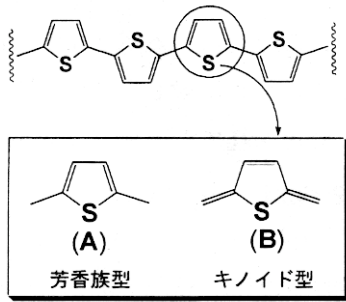
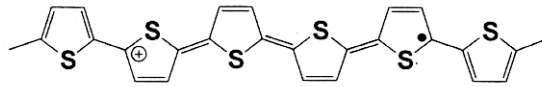


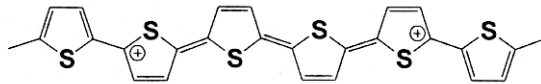
問1. 空欄に当てはまる語句を入れよ。正解は一つとは限らないが、論理が正しければ評価する。



(C) 構造



(D) 構造



次に、ポリマーの酸化によるバンド構造の変化をエネルギー準位の変化で見よう。芳香族型ポリチオフェンはほぼ絶縁体である（図1(a)）。これを一電子酸化して 構造を作ると、キノイド構造に由来する レベルが 内に生じる（図1(b)）。 レベルは、価電子帯のトップ付近と伝導帯の底付近に生じた2つのレベルである。 構造は正電荷をもつので、対アニオンがポリマー中に入る。これを という（シリコンなどの真性半導体に不純物を入れることを と呼ぶのに倣って、この名称が付けられている）。 が進むとポリマー鎖の別の部分にさらなる 構造ができるよりも、 の電子がもう1つ奪われる（酸化される）方がエネルギー的に有利なため、さらは一電子酸化が起って （図1(c)）が形成される。これまでの過程が繰り返され、酸化とドーピングが進むと、一本のポリマー鎖中で 構造が多数でき、それらが重なり合うようになる。これに伴って、価電子帯と伝導帯から レベルが供給されて になり（図1(d)）、ついには価電子帯部分と伝導帯部分でそれらがほとんどつながって金属的なバンド構造になる（図1(e)）。

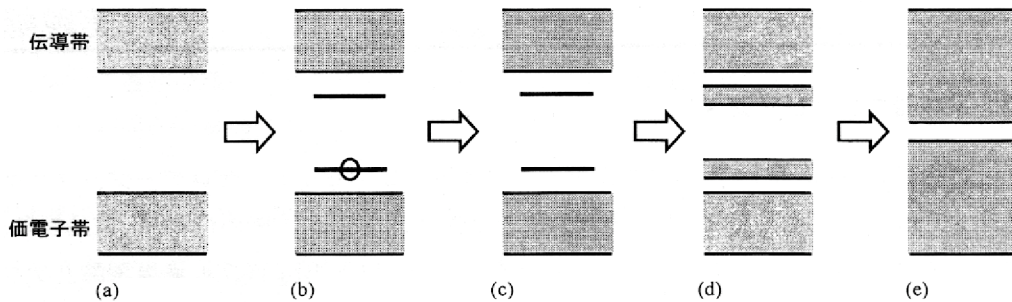
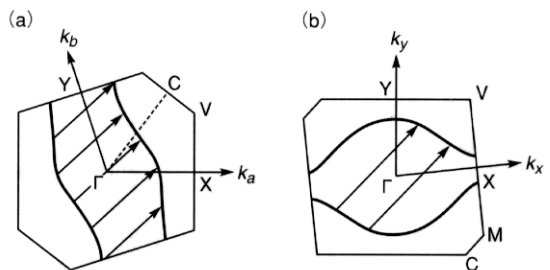
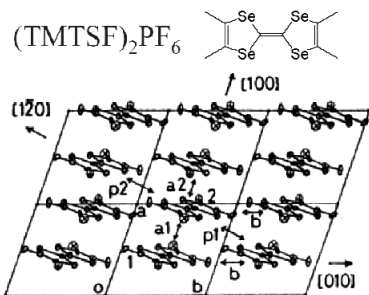
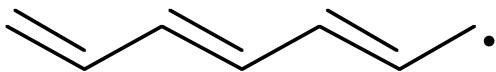


図1 アクセプタードーピングによるポリチオフェンのバンド構造の変化

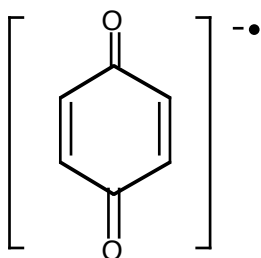
問2. 下は有機導体の結晶構造図である。このフェルミ面は、(a), (b) のどちらか？理由も添えよ。



問3. 次の物質のスピンド分布を NBMO 法によって求めよ。

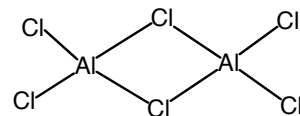


問4. 次の物質（セミキノンアニオンラジカル）の ESR スペクトルの概形を示せ。相対強度が要点である。



問5. 以下の化合物で、中央の塩素にかかわる結合はどのように説明できるか。2つの立場で説明せよ。

(1) VB 法。共鳴理論は、典型的な VB の取り扱いであることをヒントにせよ。



(2) MO 法。塩素の超原子価結合として取り扱えばよい。

問6. ヤーンテラー歪みについて、3～5行程度で説明せよ。図を用いてよい。