

研究責任者名 Name	池田 進 IKEDA Susumu	所属機関 Affiliation	高エネルギー加速器研究機構
受理番号 Proposal No.	T12-02	研究課題名 Program title	表面転位層におけるプロトニクス状態の研究

研究を終了しましたので、下記の通り報告します。

<p>成果の概要：</p> <p>計算機シミュレーションを援用して表面転移層におけるプロトニクス状態を調べている。今回、走査トンネル顕微鏡で観測される銅表面に吸着したメラニン分子内の水素原子（プロトン）状態によりトンネル電流が変化する現象を密度汎関数法に基づく第一原理計算を援用して解析・調査した。第一原理計算の結果をもとにモデルハミルトニアンを構築し、非平衡グリーン関数法により電流を解析した。その結果、トンネル電流は、電子とメラニン分子のプロトン振動の相互作用によって影響をうけることが分かった。さらに、電子とメラニン分子内プロトン振動間の相互作用効果は、温度上昇に伴い増強されて、低エネルギーから高エネルギーの振動が誘起される。さらに温度を上げていくと電流は飽和してしまった。また、メラニン分子内の隣り合う N 原子の非共有電子対間の反発作用が強くなるとメラニン分子面内の低エネルギー振動（フォノン）が増強され、逆に良くなると振動は抑制される。その結果、よりメラニン分子は、不安定な互変異性体に変化し I-V 特性がスイッチングされることがわかった。</p> <p>nano-SiH は発光し、且つ、H を D に置換すると発光にブルーシフトが起こる材料として着目されている。この Nano-SiH に対して提案されている水素ポテンシャルを用いて、中性子散乱強度を計算し、実験値との比較を行った。比較の結果、強度の運動量依存が異なっていることが明らかになり、理論的研究をさらに進める必要があるとの結論に至った。</p> <p>(英文) We have investigated the Proton-Electron-phonon-states on surface and interfaces with the aid of the computer simulations. We report the electron transport properties about the melamine molecules adsorbed on a Cu(100) surface. With using the first principles calculation results, a effective Hamiltonian for a system composed of scanning tunneling microscope, melamine molecule, and Cu(100) surface, taking into account electron-molecular vibrations(vibron) interactions within the melamine molecule. Then, the electronic current was formulated by the nonequilibrium Green's function method. Results show that current is affected by the electron-vibron interactions. Furthermore, the electron-vibron interaction effect is found to be enhanced as temperature increases to where higher-energy vibrons begin to be excited at lower energies. However, current becomes uniform at higher temperatures. The reduction or induction of the repulsion of lone pairs of consecutive N atoms causes the induction or reduction of the low-energy in-plane vibrational motion, which in turn causes the switching of the I-V characteristics between less stable melamine tautomers.</p> <p>Furthermore, we have calculated neutron scattering intensities, using several theoretically proposed H-potentials on nano-SiH, and compared those with measured values by neutron scattering experiments. The results have suggested that H-potential on nano-SiH should be improved.</p>				
研究成果を公開しているホームページアドレス				

研究成果の 公表	口頭研究発表 件数	査読付きの学術論文数	プロシーディング 論文数	その他 (投稿中を含む)
	3	2	0	0

成果の公表リスト（それぞれの枠に番号をつけて記入願います。）

口頭研究発表		
1. 中西寛、笠井秀明 “金属表面近傍におけるミュオン・水素のバンド構造と荷電状態” 日本物理学会第68回年次大会，横浜国立大学，2012年9月		
2. 笠井秀明 “NANIWA seriesの開発と水素研究” 第10回水素量子アトムクス研究会，高エネルギー研究機構，2012年8月		
3. 池田 進 “中性子で観るポーラス Si 上の水素ポテンシャル” 第10回水素量子アトムクス研究会，高エネルギー研究機構，2012年8月		
査読つきの学術論文(雑誌名等には 巻、頁、発表年を記載)		
1	著者名	Abdulla Sarhan, Mamoru Sakaue, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai
	タイトル	Electron-Vibron Interaction Effects on Scanning Tunneling Microscopy Current through Melamine Adsorbed on Cu(100)
	雑誌名等	J. Phys. Soc. Jpn. 81 (2012) 104711
	URL	http://jpsj.ipap.jp/link?JPSJ/81/104711/
2	著者名	Ryan Lacdao Arevalo, Mary Clare Escaño, Elod Gyenge, Hideaki Kasai
	タイトル	A theoretical study of the structure and stability of borohydride on 3d transition metals
	雑誌名等	Surface Science, Vol. 606, pp. 1954 (2012).
	URL	http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0039602812002932
3	著者名	
	タイトル	
	雑誌名等	
	URL	
プロシーディング論文(雑誌名等には 巻、頁、発表年を記載)		
1.	著者名	
	タイトル	
	雑誌名等	
	URL	
2.	著者名	
	タイトル	
	雑誌名等	
	URL	
3.	著者名	
	タイトル	
	雑誌名等	
	URL	
その他（学位論文、紀要、投稿中の論文を含む）（URL を記載）		
1.		
2.		
特記（本研究に関係した、新聞記事・著作、受賞など）		
1.		
2.		