２０２２年度

東京大学大学院 工学系研究科
マテリアル工学専攻
入学試験問題

マテリアル工学基礎
【第３問　材料物性学】

2021 年 9 月 1 日（水）　14:00 ～ 14:45

受験番号(Examinee No.)					

－ 注意事項 －

1) この問題の試験時間は 45 分である。
2) 解答用紙に受験番号と氏名を記入すること。
3) 解答は、4 枚の解答用紙の表面に記入すること。解答用紙には問題の番号と、解答用紙のページ番号を記入すること。
4) 解答用紙の裏面には答案を書かないこと。ただし、裏面を下書き用紙として使用してもよい。
5) 日本語か英語で解答すること。
6) 問題冊子にも受験番号を記入すること。
7) 問題冊子は持ち帰らないこと。

（白紙 Blank sheet）

（白紙 Blank sheet）

（白紙 Blank sheet）

【第３問】材料物性学

以下の問いに答えよ。ただし，hをPlanck定数，k_BをBoltzmann定数，iを虚数単位とする。また，$\hbar = h/(2\pi)$とする。

1. 質量Mの同一種類の原子N個からなる1次元の結晶を考える。この結晶の格子定数はaとする。原子への力は最近接の原子からのみ働くとし，隣り合う原子同士はばね定数Kのばねで連結されているとみなす。各原子に番号を付け，j番目（$j = 1, 2, \cdots, N-1, N$）の原子の平衡点からの変位をu_jと表す。また，周期的境界条件$u_j = u_{j+N}$を適用する。

   (1) 時刻tにおけるj番目の原子の運動方程式をM，K，u_{j-1}，u_j，u_{j+1}を用いて表せ。

   (2) (1)の運動方程式の解は，$u_j = A\exp(\mathrm{i}kja - \mathrm{i}\omega t)$の形の波で表される。ここで，$A$は波の振幅，$k$は波数，$\omega$は角振動数である。$\omega$を$K$，$M$，$k$，$a$を用いて表せ。また，第1 Brillouinゾーンにおけるωとkの関係を図示せよ。

   (3) (2)で求めた波の$k \approx 0$における位相速度sを求めよ。

   (4) 波数は等間隔の離散的な値を取る。波数の間隔を求めよ。

   (5) (3)で求めたsを用いて第1 Brillouinゾーン内で$\omega = s|k|$の線形関係が成り立つものとする。ここで，第1 Brillouinゾーンの境界において，角振動数（Debye角振動数）および単位角振動数あたりの状態の数を，それぞれω_D，g_ωとする。このとき，ω_Dとg_ωを表す式を求めよ。なお，Nは以下の式を満たす。

$$N = \int_0^{\omega_\mathrm{D}} g_\omega \mathrm{d}\omega \qquad ①$$

(6) 高温極限（$k_{\mathrm{B}}T \gg \hbar\omega_{\mathrm{D}}$）における定積比熱$C_{\mathrm{v}}$を求めよ。なお，温度$T$において，角振動数が$\omega$であるフォノンの数の期待値$\langle n(\omega,T)\rangle$と1次元結晶の内部エネルギー$U(T)$は，次のように与えられる。

$$\langle n(\omega,T)\rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}\right)-1} \qquad ②$$

$$U(T) \approx \int_0^{\omega_{\mathrm{D}}} g_\omega \hbar\omega \langle n(\omega,T)\rangle \mathrm{d}\omega \qquad ③$$

2. 温度Tにおいて，熱平衡状態にある半導体のキャリア密度について考える。ここで，μはFermi準位を表し，E_{c}は伝導帯下端のエネルギー，E_{v}は価電子帯上端のエネルギー，m_{n}は電子の有効質量，m_{p}は正孔の有効質量を表す。熱平衡状態における半導体中の電子密度n_0，正孔密度p_0は以下の式で与えられる。

$$n_0 = N_{\mathrm{c}} \exp\left(\frac{\mu - E_{\mathrm{c}}}{k_{\mathrm{B}}T}\right) \qquad ④$$

$$p_0 = N_{\mathrm{v}} \exp\left(\frac{E_{\mathrm{v}} - \mu}{k_{\mathrm{B}}T}\right) \qquad ⑤$$

ここで，N_{c}とN_{v}は，それぞれ伝導帯の有効状態密度と価電子帯の有効状態密度であり，以下の式で与えられる。

$$N_{\mathrm{c}} = 2\left(\frac{m_{\mathrm{n}}k_{\mathrm{B}}T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \qquad ⑥$$

$$N_{\mathrm{v}} = 2\left(\frac{m_{\mathrm{p}}k_{\mathrm{B}}T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \qquad ⑦$$

(1) 真性半導体（固有半導体）の電子密度n_{i}を求めよ。ただし，禁制帯幅E_{g}を含む式とすること。

(2) $m_\mathrm{p} = \sqrt{\mathrm{e}}\, m_\mathrm{n}$とする。真性半導体（固有半導体）の$\mu$を$E_\mathrm{c}$，$E_\mathrm{v}$，$k_\mathrm{B}$，$T$を用いて表せ。ただし，eは自然対数の底である。

(3) 第14族の元素からなる真性半導体（固有半導体）にドナー不純物として第15族の元素を密度N_Dになるようにドープした場合について考える。ドナー不純物は半導体中で完全にイオン化しているものとする。このとき，電荷中性条件を表す式を記せ。

(4) (3)の不純物半導体（外因性半導体）においてn_0を表す式を求めよ。ただし，N_Dとn_iを含む式とすること。

【Problem 3】Properties of materials

Answer the following questions. Here, h is the Planck constant, k_{B} is the Boltzmann constant, i is the imaginary unit, and $\hbar = h/(2\pi)$.

1. Consider a one-dimensional crystal composed of N identical atoms of mass M. Let the lattice constant of the crystal be a. The forces acting on an atom are limited to those from the nearest neighbors, and the atoms are modeled as they are connected with the neighboring atoms by springs with spring constant K. The atoms are indexed by indices j $(j = 1, 2, \cdots, N-1, N)$. The displacement of the jth atom from its equilibrium position is expressed by u_j. The periodic boundary condition, $u_j = u_{j+N}$, is applied.

   (1) Express the equation of motion of the jth atom at time t using M, K, u_{j-1}, u_j, and u_{j+1}.

   (2) A solution of the equation of motion derived in (1) is given by a wave of the form $u_j = A\exp(\mathrm{i}kja - \mathrm{i}\omega t)$. Here, A is the amplitude of the wave, k is the wave number, and ω is the angular frequency. Express ω using K, M, k, and a. Draw the graph illustrating the relationship between ω and k in the first Brillouin zone.

   (3) Derive the phase velocity s of the wave obtained in (2) at $k \approx 0$.

   (4) The wave numbers take discrete values with equal intervals. Obtain the interval of the wave numbers.

   (5) Assume that the linear relationship $\omega = s|k|$ holds in the first Brillouin zone using s obtained in (3). At the boundaries of the first Brillouin zone, the angular frequency (Debye angular frequency) and the number of states per unit angular

frequency are denoted by ω_D and g_ω, respectively. Find the expressions for ω_D and g_ω. Note that N satisfies

$$N = \int_0^{\omega_\mathrm{D}} g_\omega \mathrm{d}\omega \,. \qquad ①$$

(6) Derive the specific heat capacity at constant volume C_v in the high temperature limit; $k_\mathrm{B}T \gg \hbar\omega_\mathrm{D}$. At a temperature T, the expectation value of the number of phonons with angular frequency of ω, $\langle n(\omega, T)\rangle$, and the internal energy of the one-dimensional crystal, $U(T)$, are given as follows:

$$\langle n(\omega, T)\rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}\right) - 1}, \qquad ②$$

$$U(T) \approx \int_0^{\omega_\mathrm{D}} g_\omega \hbar\omega \langle n(\omega, T)\rangle \mathrm{d}\omega \,. \qquad ③$$

2. Consider the carrier density in semiconductor in thermal equilibrium at a temperature T. Here, μ denotes the Fermi level, E_c the energy of the conduction band bottom, E_v the energy of the valence band top, m_n the electron effective mass, and m_p the hole effective mass. The electron density n_0 and hole density p_0 in semiconductor in thermal equilibrium are given as follows:

$$n_0 = N_\mathrm{c} \exp\left(\frac{\mu - E_\mathrm{c}}{k_\mathrm{B}T}\right), \qquad ④$$

$$p_0 = N_\mathrm{v} \exp\left(\frac{E_\mathrm{v} - \mu}{k_\mathrm{B}T}\right) \,. \qquad ⑤$$

Here, N_c and N_v are effective densities of states in the conduction band and the valence band, respectively, and are given as follows:

$$N_c = 2\left(\frac{m_n k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}, \qquad ⑥$$

$$N_v = 2\left(\frac{m_p k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}. \qquad ⑦$$

(1) Find the expression of the electron density n_i in the intrinsic semiconductor. The expression must include the bandgap E_g.

(2) Let $m_p = \sqrt{e}\, m_n$. Express μ of the intrinsic semiconductor using E_c, E_v, k_B, and T. Here, e is the base of the natural logarithm.

(3) Consider the case where the intrinsic semiconductor consisting of an element in group 14 is doped with donor impurities consisting of an element in group 15 to become the density N_D. The donor impurities are assumed to be completely ionized in the semiconductor. Express the equation showing the charge neutrality condition.

(4) Find the expression for n_0 in the doped semiconductor (extrinsic semiconductor) given in (3). The expression must include N_D and n_i.

（白紙　Blank sheet）

（白紙　Blank sheet）

Department of Materials Engineering
Graduate School of Engineering
The University of Tokyo

Entrance Examination for YR 2022

Fundamentals of Materials
【Problem 3】 Properties of materials

14:00 ～ 14:45
Wednesday, September 1, 2021

Examinee No.					

- Attentions -

1) The examination duration of this problem is 45 minutes.
2) Fill in your examinee number and name on the answer sheets.
3) You must use only the front side of four answer sheets. Write down the problem number and sheet number of answer sheets on each answer sheet.
4) Do not write your answer on the back side of the answer sheets. However, you may use the back side as draft sheets.
5) Answer in English or Japanese.
6) Fill in your examinee number on the booklets.
7) The booklets must NOT be taken out after the exam.