

ミュオンを用いた酸化物内の水素位置・荷電状態のシミュレート

小嶋健児 (Kenji M. Kojima)

KEK 物構研、J-PARC センター、総研大 (2018 7/31 まで)

→ TRIUMF Centre for Molecular and Material Science (TRIUMF-CMMS) and
Quantum Matter Institute, University of British Columbia (UBC-QMI), CANADA

ミュオン粒子 (ミュオン) は、陽子加速器から得られる寿命が $2.2\mu\text{s}$ の素粒子で、生成メカニズムが原子核反応を用いた核破砕中性子ビームと似ているので、その利用施設は、加速器を用いた中性子施設に併設されていることが多い。現在、スイスの PSI とカナダの TRIUMF で直流状ミュオンビームが供給され、イギリスの ISIS, RIKEN RAL と東海村の J-PARC MLF でパルス状ミュオンビームが供給されている。TRIUMF を除く施設は、中性子ビームの施設としても有名である。

ミュオン粒子には、正電荷を持つ μ^+ と負電荷を持つ μ^- があるが、物性物理の研究には、圧倒的に μ^+ の方が用いられる。正の電荷を持つため、物質を構成する原子核に捕獲されず、水素の放射性同位体 (質量が軽水素の $1/9$) として、格子間水素と同様の位置を取るからである。加速器から得られる μ^+ ビームは 100% スピン偏極していて、その時間発展を観測するミュオン スピン緩和法 (μSR) を用いて、物質の磁性、超伝導性 (磁場侵入長) のプローブとして様々な酸化物で用いられている [1]。

一般に、酸化物中の格子間水素には、3つの荷電状態がありえる：正に帯電した H^+ 、中性の H^0 、負に帯電した H^- である。中性状態 H^0 は1個の電子と結合しているので、水素 (=ミュオン) には、結合した電子のスピンからの大きな磁場がかかる (常磁性状態)。この状態は残りの2種の反磁性状態 (0個もしくは2個の電子と結合し電子スピンの磁場がほぼキャンセルされる) とは明確に異なる。したがって、格子間水素の荷電状態が中性か、それ以外の正負帯電状態かはミュオンで明瞭にわかる [2,3]。

講演では、酸化物ワイドギャップ半導体 IGZO および ZnO を中心に、ミュオンで得られる格子間水素に関する知見を紹介する。

本研究の一部は KEK ミュオン共同利用実験 S 型課題(2013MS01) で行われた。

【参考文献】

- [1] “Materials and Life Science Experimental Facility at the Japan Proton Accelerator Research Complex IV: The Muon Facility”, Wataru Higemoto, *et al.*, Quantum Beam Science, 1, 11-35 (2017).
- [2] “Oxide muonics: II. Modelling the electrical activity of hydrogen in wide-gap and high-permittivity dielectrics” (Review), S.F. J. Cox, J. Phys.: Condens. Matter 18 (2006) 1079–1119.
- [3] “Muonium as a model for interstitial hydrogen in the semiconducting and semimetallic elements” (Review), S.F.J. Cox, Rep. Prog. Phys. 72 (2009) 116501.