393 K より高温で〔 (サ) 〕相に相変化し、立方晶の〔 (シ) 〕構造となることが知られている。この結晶は低温の相ほど、結晶基本格子の対称性が〔 (ス) 低く・高く 〕なる。

問1 上の文章中の〔 (ア) 〕～〔 (シ) 〕に適切な語句または化学式を、また、〔 ① 〕～〔 ⑤ 〕に適切な数式を入れよ。ただし、〔 (ス) 〕はどちらか適切な語句を選択せよ。

問2 式(5)、(6)より、 $\kappa'-1$ および κ'' の角周波数依存性の概略図を示せ。ただし、 $\omega = \omega_0$ 近傍に対するそれぞれの依存性が分かるように示すこと。

問題5 次の文章を読み、下記の問いに答えよ。

(配点率 20%)

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。電子の運動は磁気モーメントを生じさせ、各々の磁気モーメントの配列の仕方により、常磁性、強磁性、反強磁性、フェリ磁性などが現れる。

原子核の周りを回る電子は、図 5-1 のように環状電流 I が流れているとみることができる。この円運動のループの半径に比べ十分大きな距離だけ離れた点における磁界は、アンペールの法則によれば磁気モーメント $\vec{\mu} = IS\vec{n}$ (S はループの面積、 \vec{n} はループのつくる面に垂直な単位ベクトル) で作られる磁界に等しい。電荷 $-e$ 、質量 m の電子が半径 r 、角周波数 ω の円運動をしていると考えると、環状電流 I の大きさは〔 ① 〕であるから、磁気モーメント $\vec{\mu}$ の大きさは $|\vec{\mu}| =$ 〔 ② 〕である。電子の角運動量 \vec{l} の大きさは $|\vec{l}| =$ 〔 ③ 〕であるから、磁気モーメント $\vec{\mu}$ は電子の角運動量 \vec{l} を用い、かつ、それぞれのベクトルの向きを考慮して、 $\vec{\mu} =$ 〔 ④ 〕と表される。

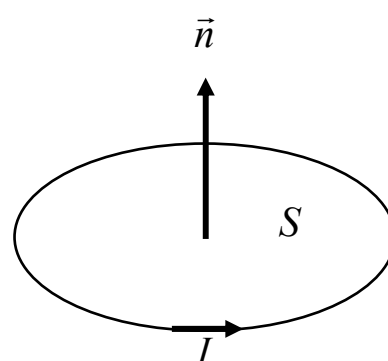


図 5-1

外部磁界（磁束密度 \vec{B} ）を加えてループ内の磁束を変えようとする、この外部磁界の変化を妨げるような方向の磁界を誘起するように誘導電流が流れる。このような磁性を〔（ア）〕と呼ぶ。図 5-2 に示すように z 方向に磁束密度 \vec{B} を印加した場合を考える。磁気モーメント $\vec{\mu}$ に磁束密度 \vec{B} が作用するとトルク（回転力＝力のモーメント） \vec{N} が作用し、そのトルクは $\vec{N} = [\text{⑤}]$ となる。トルク \vec{N} は角運動量 \vec{I} の時間変化に等しいので、 $d\vec{I}/dt = [\text{⑤}]$ なる関係が成立する。

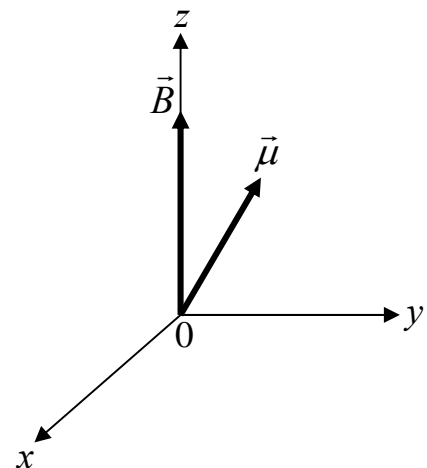


図 5-2

この関係式は、上で求めた $\vec{\mu}$ と \vec{I} との関係式を用いると、 $d\vec{\mu}/dt = [\text{⑥}]$ となる。さらに、磁気モーメント $\vec{\mu}$ の x 、 y 、 z 成分をそれぞれ μ_x 、 μ_y 、 μ_z とし、 $\vec{B} = (0, 0, B_z)$ を考慮すると、

$$d\mu_x/dt = [\text{⑦}]$$

$$d\mu_y/dt = [\text{⑧}]$$

$$d\mu_z/dt = [\text{⑨}]$$

となる。これらより、

$$d^2\mu_x/dt^2 = [\text{⑩}] \mu_x$$

$$d^2\mu_y/dt^2 = [\text{⑪}] \mu_y$$

が得られる。したがって、 $\vec{\mu}$ の先端は〔（イ）〕面に平行な面内で回転運動することが分かる。その角周波数 ω は、 $\omega = [\text{⑫}]$ で与えられる。この周波数を〔（ウ）〕周波数と呼ぶ。

問 1 上の文章中の〔①〕～〔⑫〕に適切な数式を、〔（ア）〕～〔（ウ）〕に適切な語句を入れよ。

問 2 イオン性結晶における (1) 常磁性および (2) 強磁性について、磁気モーメントの向きと大きさを、それぞれ矢印の向きと長さで表す場合、十分に低温で磁界がない時の磁気モーメントの様子を数本の矢印を用いて示せ。また、磁化率（帯磁率） $\chi_m = M/H$ （ M ：磁化の大きさ、 H ：磁界の大きさ）が磁界に依存しない温度領域について、 χ_m の温度依存性を、縦軸を χ_m 、横軸を温度 T として描き、さらに、式で示せ。式に現れる物性定数については、その名称を記載すること。