

物性物理科学 II

注意：問題 1 から 3 までの各問に解答し，各問題の答えを別々の解答用紙に記入すること。回答にあたっては式の導出なども示すこと。1 つの問題の解答が解答用紙 2 枚にわたるときは，2 枚目にも問題番号を書き，2 枚目であることを明示すること。

問題 1

量子多粒子系の以下の問題について答えよ。以下の問題において \hbar はプランク定数 h を 2π で割ったものである。また， $i^2 = -1$ である。1 つの粒子の軌道角運動量演算子 \vec{l} は位置の演算子 \vec{r} と運動量の演算子 $\vec{p} = -i\hbar\nabla$ を用いて $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$ と表される。N 個の粒子がある場合は，各粒子の軌道角運動量演算子 \vec{l}_j の和 $\vec{L} = \sum_{j=1}^N \vec{l}_j$ を合成軌道角運動量と呼ぶ。

[1] 軌道角運動量に関する以下の問いに答えよ。

(i) 1 つの粒子の軌道角運動量について，交換関係が $[l_x, l_y] = i\hbar l_z$ となることを示せ。ここで，例えば l_x は軌道角運動量 \vec{l} の x 成分である。

(ii) 合成軌道角運動量 \vec{L} に関しても (i) と同じ形の交換関係が成り立つことを示せ。証明の過程も解答用紙に示すこと。

[2] 次に，球対称ポテンシャル V_0 内の N 個の電子の運動をハイゼンベルグ描像で考える。各電子の運動エネルギー，球対称ポテンシャル V_0 および電子間クーロン相互作用のエネルギー V_1 を考えた場合のハミルトニアン H_0 は以下のように書くことができる。

$$H_0 = \sum_{j=1}^N \left(\frac{|\vec{p}_j|^2}{2m} + V_0(|\vec{r}_j|) \right) + \sum_{j>k}^N V_1(|\vec{r}_j - \vec{r}_k|)$$

ここで \vec{r}_j は j 番目の電子の位置， \vec{p}_j は j 番目の電子の運動量， m は電子の質量である。

このとき，合成軌道角運動量 \vec{L} が保存量であることをハイゼンベルグの運動方程式

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\vec{L}, H_0]$$

を用いて示せ。証明の過程も解答用紙に示すこと。

(次ページにつづく)

問題 1 のつづき

[3] 問[2]のハミルトニアン H_0 に, スピン軌道相互作用 $H_1 = \lambda \vec{S} \cdot \vec{L}$ を加えて, $H = H_0 + H_1$ とした場合, 全角運動量 $\vec{J} = \vec{S} + \vec{L}$ が H のもとで保存量であることをハイゼンベルグの運動方程式を用いて示せ. 証明の過程も示すこと. 但し, \vec{S} は電子の合成スピン角運動量である. また, λ は実定数である. 解答にあたって \vec{S} も軌道角運動量と同様な交換関係を満たすことを用いてよい. 例えば $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$ である.

[4] ハミルトニアンが問[3]の H である系を考える. 電子系の磁気モーメント $\vec{\mu}$ は $\vec{\mu} = -\mu_B(\vec{L} + 2\vec{S})$ と表される. ここで, μ_B はボーア磁子である. この系において, $\vec{\mu}$ の運動をハイゼンベルグの運動方程式を用いて調べると, $\vec{\mu}$ の \vec{J} に垂直な成分は円運動をしており時間平均はゼロとなる. このため, この系における磁気モーメントの期待値 $\langle \vec{\mu} \rangle$ は \vec{J} と平行または反平行となる. そこで,

$$\langle \vec{\mu} \rangle = -g\mu_B \langle \vec{J} \rangle$$

と書き, g をランダウの g 因子と呼ぶ. g を全角運動量, 合成軌道角運動量, 合成スピン角運動量の大きさ, J, L, S を用いて表そう. そのために以下の式の両辺を計算する.

$$\langle \vec{\mu} \cdot \vec{J} \rangle = -g\mu_B \langle \vec{J} \cdot \vec{J} \rangle.$$

右辺は, $-g\mu_B \langle \vec{J} \cdot \vec{J} \rangle = -g\mu_B J(J+1)$ と求まる. 左辺を J, L, S を用いて表すことにより, J, L, S を用いて表したランダウの g 因子の式を求めよ. 導出過程も示すこと.

問題 2

金属の光に対する応答を考える。簡単のため、金属は非磁性体であるとし、光の電場に対する電子の運動のみを考察する。電磁場の複素数表示を用いる。電子の質量、電荷、数密度をそれぞれ m , $-e$, N とし、真空の誘電率および透磁率をそれぞれ ϵ_0 , μ_0 とする。以下の問いに答えよ。導出の過程も記すこと。また、 $i^2 = -1$ とする。

[1] 角振動数 ω の振動電場 $\vec{E} = \vec{E}_0 \exp(-i\omega t)$ (\vec{E}_0 は定ベクトル) を印加した際の電子の運動方程式を、変位を \vec{u} , 緩和定数を γ とし、以下のように書くものとする。

$$m \frac{d^2 \vec{u}}{dt^2} = -m\gamma \frac{d\vec{u}}{dt} - e\vec{E}_0 \exp(-i\omega t) \quad (1)$$

この微分方程式を、 $\vec{u} = \vec{u}_0 \exp(-i\omega t)$ の形を仮定して解け。

[2] 分極 \vec{P} は問[1] で導入した \vec{u} を用いて、

$$\vec{P} = -Ne\vec{u} \quad (2)$$

で定義される。また、真電荷の密度および電流密度が零のとき、磁場を \vec{H} としたマックスウェル方程式は以下の通りである。

$$\nabla \cdot (\epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}) = 0 \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \vec{H} = 0 \quad (4)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}) \quad (5)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (6)$$

問[1]の結果や式(2)~(5)のいずれかを用いて \vec{P} や \vec{H} を消去すると、 \vec{E} に関する微分方程式は

$$\nabla^2 \vec{E} = \boxed{\text{イ}} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$$

となる。 $\boxed{\text{イ}}$ に入る数式を求めよ。ここで、ベクトル \vec{A} に対して $\nabla \times (\nabla \times \vec{A}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A}$ とできることを用いてもよい。

(次ページにつづく)

問題 2 のつづき

[3] 進行方向が $+z$ 軸の向きで、電場の振動方向が x 軸を向いた平面波が金属内を伝播するとする。角振動数を ω 、 E_0 を定数、 \tilde{n} を複素数として、電場の x 成分 E_x について、

$$E_x = E_0 \exp \left\{ i\omega \left[\tilde{n}(\epsilon_0 \mu_0)^{\frac{1}{2}} z - t \right] \right\} \quad (7)$$

とできる。式(7)を問[2]で得られた微分方程式に代入すると、 \tilde{n} の実部 n と虚部 κ の満たす関係式は、

$$n^2 - \kappa^2 = 1 - \boxed{}, 2n\kappa = \boxed{}$$

となる。 $\boxed{}$ と $\boxed{}$ に入る数式を、それぞれ求めよ。

[4] 直線偏光の平面波が真空から金属表面に垂直に入射した場合の反射を考える。反射率 R は反射電場の振幅を入射電場の振幅で割った値の絶対値の2乗で与えられる。表面における電場と磁場の連続条件を用いて、

$$R = \left| \frac{1 - \tilde{n}}{1 + \tilde{n}} \right|^2 \quad (8)$$

となることを示せ。ここで、 \tilde{n} は問[3]で導入したものである。

[5] 問[1]で $\gamma = 0$ の場合、問[3]で得た関係式と式(8)を用いて反射率の角振動数依存性を図示せよ。反射率の最大値とそれをとる ω の範囲、 $\omega \rightarrow \infty$ の場合の漸近値を図に記せ。

問題 3

金属と n 型半導体の接合によるショットキー障壁の形成と整流特性について考える。

図 1 は、金属半導体接合の熱平衡状態でのエネルギー準位図である。接合界面を原点とし、半導体内部方向を x 軸の正方向にとる。 $0 \leq x \leq W$ の領域は空乏層である。 ϵ_{FM} および ϵ_{FS} は、それぞれ金属および半導体のフェルミ準位である。 ϵ_{cb} および ϵ_{vt} は、半導体の伝導帯の下端および価電子帯の上端のエネルギーを表す。 ϕ_B はショットキー障壁、 V_D は拡散電位、 e は電気素量である。

接合に用いた金属の仕事関数 $\phi_M (= \epsilon_{vac} - \epsilon_{FM})$ は 4.6 eV、半導体の仕事関数 $\phi_S (= \epsilon_{vac} - \epsilon_{FS})$ は 4.1 eV、半導体の電子親和力 $\chi (= \epsilon_{vac} - \epsilon_{cb})$ は 4.0 eV、半導体のバンドギャップ $\epsilon_g (= \epsilon_{cb} - \epsilon_{vt})$ は 1.1 eV とする。いずれも 300 K での値である。 ϵ_{vac} は真空準位である。

図 2 は半導体領域の電荷密度の分布を示したものである。ドナー不純物（濃度 N_D ）は半導体内に均一に分布しており、すべてイオン化しているとする。アクセプター不純物の濃度は無視できるほど小さいとする。半導体の誘電率は κ_S とする。接合は界面準位の影響が無視できる理想的なものとし、また、半導体中の電子が金属から受ける鏡像力の効果は考えなくてよい。

- [1] ショットキー障壁 ϕ_B を与えられた文字を用いて表し、300 K での値を求めよ。
- [2] 半導体側を基準とし、外部から電圧 $+V$ および $-V$ を金属に印加したときの、それぞれのエネルギー準位図の概略を描き、それをもとに電流-電圧特性を図示してその特徴を説明せよ。
- [3] 空乏層におけるポアソン方程式を記せ。
- [4] 外部からの印加電圧を $V (< V_D)$ とし、境界条件に注意して問[3]のポアソン方程式を解き、空乏層幅 W を、 N_D 、 κ_S 、 V_D 、 V および e を用いて表せ。 $x \geq W$ では電界は存在しないものとし、 $x = 0$ における電位を 0 とせよ。
- [5] 空乏層は単位面積当たりの静電容量 $C \left(= \sqrt{\frac{\kappa_S e N_D}{2(V_D - V)}} \right)$ の平行平板コンデンサーとみなすことができる。300 K において、外部からの印加電圧 V を変化させながら、空乏層の静電容量を計測し、単位面積あたりの容量 C に換算した上で、 $1/C^2$ の値を V に対してプロットし図 3 のグラフを得た。このグラフから、拡散電位 V_D および不純物濃度 N_D を有効数字 1 桁で求めよ。導出の過程も示すこと。
 $\kappa_S = 1.0 \times 10^{-10} \text{ Fm}^{-1}$, $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$ を用いよ。

問題3のつづき

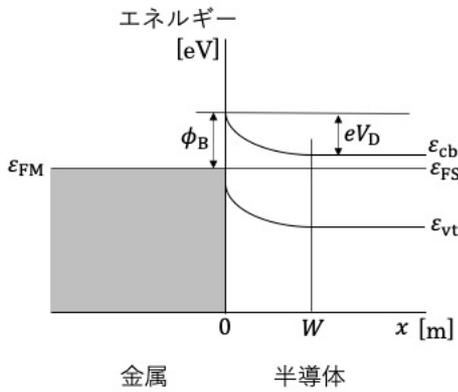


図1. 金属半導体接合のエネルギー準位図.

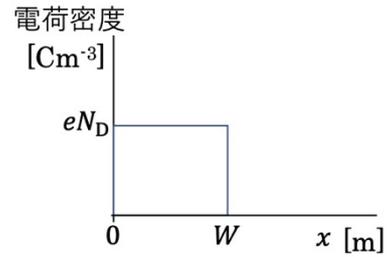


図2. 半導体領域の電荷密度分布.

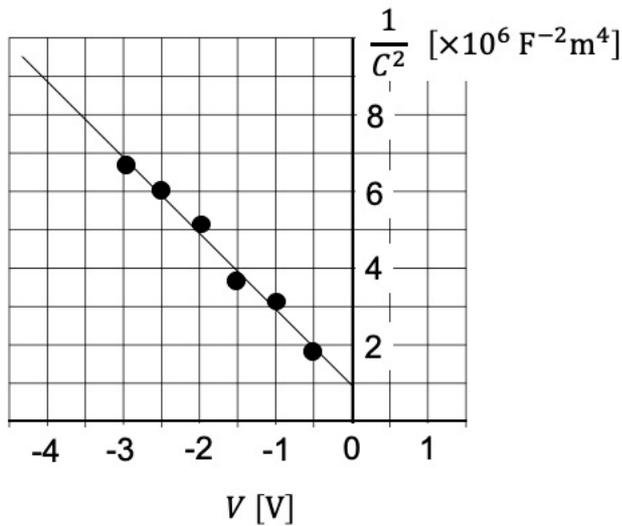


図3. $1/C^2$ vs. V プロット.
 C は空乏層の単位面積あたりの静電容量, V は外部からの印加電圧.