

結晶格子中におけるプロトンのセルフトラップ状態

発表者：宮城一生

指導教官：友寄友造

セルフトラップとは、プロトンなどの軽い粒子が金属結晶中に入り込み、周りの格子点を成す結晶と相互作用をしてそれらを押し広げ、全体としてエネルギー的に安定状態にさせ、そのときのポテンシャル場の中に粒子が局在するようになることを言う。

今回の研究では、仮想的に無限に広い二次元の正方結晶を考え、その中にプロトンが進入してセルフトラップされたときのプロトンの波動関数、及び金属結晶原始の変位をコンピュータを使った数値計算により求めた。このとき、無限に広い二次元正方結晶を考えているが、計算するときには無限に取れないので、近似的に理論が成立する範囲で計算を行った。範囲を示した図及び計算結果を以下に示す。

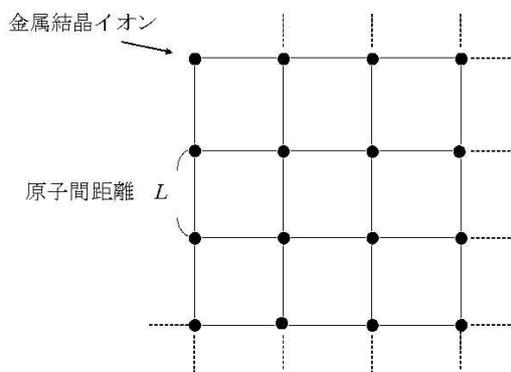


図 1: 二次元正方結晶

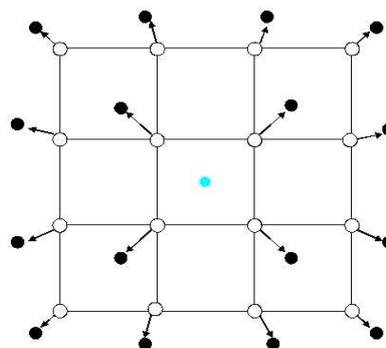


図 2: セルフトラップ後の金属原子の位置

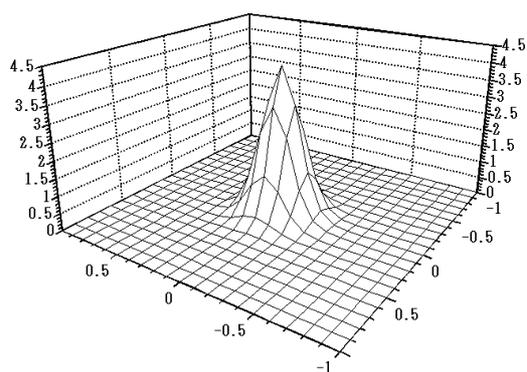


図 3: 波動関数の分布

粒子番号	x 方向	y 方向
1	0.199940	0.199940
2	-0.199940	0.199940
3	-0.199940	-0.199940
4	0.199940	-0.199940
5	0.033852	0.090814
6	-0.033852	0.090814
7	-0.090814	0.033852
8	-0.090814	-0.033852
9	-0.033852	-0.090814
10	0.033852	-0.090814
11	0.090814	-0.033852
12	0.090814	0.033852
13	0.039962	0.039962
14	-0.039962	0.039962
15	-0.039962	-0.039962
16	0.039962	-0.039962

図 4: 変位の値。単位は 1 \AA 。 $1 \text{ \AA} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$