

- (1) 以下の文中の(a)~(e)に最も適切な用語を選択肢から選び、正しい文を完成させ、「(a) 位相」のように解答せよ。

「X 線は物質中の (a) により散乱され回折現象を起こす。この回折強度は (a) 数に応じて大きくなり、また構造因子により (a) 密度分布と結びつけられる。結晶構造解析において実験的に得られる (b) は、構造因子の 2 乗に比例するため、逆フーリエ変換の際に (c) 情報が失われる。構造解析では、この情報の復元が非常に重要であり、(c) 問題と呼ばれる。また、中性子は原子核により散乱されるが、その散乱能は主に核スピンの大きさによって決まる。そのため、重元素の位置決定には (d) 回折が、水素の絶対位置決定には (e) 回折の方が有利である」(15 点)

用語： α 線、位相、位置、X 線、回折強度、可視光、 γ 線、原子核、構造因子、紫外線、赤外線、中性子、電子、 β 線、陽子

「X 線は物質中の (a) 電子 により散乱され回折現象を起こす。この回折強度は (a) 電子 数に応じて大きくなり、また構造因子により (a) 電子 密度分布と結びつけられる。結晶構造解析において実験的に得られる (b) 回折強度. は、構造因子の 2 乗に比例するため、逆フーリエ変換の際に (c) 位相 情報が失われる。構造解析では、この情報の復元が非常に重要であり、(c) 位相 問題と呼ばれる。また、中性子は原子核により散乱されるが、その散乱能は主に核スピンの大きさによって決まる。そのため、重元素の位置決定には (d) X 線 回折が、水素の絶対位置決定には (e) 中性子 回折の方が有利である」

- (2) ダイヤモンドとゲルマニウムはいずれも絶縁体だが、室温では後者の方が極めて大きな数の電荷担体を発生する。そのような違いが現れる理由をバンド理論に基づき説明せよ。(15 点)

共にダイヤモンド構造を取り大きなバンドギャップを持つが、バンドギャップの大きさはダイヤモンドで 5.5 eV 程度、ゲルマニウムで 0.7 eV 程度とかなり異なる。これらのバンドは元々は炭素の場合は 2s-2p 軌道、あるいはゲルマニウムの場合は 4s-4p 軌道から成るバンドなので、定性的には各々の原子軌道のエネルギー差は後者の方が小さいことから、バンドギャップも小さいことが予測できる。

一般に絶縁体（半導体）において、温度が絶対零度の下では価電子帯は完全に満たされており電荷担体は生じない。一方有限温度ではバンドギャップを超えて伝導帯へと励起される電子と、電子が抜けた跡に価電子帯に生じる正孔とが電荷担体となる。この時バンドギャップが小さければ、同じ温度において励起準位を満たす電子数が増加し、電荷担体が増えることになる。そのため室温ではバンドギャップの小さいゲルマニウムの方が多量の電荷担体を発生し、半導体として振る舞うことになる。

- (3) Curie-Weiss の法則より、磁化率 χ は、 $\chi = C / (T - \theta)$ (C : Curie 定数, T : 温度, θ : Weiss 定数) のように書ける。 θ が正の場合、負の場合、0 の場合の 3 種類について、作用している相互作用の種類を示した上で反磁性、常磁性、強磁性、反強磁性のいずれに対応するかを解答した上で、3 種類各々の特徴を簡単に説明せよ。(15 点)

講義では式の展開を行っていないので覚えてくる感じになってしまうが、一応講義の範囲内では以下の通り。きちんと勉強したい場合は榎本研に配属してもらうか、他研究室でも気になって仕方ない場合は問い合わせを。

Weiss 定数が正の場合は強磁性的相互作用が働いており、隣接するスピンの向きを互いに揃えるような作用として現れる。転移温度以下では強磁性が発現する。強磁性が生じると、無限に小さな磁場に対して磁場方向にスピンを揃えるような自発磁化を生じるのが特徴で、磁場に対して履歴現象（ヒステリシス）を示す。

Weiss 定数が負の場合は反強磁性的相互作用が働いており、隣接するスピンの向きを反平行に並べる作用として現れる。転移温度以下では反強磁性が発現する。磁気ヒステリシスは生じないが、スピン配列の向きに平衡に磁場をかけた場合と垂直に磁場をかけた場合とで磁化率の挙動が異なる磁気異方性を示す。

Weiss 定数が 0 の場合は相互作用が働いておらず、全温度領域で各スピンサイトが互いに作用することなく統計的な分布として磁化を生じる常磁性を示す。磁場をかけると磁場の方向に磁化を生じるが、磁場を取り去ると再び磁化が 0 になる。

- (4) 蛍光とりん光の特徴的な差異を指摘し、そのような差異が現れる理由を説明せよ。(10 点)

蛍光では発光過程準位間のスピン多重度が同じため、遷移が許容遷移となって速い緩和による発光を示すことから、脱励起による発光の寿命は短い。一方でりん光は励起準位から無輻射遷移を経由して基底状態とはスピン多重度が異なる励起準位へと励起されるため、発光過程準位間のスピン多重度が異なり禁制遷移となることから、脱励起過程が遅くなり発光が長寿命となる。

- (5) 電磁気学によれば同じ電荷を持つ電子同士には斥力が働くが、BCS 理論によればフェルミ粒子である電子間に引力的相互作用が働くことによって超伝導現象が生じる。この時同じ符号の電荷同士に引力相互作用をもたらす機構を説明せよ。(10 点)

1 つ目の電子が結晶中を移動する際に正電荷を持つ結晶格子点を引きつけ、局所的に正電荷密度の高い状態を形成する。そこに 2 つ目の電子が近づくと、正電荷密度の高くなっている点に引きつけられる効果が現れるため、あたかも 1 つ目の電子が 2 つ目の電子を引きつけているかのような現象が観測される。このようにして形成される電子の対をクーパー対と呼び、本来フェルミ粒子である電子が、ボーズ粒子のように振る舞うことができるようになり、全ての電子が同じ量子状態を占める現象が見られる。