

第 9 回講義の質問等

1. Mott 絶縁体、電荷移動絶縁体などの違いがわかりました。(K1 君)
2. Bi 置換以外のガーネットでも同様の効果が期待できるのでしょうか？(K2 君)–A. 同様の効果というのが何を指すのか説明不足です。回答できません。
3. 典型的なウィルソン型絶縁体、モット絶縁体、電荷移動絶縁体において、Wilson gap, Mott-Hubbard gap, charge-transfer gap はそれぞれどの程度の大きさを持つのでしょうか。(N1 君)–A. Wilson gap の典型例は、通常の半導体のバンドギャップです。Si では 1.1 eV, GaAs では 1.5 eV, GaN では 3.4eV などです。Mott-Hubbard gap の例ですが NiS<sub>2</sub> では 0.8 eV です。Charge transfer gap の例ですが、MnO では 3.7eV 程度です。実験的には、光吸収スペクトルで見積もります。
4. バンド理論そのものの理解が不十分なので、ついていくのが大変でした。(O1 君)
5. 金属・半導体・絶縁体と全く異なるもので、同程度の磁気光学効果が出るという点で、磁気光学効果は非常にめずらしい現象であると感じました。(U1 君)–A. 面白い見方ですね。金属・半導体・絶縁体という分類は、あくまで電気伝導性を尺度にした分類なので、光学的性質では似ている。
6. 磁性半導体の半導体と磁性が共存する理由について知りたい。(Y 君)–A. 磁性半導体の一例として GaAs:Mn では Mn の局在電子系による磁性と GaAs のバンド電子系とが共存しています。
7. 図 6.2 で  $t_{2g}(\pi)$  が出来る理由は何ですか。同じく図 6.2 で配位子 X の準位が分裂する理由はなんですか。(K3 君)–A. 配位子の準位が分裂したわけではありません。3d<sub>e</sub>軌道と 2p<sub>π</sub>軌道が混成して分子軌道を作りますが、反結合軌道が  $t_{2g}(\pi)^*$ 軌道で、結合軌道が  $t_{2g}(\pi)$ 軌道です。(化学で分子軌道法を学んだはずですが・・・)
8. 横軸が k でのバンド図の見方はわかるのですが、スピンの関係した図の意味がわかりません。(K3 君)–A. 第 11 回授業で説明しますが、この図の横軸は DOS(density of states=状態密度)なのです。
9. 配位子場についてよい復習ができてよかったです。(M1 君)
10. 全然ついて行けませんでした。頭にはいらなかったです。(M2 君)–A. やっぱ基礎知識がある程度ないと、難しいかも知れませんね。どしどし質問してください。
11. 第 1 原理計算に興味をもった。(K5 君)
12. ハーフメタル、理解できてよかったです。(O2 君)

