

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 |