

小孔表面のダングリングボンドは水素によって覆われている。この多孔質 Si のフォトルミネッセンスを測定した。1.08 eV と 0.83 eV の付近にブロードなピークが観測された。1.08 eV の発光は伝導帯から不純物バンドへの遷移で、0.83 eV の発光はダングリングボンドに係る深いドナーが形成されていて、それから不純物バンドへの遷移であると考えられる。

19. 金属水素への He 原子の溶解性の理論的研究

牧野 至 洋

巨大惑星の内部のモデルを考えるうえで重要な働きをする超高圧下（数 Mbar～数百 Mbar）での金属水素への He 原子の溶解性を第一原理から計算した結果を報告する。この計算にあたって我々は、平面波バンド計算法により系の全エネルギーを求めた。この方法では、非常に多くの平面波を必要とするが我々は短波長の平面波を取込んだ基底関数を用いることにより比較的少数の平面波により非常に精度良く計算できた。この計算法の定式化とその有効性が非常に大きいこと、および H-He 系への応用、我々の得た計算結果と過去の計算結果との比較について報告する。

○大阪大学大学院基礎工学研究科物理系専攻

- | | |
|--|-------|
| 1. fcc - fct マルテンサイト変態における変態エンブリオの透過電子顕微鏡像コントラストの計算 | 渡邊 昌勝 |
| 2. Fe - Ni 合金の高圧下における磁化測定 | 浅野 雅己 |
| 3. 三角格子反強磁性体 CsFeBr ₃ の熱的磁氣的性質 | 岡本 匡史 |
| 4. ステップのある W (001) 表面再構成の計算機実験 | 萩野 徹男 |
| 5. 高温超伝導体 YBa ₂ Cu ₃ O _{7-δ} の Cu 置換による研究 | 川治 直樹 |
| 6. Ib 型のダイヤモンドのカラーセンターにおける光励起現象
～ NV センターのブリーチング～ | 奥田 真介 |

- | | |
|---|-------|
| 7. グラファイト層間化合物の磁気相転移
～ CoCl ₂ -GIC とその混晶系の秩序形成～ | 金星 章大 |
| 8. 積層欠陥のある半導体の電子状態 | 岸田 貴司 |
| 9. 重い電子系における基底状態の核磁気共鳴による研究 | 教学 正文 |
| 10. Al 合金におけるガスイオン照射誘起偏析、析出の研究 | 谷村 純二 |
| 11. MBE 法により段差基板上に成長した GaAs / AlAs ヘテロ構造
の光学的・電気的特性 | 岡本 直哉 |
| 12. LaSr 系酸化物高温超伝導体の NQR による研究 | 近藤 貴幸 |
| 13. TiO ₂ の高温高圧下における X 線回折 | 佐藤 弘昌 |
| 14. 高密度固体水素における格子変形と方向秩序の協力転移 | 高森 靖博 |
| 15. ハロゲン架橋金属錯体における非線形励起状態と光吸収スペクトル | 田川 幸雄 |
| 16. 電子線照射した希薄 AlFe 合金のメスバウアー効果 | 富士沢 敦 |
| 17. 強結合超伝導体 Nb ₃ Sn, V ₂ Hf の NMR による研究 | 柴田 直也 |
| 18. 段差基板上に MBE 成長した GaAs の電気的特性 | 玉岡 英二 |
| 19. Cu ₂ Sb 型遷移金属化合物の電子状態と磁性 | 長南 徹 |
| 20. Si における粒子線照射欠陥 | 本田尚一郎 |
| 21. 金属水素-ヘリウム混合系の理論的研究 | 牧野 至洋 |
| 22. [PbSe / SnSe] エピタキシャル人工格子の圧力誘起構造相転移 | 新垣 紀子 |
| 23. 2H 型 TaS ₂ 遷移金属層間化合物の電子状態と磁性 | 富嶋 茂樹 |
| 24. 高圧、高温下に於ける黒鉛の融解挙動 | 水原 栄治 |
| 25. Si (100) 再構成表面における 2p 内殻からの直接光電子放出 | 山崎 竜司 |
| 26. 酸化物高温超伝導体の ⁵⁷ Fe Mössbauer 効果 | 吉田 誠 |
| 27. 層状物質遷移金属ダイカルコゲナイドに於ける電子-格子相
相互作用と超伝導 | 西尾 好正 |
| 28. 固体ハロゲンの圧力誘起分子解離相転移 | 藤久 裕司 |
| 29. 極低温でのファラデー効果による磁気秩序化の観測
～高周波帯確率測定装置の開発と強磁性混晶の動特性～ | 横谷 麻子 |
| 30. Fe - Pd 合金における規則-不規則変態 | 張 進 |