



表面遷移相におけるプロトニクス状態の研究

sc-NANIWA グループ:池田 進(KEK)

物質に表面から侵入する水素の原子核(プロトン)の量子力学的な振る舞いを、
計算機シミュレーションを使って調査研究しています。

物質を構成する原子は、原子核と電子から出来ています。これら粒子の振る舞いがわかれば、もとの物質の性質(物性)を理解することができます。

従来の物質のシミュレーションでは、原子核は電子より十分質量が大きい為、電子のみ量子力学で扱うものが主流でした。しかし、最も質量の小さな水素に関しては、量子効果が、強く表れるため、水素の原子核についても量子力学で扱わなければなりません。このような量子力学のシミュレーションには膨大な計算が必要なため、スーパーコンピュータを活用して研究しています。

KEKの高強度中性子ビームを活用することにより、物質中のプロトンの量子力学的振る舞いを確認することができます。中性子回折実験と計算機シミュレーションの両輪にて研究を行っています。

本年度は、(1)半導体のゲルマニウム表面で水素がつくる特異な構造と(2)パラジウムと銀の合金表面での水素の振る舞いとその合金への影響を調べました。これらの成果は物性物理学における学術的な知見だけでなく、半導体の表面処理技術や、バイオマスからの水素燃料の取り出し技術と深い関係があり、それらの技術開発に貢献することができます。

