

晶構造は NaCl 型である。(3) HgTe は 120 kbar でさらに, NaCl 構造から別の構造へと相転移する。なお, このときも電氣的には金属的である。(4) HgSe は 140 kbar から 160 kbar , 100 °C 以上において新しい半導体相の存在する可能性がある。

20. 固体 Xe の金属化の非経験論的研究

— H C P 構造について —

得 居 康 男

Nelson, Ruoff によって固体 Xe の金属化が 330 kbar の圧力で起こることが観測された。

その後の詳しい実験によると, 圧力 360 kbar で電気抵抗値 R は 5 桁急減し, その後 $\log R$ は圧力にはほぼ比例して減少する。比抵抗値が約 $10^2 \mu\Omega\text{cm}$ で金属になるとすると, 固体 Xe は結晶構造の転移を経た後, 約 550 kbar で連続的に金属になることが予想される。

最近 Ray と Trickey 及び Christensen による理論的研究があるが, 実験を説明するに至らず, また hcp の可能性が見落されている。

我々は hcp 構造について, Local-density functional 法を用いて core electron 及び 5s, 5p の valence electron を, それぞれ atom-like 及び SAPW を用いて self-consistent に計算をした。 $T=0$ における Gibbs の自由エネルギーをこれまで求められている fcc 及び bcc の値と比較して, 安定な結晶構造を議論する。

またエネルギー・バンド・ギャップにおけるスピン-軌道相互作用の効果も議論する。

21. Cu-Sn 合金のオメガ変態とマルテンサイト変態

谷 本 益 久

Cu-Sn 合金の β 相は不規則 bcc 構造で室温に急冷すると DO_3 型規則格子 (β_1 相) に転移する。しかしながら, 一般にはその電子回折像に規則格子斑点以外に顕著な散漫散乱を伴った異常回折斑点が出現する。これは急冷相が単純な DO_3 型規則構造のみではないことを示し, これらの異常回折斑点及び散漫散乱の原因については種々の説があるが, まだ解っていない。