



## 表層における水素複合準粒子の研究

sc-NANIWA グループ:大友 季哉(KEK)

物質中へ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。原子核は、さらに分解することが出来ますが、日常我々が接する物質の性質(物性)は、原子核と電子を基本粒子として、それら粒子の振る舞いがわかれば、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の高輝度中性子ビームを用いた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、クリーン水素エネルギーの基盤技術においてキーエレメントの一つと考えられているパラジウム(Pd)での水素吸収反応を調べ、水素の運動とパラジウム表面原子の運動が協力して、特異な特性を生み出す機構を明らかにしました。

