

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.	T11-19	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。

成果の概要

Abstract

(和文)

重水素が吸着したゲルマニウムの構造および振動特性を、密度汎関数法 (DFT) を用いて理論的に調査した。Ge (001) 面上でモノハイドライド Ge 原子列とダイハイドライド Ge 原子列が並んだ場合、二つの異なる構造が安定して存在することを見出した。その二つの構造は走査トンネル顕微鏡で観測されていたものであった。それぞれの構造において振動モードを調べたところ、モノハイドライド Ge 原子列とダイハイドライド Ge 原子列には、それぞれ局在した振動モードがあり、その振動エネルギー差は、meV のオーダーであることを見出した。この振動エネルギー差は、重水素の s 状態と Ge の表面垂直方向 p 状態および、表面平行かつ原子列に垂直方向の p 状態で混成の仕方が異なることに由来することが分かった。

(英文)

Structures and vibrational properties of deuterium adsorbed germanium surfaces were studied theoretically by the density functional theory (DFT) calculations. Two different stable adsorption structures constructed by mono-hydride rows and di-hydride Ge rows are confirmed on Ge (001) surface, which have been identified by the scanning tunneling microscope. Localized vibration states exist for mono-hydride and di-hydride Ge rows separately with a difference in the order of meV. This difference in vibration states can be explained based on the different manner of hybridizations between the s-state of D and the two p-states of Ge, which are perpendicular to the row direction.

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)
	0	0	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
坂上護，笠井秀明，石原達己，中西基浩 "希土類系酸化物における酸素イオン伝導" 日本物理学会第67回年次大会，関西学院大学，2012年3月  國貞雄治，中西寛，Wilson Agerico Diño，笠井秀明 "酸素分子共吸着銀表面上での水素分子のオルソ・パラ転換における分子拡散及び束縛回転状態の影響" 日本物理学会第67回年次大会，関西学院大学，2012年3月  中西寛，笠井秀明 "固体表面近傍でのミュオン非局在効果" 日本物理学会第67回年次大会，関西学院大学，2012年3月
査読付きの学術論文(URLを記載)
プロシーディング論文(URLを記載)
その他（学位論文、紀要、投稿中の論文を含む）(URLを記載)
特記（本研究に関係した、新聞記事・著作、受賞など）