

(様式 2)

議事録番号

提出 2024 年 3 月 4 日

会合議事録

研究会名：コンプトン散乱研究会

日 時：2024 年 2 月 3 日 13:00~16:00

場 所：オンライン開催 (ZOOM)

出席者：(議事録記載者に下線) 敬称略

櫻井 浩 (群馬大)、鈴木宏輔 (群馬大)、安藤智也 (群馬大)、

竹内 浩 (金属技研)、辻 成希 (JASRI)、水野勇希 (JASRI)

大槻純也 (岡山大)、小寺健人 (兵庫県)、小泉昭久 (兵庫県)

計 9 名

議題・趣旨：「コンプトン散乱研究会」

学術分野・産業分野におけるコンプトン散乱測定の有効利用や、開発すべき技術要素、また、これまでに得られた成果を、上記の分野に波及させるための取り組みについて議論する。ここで議論した内容を、BLs アップグレード検討ワークショップで紹介し、SPRING-8 次期計画における当研究会からの提言・要望につなげたい。

研究会プログラム

13:00 ~ 13:10 : 開会挨拶・趣旨説明 櫻井 浩 (群馬大)

13:10 ~ 13:30 : BL08W の現状について 辻 成希 (JASRI)

『圧縮センシングを利用した 3 次元運動量密度の再構成解析の可能性』

13:30 ~ 13:45 : スパースモデリングを用いた A1 の運動量密度の再構成

櫻井 浩・岸本篤実 (群馬大)

13:45 ~ 14:00 : 圧縮センシングを用いた再構成解析における

プロファイル数と方位についての検討

小泉 昭久 (兵庫県立大)

14:00 ~ 14:15 : 全固体フッ化物イオン電池の正極材料 $\text{Ca}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{FeO}_2\text{F}_x$ の

コンプトンプロファイルの測定と理論計算

安東 智也 (群馬大)

14:15 ~ 16:00 : 総合討論

議事内容：

○ 辻 (JASRI) より、BL08W の現状についての説明があった。BL08W では、実験ハッチの改造が行われ、しばらくの間、有効利用されていなかった B ハッチ

チ内の構造物が撤去され、そこに、A ハッチで行われていた磁気コンプトン散乱測定装置類が移設された。これにより、A ハッチでは、実験装置類の混在状態が解消され、高分解能コンプトン散乱スペクトロメーターが常設されることになった。今回のハッチ改造の結果、各実験の立上げ時における調整が効率的に行えるようになり、作業時間を、大幅に短縮することが可能になった。B ハッチに移設された磁気コンプトン散乱測定装置も、基本的に常設となるが、この測定に利用されている超伝導マグネットが不調であり、今後の実験課題に影響が出る恐れがあることが伝えられた。

○「圧縮センシングを利用した 3 次元運動量密度の再構成解析の可能性」に関する発表が 2 件あった。従来、運動量密度の再構成解析には、直接フーリエ変換法が利用されてきたが、この方法の場合、解析の中でデータ補間を利用するため、多数の方位で測定されたコンプトン・プロファイルが必要になる。一方、圧縮センシングを利用した解析では、解析時に得られる $B(r)$ 関数を再現するように運動量密度を決めるため、原理的には、多数のプロファイルを必要としない。

(J. Otsuki *et.al.*, <https://arxiv.org/abs/2210.07701>)

しかし、「どのような方位で測定された」「幾つの」プロファイルを用いれば良いのか、検証が必要である。櫻井・岸本は、単純な自由電子モデルに基づくプロファイル、および、A1 で測定された複数方位のプロファイルを利用して、解析条件を探っている。小泉は、理論的に求められた Li のプロファイルを用いて、観測方位とプロファイル数による解析結果（運動量密度）の比較を行っている。今回の発表と議論から、立方晶の試料の場合、対称性の良い [111] 軸方向のプロファイルを用いる必要性は無く、(001) 面内で観測される 3~5 方位のプロファイルにより、適切な運動量密度が導出できる可能性が示された。ただし、今後、興味ある試料で得られる実験プロファイルを解析するためには、出力データ点数の増大や、他の解析パラメータの調整を含めた検証が必要である。

その他に、安藤によって、全固体フッ化物イオン電池の正極材料である $\text{Ca}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{FeO}_2\text{F}_x$ について、磁気コンプトン散乱と ELK による理論的プロファイルの比較が行われた。測定試料が常磁性を示す物質であっても、強磁場下で磁気コンプトン散乱測定を行い、常磁性元素に関するプロファイルが得られれば、結合状態を調べるためのツールになる可能性が示された。

○ 上記の発表や議論の内容を考慮し、討論を行った。学術的な観点から、高分解能コンプトン散乱測定は、温度や磁場等の実験環境に関する制約が少ないことから、電子状態・構造を調べる手法として、他のフェルミ面構造を調べる測定手法に対して優位性があると考えられる。ただし、現状では、測定に長時間を必要とすることが、この手法の普及における問題点となっている。上記で議論のあった圧縮センシングの解析方法が確立すれば、測定時間の短縮にも寄与することが可能と考えられる。

また、磁気コンプトン散乱測定は、強磁性・フェリ磁性を示す磁性体の研究に

用いられてきたが、高磁場を利用して、常磁性状態の観測が可能になれば、常磁性元素の結合状態・軌道混成についての知見が得られるものと考えられ、化合物、合金、化学物質等、観測対象が大きく広がり、磁気コンプトン散乱の利用において、新しい展開になりうるであろう。

次に、産業利用等の応用的な観点から、コンプトン散乱によるイメージング測定は、高エネルギーX線を利用するため、比較的大きな構造体を加工することなく観測できる手法がある。また、試料を回転させる必要も無いので、配線・配管を施した状態での測定が容易であろう。ただし、空間分解能を維持したまま観測強度を向上させる必要があり、そのため、符号化開口マスクの利用を推進しているところである。その先の課題として、磁気コンプトン散乱による磁気イメージングに発展させたい。従来の磁気イメージングでは、磁性体の表面付近の磁区構造が観測されているだけであるが、高エネルギーを利用することで、磁性体内部の磁区構造の観測も可能になると考えられる。また、コンプトン・プロファイルは、元素によって、プロファイル幅がことなるため、その解析から、元素を区別したイメージングも可能と考えられ、高エネルギー分解能を有した2次元検出器の開発が望まれる。

SPring-8 次期計画において、上記の議論内容を実現化するために望むことは、高エネルギー・高フラックス（高分解能）化であり、また、計測技術として超伝導転移端センサー（TES）による2次元検出器の開発に期待する。