２０２１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】

2020 年 8 月 25 日（火）　14:00 ～ 14:45

- 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) 解答用紙は、1 枚目, 2 枚目, 3 枚目, 4 枚目の順に使用すること。
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) 解答用紙は試験監督の指示に従って、試験後に 1 枚ずつすべてアップロードすること。
7) 問題の PDF ファイルはすべての試験が終了した後に完全に削除し、配布や改変は絶対に行わないこと。

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

Entrance Examination for YR 2021

Fundamentals of Materials
【Problem 3】 Properties of Materials

14:00 ～ 14:45
Tuesday, August 25, 2020

- Attentions -

1) The examination duration of this problem is 45 minutes.
2) Fill in your examinee number and name on the answer sheets.
3) The answer sheets must be used in the order of sheet 1, sheet 2, sheet 3, and sheet 4.
4) Do not write your answer on the back sides of the answer sheets. However, you may use the back sides as draft sheets.
5) Answer in English or Japanese.
6) After the examination, upload all the answer sheets one by one according to the direction by the examination officers.
7) This problem PDF file must be completely deleted after all the examinations are completed and must never be distributed or modified.

（白紙 Blank sheet）

（白紙 Blank sheet）

（白紙 Blank sheet）

（白紙 Blank sheet）

【第３問】材料物性学

図１のような，格子定数aの2次元正方格子の各格子点に同種の原子が配置された2次元結晶中の電子状態を考察する。1電子波動関数を$\varphi(\mathbf{r})=\varphi(x,y)$とする。$\varphi(x,y)$は，境界条件，

$$\begin{cases}\varphi(x+L,y)=\varphi(x,y)\\ \varphi(x,y+L)=\varphi(x,y)\end{cases} \qquad ①$$

を満たすものとする。ここで，L/aは整数で，$L/a>>1$とする。固有状態の$\varphi(\mathbf{r})$と，そのエネルギーEは，シュレーディンガー方程式,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\varphi(\mathbf{r})+V(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r})=E\varphi(\mathbf{r}) \qquad ②$$

によって与えられる。ここで，mは電子の質量，$\hbar=h/(2\pi)$（h：プランク定数），$V(\mathbf{r})=V(x,y)$は，電子のポテンシャルエネルギーで,

$$\begin{cases}V(x+a,y)=V(x,y)\\ V(x,y+a)=V(x,y)\end{cases} \qquad ③$$

を満たす周期関数である。

いま,式③を満たす$V(\mathbf{r})$の特別な場合として,$V(\mathbf{r})\equiv 0$とする（自由電子モデル）。このとき，固有状態の波動関数は,

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})=\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \qquad ④$$

と書ける。ここで，iは虚数単位，$\mathbf{k}=(k_x,k_y)$は，波数ベクトルである。以下の問いに答えよ。

1. k_x,k_yに許される値が，$k_x=2\pi n_x/L$，$k_y=2\pi n_y/L$（n_x,n_y：整数）であることを示せ。

2. 式④の$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$の固有エネルギーが，$E_{\mathbf{k}}=\dfrac{\hbar^2}{2m}|\mathbf{k}|^2$となることを示せ。

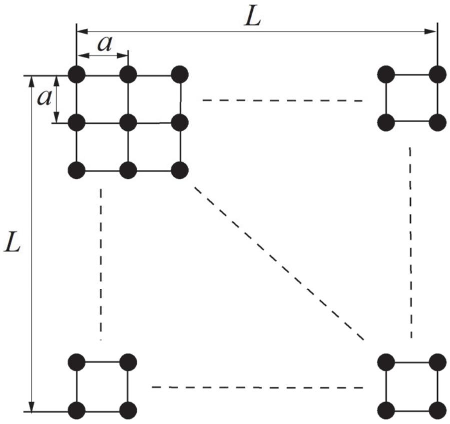

図１

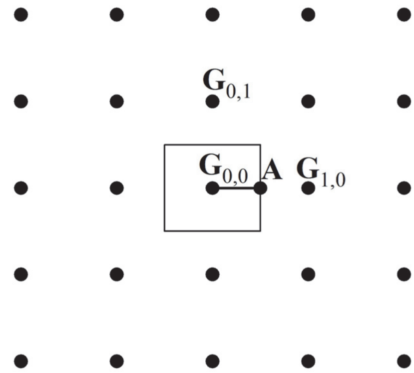

図２

この結晶の逆格子と第1ブリルアンゾーンを図２に示す。ここで逆格子点は,

$\mathbf{G}_{v,w}=\left(\dfrac{2\pi v}{a},\dfrac{2\pi w}{a}\right)$（$v,w$：整数）であり，第1ブリルアンゾーンは，点$\mathbf{G}_{0,0}$と，これに隣接する4つの逆格子点$\mathbf{G}_{1,0}$， $\mathbf{G}_{0,1}$， $\mathbf{G}_{-1,0}$， $\mathbf{G}_{0,-1}$を結ぶ4つの線分それぞれの垂直二等分線で囲まれた正方形の領域である。

3. 電子のスピン自由度を考慮して，第1ブリルアンゾーンに含まれる電子の状態数を求めよ。

4. 原子価が1のとき，フェルミ波数k_{F}とフェルミエネルギーE_{F}を求めよ。

一般に$V(\mathbf{r})$が式③を満たせば，固有状態の波動関数は,

$$\varphi_{\mathbf{q},n}(\mathbf{r})=u_{\mathbf{q},n}(\mathbf{r})\cdot\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}) \qquad ⑤$$

と書ける。ここで，$\mathbf{q}$は第1ブリルアンゾーン内の波数ベクトル，nはバンド指標，$u_{\mathbf{q},n}(\mathbf{r})=u_{\mathbf{q},n}(x,y)$は,

$$\begin{cases} u_{\mathbf{q},n}(x+a,y)=u_{\mathbf{q},n}(x,y) \\ u_{\mathbf{q},n}(x,y+a)=u_{\mathbf{q},n}(x,y) \end{cases} \qquad ⑥$$

を満たす周期関数である。$\varphi_{\mathbf{q},n}(\mathbf{r})$ のエネルギーを $E_n(\mathbf{q})$ とする。関数群 $E_n(\mathbf{q})$ は，バンド構造とよばれる。

5. 任意の $\mathbf{k}$ が $\mathbf{k}=\mathbf{q}+\mathbf{G}_{v,w}$ の形に一意的に分解できることに注意し，問い2を参考にして，自由電子モデルにおける $E_n(\mathbf{q})$ について，以下の問いに答えよ。

   但し，$\mu=\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{\pi}{a}\right)^2$，$\mathbf{A}=(\mathbf{G}_{0,0}+\mathbf{G}_{1,0})/2$ とする。また，縮重度については，電子のスピン自由度を考慮せよ。

   (1) $E_n(\mathbf{G}_{0,0})\leq 8\mu$ なる $E_n(\mathbf{G}_{0,0})$ をすべて求め，μ で表せ。また，それらの縮重度を答えよ。

   (2) $E_n(\mathbf{A})\leq 8\mu$ なる $E_n(\mathbf{A})$ をすべて求め，μ で表せ。また，それらの縮重度を答えよ。

   (3) 解答用紙に図３を書き写して，$\mathbf{G}_{0,0}$ と $\mathbf{A}$ を結ぶ線分上の $E_n(\mathbf{q})$ の概形を，$0\leq E_n(\mathbf{q})\leq 8\mu$ の範囲で描き，各曲線の縮重度を書き入れよ。

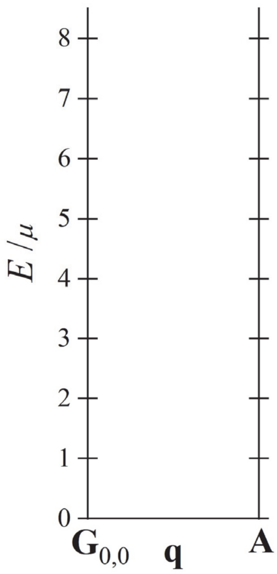

図３

【Problem 3】Properties of materials

Let us consider the electronic states in a two-dimensional crystal, in which the same kind of atom is placed at every lattice point of a two-dimensional square lattice with the lattice constant a, as shown in Figure 1. Let $\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(x, y)$ be the one-electron wavefunction. Assume that $\varphi(x, y)$ satisfies the boundary condition:

$$\begin{cases} \varphi(x+L, y) = \varphi(x, y) \\ \varphi(x, y+L) = \varphi(x, y). \end{cases} \quad ①$$

Here, L/a is an integer, satisfying $L/a >> 1$. $\varphi(\mathbf{r})$ in an eigenstate and its energy E are given by the Schrödinger equation:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}). \quad ②$$

Here, m is the mass of an electron, $\hbar = h/(2\pi)$ (h: Planck constant), and $V(\mathbf{r}) = V(x, y)$ is the potential energy of an electron, which is a periodic function satisfying

$$\begin{cases} V(x+a, y) = V(x, y) \\ V(x, y+a) = V(x, y). \end{cases} \quad ③$$

Now, we adopt $V(\mathbf{r}) \equiv 0$ (the free electron model), as a special form of $V(\mathbf{r})$ satisfying equations ③. Then, the wavefunctions of eigenstates can be written as

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}). \quad ④$$

Here, i is the imaginary unit and $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ is a wavevector. Answer the following questions.

1. Show that the values allowed for k_x and k_y are $k_x = 2\pi n_x / L$ and $k_y = 2\pi n_y / L$ (n_x and n_y : integers), respectively.

2. Show that the eigenenergy of $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ in equation ④ is $E_{\mathbf{k}} = \dfrac{\hbar^2}{2m}|\mathbf{k}|^2$.

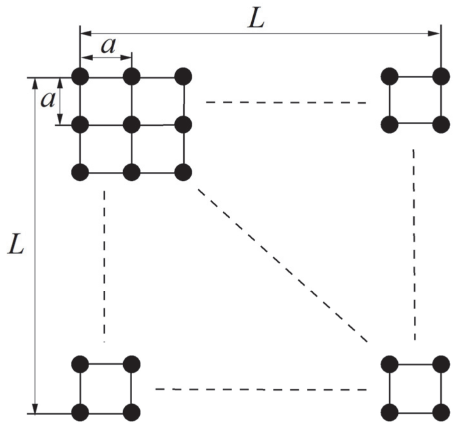

Figure 1

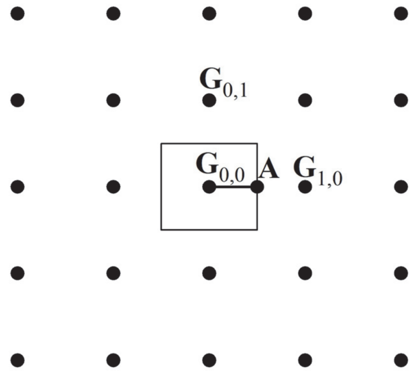

Figure 2

Figure 2 shows the reciprocal lattice and the first Brillouin zone for this crystal. Here, the reciprocal lattice points are $\mathbf{G}_{v,w} = \left(\frac{2\pi v}{a}, \frac{2\pi w}{a}\right)$ (v and w: integers), and the first Brillouin zone is the square area surrounded by the vertical bisectors of the four line segments connecting the point $\mathbf{G}_{0,0}$ and the four reciprocal lattice points $\mathbf{G}_{1,0}$, $\mathbf{G}_{0,1}$, $\mathbf{G}_{-1,0}$, and $\mathbf{G}_{0,-1}$, which are adjacent to $\mathbf{G}_{0,0}$.

3. Taking into account the electron spin degrees of freedom, obtain the number of electronic states contained in the first Brillouin zone.

4. When the atoms are monovalent, obtain the Fermi wavenumber, k_{F}, and the Fermi energy, E_{F}.

In general, when $V(\mathbf{r})$ satisfies equations ③, the wavefunctions of eigenstates can be expressed as

$$\varphi_{\mathbf{q},n}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{q},n}(\mathbf{r}) \cdot \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) . \qquad ⑤$$

Here, $\mathbf{q}$ is a wavevector within the first Brillouin zone, n is the band index, and $u_{\mathbf{q},n}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{q},n}(x, y)$ is a periodic function satisfying

$$\begin{cases} u_{\mathbf{q},n}(x+a,y)=u_{\mathbf{q},n}(x,y) \\ u_{\mathbf{q},n}(x,y+a)=u_{\mathbf{q},n}(x,y). \end{cases} \quad ⑥$$

Let $E_n(\mathbf{q})$ be the energy of $\varphi_{\mathbf{q},n}(\mathbf{r})$. The group of the functions, $E_n(\mathbf{q})$, is called the band structure.

5. Noting the fact that arbitrary $\mathbf{k}$ can be uniquely decomposed into the form $\mathbf{k}=\mathbf{q}+\mathbf{G}_{v,w}$, and referring to question 2, answer the following questions concerning $E_n(\mathbf{q})$ in the free electron model. Let μ be $\mu=\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{\pi}{a}\right)^2$, and $\mathbf{A}$ be $\mathbf{A}=(\mathbf{G}_{0,0}+\mathbf{G}_{1,0})/2$. With regard to the degree of degeneracy, take into account the electron spin degrees of freedom.
   (1) Find all $E_n(\mathbf{G}_{0,0})$ satisfying $E_n(\mathbf{G}_{0,0})\le 8\mu$, and express them using μ. Answer the degree of degeneracy for each of them.
   (2) Find all $E_n(\mathbf{A})$ satisfying $E_n(\mathbf{A})\le 8\mu$, and express them using μ. Answer the degree of degeneracy for each of them.
   (3) Copy Figure 3 on your answer sheet and therein draw the outlines of $E_n(\mathbf{q})$ along the line segment connecting $\mathbf{G}_{0,0}$ and $\mathbf{A}$ in the range of $0\le E_n(\mathbf{q})\le 8\mu$, and write down the degree of degeneracy for each curve.

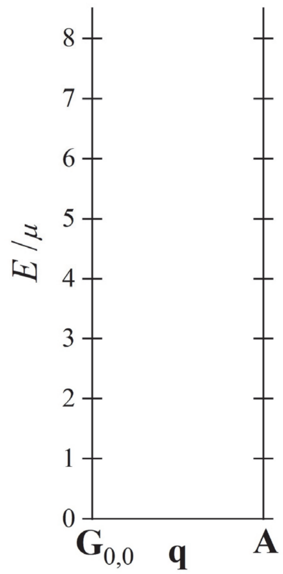

Figure 3