

## 第一原理量子状態計算コード”Naniwa”の開発と研究事例

### Development of the quantum state simulator “Naniwa” and its case study

中西寛、笠井秀明

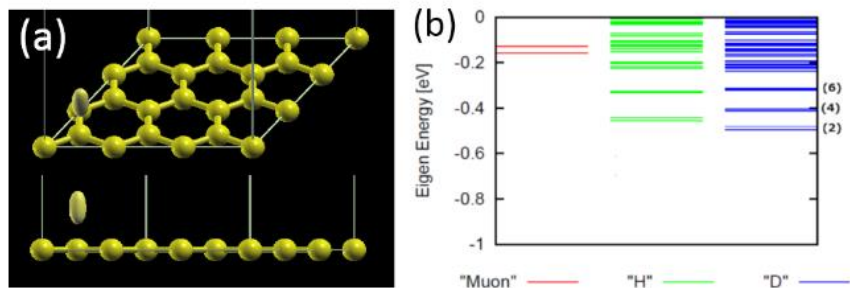
H. Nakanish, H. Kasai

大阪大学大学院工学研究科

Graduate School of Engineering, Osaka University

我々はこれまで電子と同じく水素原子核にも量子力学を適用するための計算方法を模索してきた。その中で、様々な元素からなる様々な構造の固体表面に対して一様の近似精度で評価することが可能な第一原理(電子状態)計算手法の現在の利点を生かしつつ、その固体における水素の量子力学的振る舞いを記述する方法として電子系//水素原子核//環境格子系の二段階の断熱近似を用いる手法を実践してきた。この方法で、金属表面上の吸着水素原子の基底状態の運動量分布や、振動励起エネルギーが、定量的に実験結果と一致することも示してきた[1-3]。今回開発してきたNaniwaコードに、新たにホスト物質構造の空間対称性を活用して固有エネルギーの計算精度を上げるルーチンを実装した。ホスト物質が graphene の場合の結果を以下に報告する。graphene の炭素原子 18 個に対し、1 個のプロトン ( $X=p^+$ ) 又は正ミューオン( $X=\mu^+$ )を入れた場合 ( $X/\text{graphene } 3 \times 3$ ) の  $X$  が受けるポテンシャルエネルギーを graphene の格子緩和を考慮して計算し、改良したNaniwaコードによる  $X$  の量子状態の計算結果を図1に示す。基底状態の波動関数は、炭素原子直上の top サイトに局在している。 $X= p^+$ ,  $D^+$  (重水素核) の場合は、単位胞に top サイトが 2 つあるため、二重縮退となっている。第 1 励起状態は、横振動の励起モードで、2 方向 $\times$ 2 サイトで、四重縮退を示す。一方  $X=\mu^+$  の場合は、局在性が弱く二つの top サイト上の  $X$  の量子状態はカップルし、縮退は解けている。また、励起状態は運動エネルギーが大きくなりすぎ、励起束縛状態は存在しない。よって、当然ながら水素の場合に観測される振動状態も存在しない。Graphene の  $\mu$  SR 実験結果から graphene 上の水素の状態を推定するには注意が必要ではあるが、幸い基底状態については、観測は可能であることがいえる。

図1. (a) graphene 上の  $p^+$  の基底状態の波動関数。  
(b) graphene 上の  $X=\mu^+$ ,  $p^+$ ,  $D^+$  (deuteron:  $p^+ + n^0$ ) の固有エネルギー。エネルギー原点は、 $X$  が、Graphene より孤立している場合のエネルギーである。



[1] H. Kasai, et al., Progress in Surface Science, 44 (1993) 101.

[2] K. Nobuhara, et al., Surface Science, 507 (2002) 82.

[3] N. Ozawa, M. Sakaue, H. Kasai, Journal of Vacuum Society of Japan, 53 (2010) 592.