

金属表面におけるミュオン&水素バンド
Band structures of muon and hydrogen on metal surfaces

中西寛、笠井秀明

H. Nakanish, H. Kasai

大阪大学大学院工学研究科

Graduate School of Engineering, Osaka University

「プロトン・ミュオンで探る新物性と量子ダイナミクス」班では、物質環境下におけるプロトン・ミュオン等の粒子の振る舞いに関する理論的取り扱い方法、およびその第一原理計算コードを開発し、それら粒子の関わる新規物性を探索している。今回は、Pd(001)表面におけるミュオン及び水素（H, D, T）のバンド構造について報告する。

ミュオン（正確には反ミュオン： μ^+ ）は、陽子と同じ電荷とスピンをもつ安定な素粒子で、物性分野では、プローブ粒子として活用されている（ミュオン顕微鏡）。ミュオンの質量は、陽子の約 $1/9$ で、物質中では水素の軽い同位体としてふるまう。

前回、ミュオンの質量は、水素の同位体原子（H,D,T）に比べ著しく小さいため、非局在性が顕著になり、運動エネルギーの増加傾向が著しく、その分、同じ準位においてより広範囲のポテンシャルエネルギーの影響を受け、縮重度、エネルギーのとびに顕著な変化をもたらしていることを報告した。

今回、シミュレーションコードに、量子状態の波数依存性を計算するルーチンを加え、Pd(001)表面上のミュオン及び水素に適応したので、その結果を報告する。表面上に非局在化しているにもかかわらず、ミュオンのバンドは、基底状態付近では、ほぼフラットで、-2.25eV 付近以上の励起状態で分散関係が見られるようになる(図1)。詳細は会議で報告する。

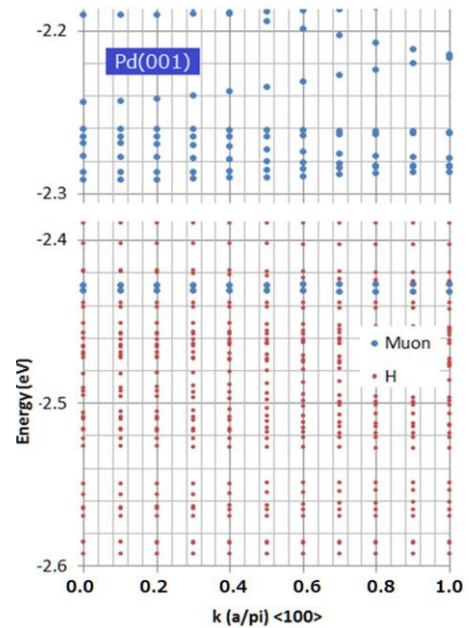


図1. Pd(001)表面におけるミュオン及び水素のバンド構造 <100>方向の波数依存性

研究成果の招待講演

- [1] Hiroshi Nakanishi, “Quantum simulation for hydrogen atom motion on solid surfaces” : Workshop on Physics of Hydrogen in Materials, ISIR, Osaka University, 2012/01/30-31
- [2] 中西 寛、「ミュオンがみる固体表面・サブ表面」：領域10シンポジウム「超低速ミュオン顕微鏡：その限りない可能性を探る」、日本物理学会2011年秋季大会、富山大学、2011/09/21-24
- [3] Wilson Agerico Dino、「表面・界面・固体中のプロトン伝導とその量子ダイナミクス計算」：領域4シンポジウム「ナノスケール量子輸送の計算科学的研究の現状・展望と次世代スパコンへの期待」日本物理学会2011年秋季大会、富山大学、2011/09/21-24
- [4] 笠井秀明、「水素アトミクスの理論研究とその展望」：領域10シンポジウム「水素アトミクス科学の展望—プロトニクスに向けて」、日本物理学会2011年秋季大会、富山大学、2011/09/21-24