

スパースモデリングによる 量子ビームからの潜在構造抽出

Latent-structure extraction from quantum beam based on sparse modeling

岡田 真人

東京大学 大学院新領域創成科学研究科 複雑理工学専攻

スパースモデリングの基本的な考え方は(1)高次元データの説明変数が次元数よりも少ない(スパース(疎)である)と仮定し, (2)説明変数の個数なるべく小さくなることと, データへの適合とを同時に要請することにより, (3)人手に頼らない自動的な説明変数の選択を可能にする枠組みである. 本講演では, 量子ビームに関するスパースモデリングの具体例として, 分光学のスペクトル分解および, 強相関電子系のハートリー・フォック計算からの有効ハミルトニアンの自動抽出について述べる[1, 2, 3].

スペクトル分解: 1次元の多峰性スペクトルを, ガウス関数のような単峰性の基底関数の K 個の線形和に分解するスペクトル分解について議論する. 我々は, ベイズ推論にもとづき基底関数の数 K を実験データから自動的に抽出する枠組みを提案した[1, 2]. 我々は, この枠組みを計測ノイズが量子性にに基づくポアソン分布に従う場合に拡張し, 量子ビームの量が足りない場合に, どこまで計測結果を信用できるかの, 計測限界を示す理論的枠組みを提案した.

有効ハミルトニアンの自動抽出: 第一原理計算に代表される電子状態の計算結果を, 中性子散乱などの量子ビームの計測結果と比較するには, 古典的なスピンモデルのような有効モデルを経由することが多い. 我々はその一例として, NiGa_2S_4 三角格子系について, 非制限ハートリー・フォック(UHF)近似による電子状態の数値計算データから, 古典的スピンモデルの交換相互作用を何次まで用いるべきかを自動抽出する枠組みを, ベイズ推論をもとに提案した[3]. そこで我々は, 低温で最近接相互作用の符号が 中性子散乱の実験結果と一致することを示した.

[1] K. Nagata, S. Sugita, M. Okada, Neural Networks, 28 82-89, 2012.

[2] 永田賢二, 杉田精司, 佐々木岳彦, 岡田真人, 実験データからピークの数と推定するには?—スペクトル分解とベイズ統計, 日本物理学会学会誌, 69, 12, pp.876-880, 2014.

[3] H. Takenaka et. al., Journal of the Physical Society of Japan, 83, 124706, 2014.

第一原理計算と量子ビームによる 高密度水素化物探索

Exploration of Hydrogen-Rich Materials Utilizing First-Principles Calculations and Quantum Beams

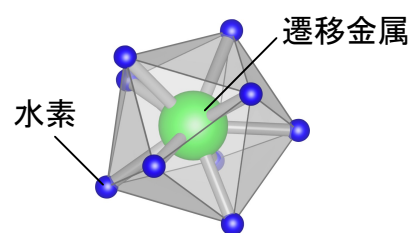
高木成幸¹、齋藤寛之²、池田一貴³、大友季哉³、折茂慎一^{1, 4}

1 東北大金研、2 原子力機構、3 高エネ機構、4 東北大 WPI-AIMR

水素は周囲の環境に応じて様々な存在状態を示し、中性水素が金属格子間に侵入した金属水素化物や、ヒドリドイオンを有するイオン結合性水素化物、共有結合性水素を多数含む錯体水素化物など、多彩な水素化物を形成する[1]。水素の結合多様性を反映し、これらの水素化物においては水素貯蔵や高速イオン伝導、磁性、金属-絶縁体転移などの多様な物性・機能が発現する。特に最近、共有結合性水素を高密度に含む硫化水素が超高压下にて超伝導転移の高温記録(203K)[2]を更新したことを受け、高密度水素化物に対する関心が急速に高まっている。

こうした背景のもと、発表者らは第一原理計算と量子ビームを活用した錯体水素化物の探索研究を進めている。錯体水素化物は、遷移金属に多数の水素が配位した錯イオンと、アルカリ金属やアルカリ土類金属などの陽イオンからなる代表的な高密度水素化物であり、水素の配位構造により多様な電子状態を形成する。

本発表では、第一原理計算による理論予測にもとづき、発表者らが合成に成功した高水素密度の錯体水素化物群(例えば引用文献[3])の結晶構造、特に中性子回折により決定した水素の配位構造と電子状態の相関を議論するとともに、さらなる高水素密度化に向けた最近の取り組みについて紹介する。



遷移金属に9つの水素が配位した高水素配位錯イオン

参考文献

- [1] S. Takagi, S. Orimo, Scripta Mater. (Viewpoint paper) 109, 1 (2015).
- [2] A. P. Drozdov, M. I. Eremets, I. A. Troyan, V. Ksenofontov, S. I. Shylin, Nature 525, 73 (2015).
- [3] S. Takagi, Y. Iijima, T. Sato, H. Saitoh, K. Ikeda, T. Otomo, K. Miwa, T. Ikeshoji, K. Aoki, S. Orimo, Angew. Chem. Int. Ed. 54, 5650 (2015).

HRC における中性子ブリルアン散乱と金属強磁性体 SrRuO₃ のスピン波

Neutron Brillouin Scattering on HRC and Spin Waves in SrRuO₃

伊藤晋一・KEK 物構研

高分解能チョッパー分光器(HRC)は高エネルギーかつ高分解能の中性子を用いて物質のダイナミクスを研究するために MLF の BL12 に設置された中性子非弾性散乱装置である[1,2]。HRC では、最低散乱角 0.6° までの低角領域でのバックグラウンドノイズの低減により中性子ブリルアン散乱(NBS)実験が実現した。NBS は、前方散乱近傍で中性子非弾性散乱を測定するものであり、高エネルギー、高分解能、低散乱角の実験条件により、中性子散乱の運動力学的限界に迫って、(000)近傍の集団励起モードの測定を可能にするものである。この手法により、粉末強磁性体のスピン波や液体の集団励起モードの観測が可能になる。金属強磁性体 SrRuO₃ は、中性子非弾性散乱実験に必要な大型の単結晶が合成できず、HRC の NBS で、多結晶試料を用いてはじめて中性子非弾性散乱実験が可能となった。その結果、SrRuO₃ のスピン波のエネルギーギャップ $E_g(T)$ が非単調な温度変化をすることを見いだした。SrRuO₃ は異常ホール効果を示し、異常ホール伝導度 σ_{xy} は磁化 M に対して非単調な振舞いを示す[1]。スピン軌道相互作用に起源をもつバンド交差が、運動量空間でのワイルフェルミオン(質量ゼロのディラック電子)で記述され、これがモノポールとして振舞い、モノポールの“磁場”が異常ホール効果の起源となる。非単調な σ_{xy} はこのシナリオによる第一原理計算でよく再現される[1]。ワイルフェルミオンを考慮すると、 $E_g \propto [aM^1 + b\sigma_{xy}]^{-1}$ (a, b は定数)と表わされるが、観測された $E_g(T)$ はこのモデルでよく表わされることがわかった。ディラック電子は、これまでスピントロニクス発展の中で、絶縁体表面や界面の輸送特性において議論されてきたものである。この研究は、ディラック電子が、三次元結晶構造の金属中に、かつ、輸送特性以外の現象(スピンダイナミクス)においても、普遍的に実現できることをはじめて示したものである。

[1] S. Itoh, T. Yokoo, S. Satoh, S. Yano, D. Kawana, J. Suzuki and T. J. Sato, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A 631, 90 (2011).

[2] S. Itoh, T. Yokoo, D. Kawana, H. Yoshizawa, T. Masuda, M. Soda, T. J. Sato, S. Satoh, M. Sakaguchi and S. Muto, J. Phys. Soc. Jpn. 82, SA033 (2013).

[3] Z. Fang, N. Nagaosa, K. S. Takahashi, A. Asamitsu, R. Mathieu, T. Ogasawara, H. Yamada, M. Kawasaki, Y. Tokura, K. Terakura, Science 302, 92 (2003).

放射光 X 線回折とミュオンスピン回転・緩和法で見た 軌道縮退系 Sr_2VO_4 の基底状態

Ground state of the orbitally degenerate system Sr_2VO_4 observed via synchrotron radiation X-ray diffraction and muon spin rotation/relaxation

山内一宏¹、那波和宏^{2,3}、平石雅俊¹、宮崎正範¹、幸田章宏¹、
小嶋健児¹、門野良典¹、中尾裕則⁴、熊井玲児⁴、村上洋一⁴、
植田浩明³、吉村一良³、瀧川仁²

1 KEK 物構研ミュオン、2 東大物性研、3 京大理、4 KEK 物構研放射光

層状ペロブスカイト型バナジウム酸化物 Sr_2VO_4 は、 $\text{V}^{4+}(3d^1)$ が作る 2 次元
正方格子を持つモット絶縁体である。この V^{4+} は正方対称な結晶場の下にあり、
1 個の d 電子は縮退した d_{yz}/d_{zx} 軌道に収まると考えられている。従って、この
系では軌道自由度が残り、軌道秩序やスピン軌道相互作用に起因する磁気
八極子秩序などの興味深い秩序状態の出現が期待されている。[1] また、近年、
良質な粉末試料が作成され、 $T_{c0} \sim 10$ K, $T_{c1} \sim 100$ K, $T_{c2} \sim 130$ K において
相転移が見出されているが、各相の詳細については不明な点も多い。

本講演では、我々が粉末試料を用いて行った、放射光 X 線回折とミュオン
スピン回転・緩和実験の結果を報告する。[2] 粉末 X 線回折パターンの温度
依存性から、この物質は $T < T_{c1}$ においても $T_{c2} < T$ と同様に正方晶を保持し、
超周期構造の出現はないことが明らかになった。これは、この系が T_{c1} 以下に
おいても軌道自由度を持つことを示唆している。また、高温および低温の正方
対称な相に挟まれた $T_{c1} \leq T \leq T_{c2}$ において、420 および 200 ピークの線幅が増
大するにも関わらず、110 ピークの線幅が変化しないという振る舞いが見られ
た。これは、低温および高温の正方対称な相の間に斜方対称な相が出現する
ことを示しており、この系で複数の相が競合していることを示唆している。また、
磁気多極子秩序に起因する自発的な内部磁場は、ミュオンスピン回転・緩和
法を用いて観測することができるが、我々の実験から、 T_{c1} における相転移が
磁気八極子秩序などの磁気秩序を伴わないことが明らかになった。一方、 T_{c0}
以下では、ミュオン位置の内部磁場強度の分布幅が広い、動的な内部磁場を
30 mK まで観測した。これは、第一原理計算から提案された磁気揺らぎを伴う
複雑なスピン軌道秩序状態の存在を示唆する結果である。[3]

[1] G. Jackeli and G. Khaliullin : Physical Review Letters, **103**, 067205 (2009).

[2] I. Yamauchi *et al.* : Physical Review B, **92**, 064408 (2015).

[3] Y. Imai *et al.* : Physical Review Letters, **95**, 176405 (2005).

MLFにおける大強度ビームコミッショニングの現状 Present status of high intensity beam commissioning at MLF

明午 伸一郎¹, 大井 元貴¹, 川崎 智久¹, 西川 雅章¹, 福田 真平¹,
藤森 寛²

1 (JAEA) J-PARC センター中性子源セクション

2 (KEK) J-PARC センターミュオンセクション

J-PARC の物質・生命科学実験施設(MLF)では 25Hz の早い繰り返しのシンクロトロン(RCS)から出射される大強度の 3GeV 陽子ビームを黒鉛グラファイト標的(厚さ 20mm)および水銀標的に入射し、ミュオンおよび中性子源として利用している。2014 年の夏に LINAC のイオン源および上流部は変更を行い、J-PARC センターの加速器の性能は目標とする 1 MW の出力を有するようになり、MLF では 2015 年の 1 月から大強度ビームのコミッショニングを開始した。2015 年の 1 月から利用運転の出力を 300 kW より 500 kW まで上昇させることに成功した。この運転により、ミュオン源は世界最大強度を更に更新することとなり、また中性子源もパルス当りの強度ではオークリッジ国立研究所の SNS を抜き世界最大強度を有することになった。

世界最大強度のパルスビームを安定に運転するためには、ビーム診断とビーム成形技術が鍵となる。水銀ターゲット内の衝撃波に起因する損傷は電流密度の4乗に比例するため、電流密度を下げるのが重要である。一方、単純なビーム光学(線形光学)によりビームを拡大すると標的周辺部の発熱が生じるために、適切なビーム形状の制御が重要となる。そこで、我々は安定にビームを観測するためのビームハロー用のモニタを開発した。周辺部の発熱密度をハローモニターの温度上昇の微分により測定し、発熱密度が許容値(1W/cc)を下回っていることが確認できるようになり、安全に運転することができるようになった。更に八極電磁石からなる非線形ビーム光学を用いてターゲット上でのビーム形状を平坦化する技術開発を行った。試験運転を行った結果、設計通りにビームが一様な分布となることを確認した。更にピーク密度を約 30 %程度減らすことがわかり、1 MW の運転を更に安定な状態で行える見通しを得ることができた。

RADEN におけるパルス中性子イメージングに向けた μ NID 検出器の開発

Development of the μ NID Neutron Imaging Detector for Pulsed Neutron Imaging at RADEN

J.D. Parker¹、篠原武尚²、甲斐哲也²、及川健一²、原田正英²、中谷健²、瀬川麻里子²、廣井孝介²、蘇玉華²、林田洋寿¹、松本吉弘¹、張朔源¹、鬼柳善明³

1 CROSS 東海、2 原子力機構 J-PARC センター、3 名古屋大学

The energy-resolved neutron imaging system, RADEN [1], located at beamline BL22 of the J-PARC Materials and Life Science Experimental Facility (MLF), began operation in November 2014 as the world's first dedicated pulsed neutron imaging instrument. In addition to conventional radiography, RADEN was designed to take full advantage of the pulsed neutron beam of the MLF to perform *energy-resolved neutron imaging*, techniques which allow us to directly image the macroscopic distribution of microscopic quantities such as crystallographic structure, internal strain, elemental density and temperature, and internal/external magnetic fields. To carry out these measurements in the high-intensity environment at RADEN, we use cutting edge detector systems, recently developed in Japan, employing technologies such as micropattern detectors and high-speed, Field Programmable Gate Array based data acquisition systems to provide the necessary sub- μ s time resolution, high count rates, and strong background rejection [2].

In this presentation, we will discuss one such detector, the μ PIC-based Neutron Imaging Detector (μ NID) [3]. Incorporating a micropattern detector known as the Micro-Pixel Chamber (μ PIC) and ^3He gas as the neutron absorber, this detector currently achieves a spatial resolution of 0.28 mm (FWHM), time resolution of 0.6 μ s, neutron count rate of 0.6 Mcps, ultra-low gamma sensitivity of less than 10^{-12} , and detection efficiency of 18% for thermal neutrons. Ongoing development is expected to significantly improve the spatial resolution (by nearly a factor of two) and neutron count rate (by more than an order of magnitude) through upgrades to all components of the detector system. Recent results of this development work will be presented.

References

- [1] Y. Kiyonagi *et al.*, Phys. Proc. **43**, 92 (2013).
- [2] J.D. Parker *et al.*, 2015 IEEE NSS Conf. Rec., in press.
- [3] J.D. Parker *et al.*, Nucl. Instr. and Meth. A **726**, 155 (2013).

パルス中性子を用いた基礎物理 Fundamental Physics with Pulsed Neutrons

北口雅暁

名古屋大学 現象解析研究センター

ヒッグス粒子の発見によって素粒子標準理論は完成したが、階層性問題や重力相互作用など、未解決の問題が数多く残されている。標準理論を超える新しい物理が必要であり、高エネルギー加速器実験とともに精密測定による間接的な探索が重要である。

中性子は質量・スピン・磁気モーメントを持つ核子であり、重力・電磁気力・核力相互作用を精密に測定する試験粒子になる。J-PARC から得られる大強度のパルス中性子ビームは、従来を凌駕する高統計・低バックグラウンド実験を可能にする。標準理論を超える物理に感度が高い、中性子を用いた CP 対称性の破れの探索について取り上げる。

中性子が原子核に吸収され複合核状態を作る際、その部分波の干渉によって、核子・核子・中間子間の相互作用における CP 非保存過程が増幅される可能性が示唆されている。標的原子核の性質によっては、現在の CP 非対称の上限値を超える感度を持ちうる。中性子を偏極し、偏極原子核標的を透過する際のスピン相関を測定する。候補となる標的原子核は Xe や La であり、利用する共鳴のエネルギーは熱外中性子の領域である。現在、標的原子核の選定のための中性子共鳴吸収反応の測定や要素技術開発を行っている。また中性子の永久電気双極子能率(EDM)は CP 対称性の破れに感度があり、世界で探索競争になっている。次世代の高感度中性子 EDM 探索のための開発研究も行っている。

J-PARC ではこの他にも、冷中性子ビームを用いた種々の基礎物理実験を遂行している。CKM 行列要素やビッグバン元素合成の重要なパラメータである中性子寿命の測定や、中性子散乱を用いた未知の短距離力の探索実験が BL05 NOP ビームラインで進められている。これらの現状も紹介する。



BL05 NOP

中性子光学基礎物理ビームライン

中性子反射率測定を用いた塗膜・接着剤中の水分析 Analysis of Water in Coating and Adhesive using Neutron Reflectivity

内藤昌信¹、藤井義久¹、Payra Debabrata¹、山田悟史²

1 NIMS, 2 KEK

自動車や航空機等の軽量化において、異種材料を適材適所で組み合わせるマルチマテリアル化が注目されている。その実現には、異材接着が有力であるが、機械締結と異なり、接着接合は強度設計の一つとして十分な信頼を得ているとまでは言えない。接着接合の不確定要素の一つとして、接着剤中もしくは基材と接着剤間に含まれる微量な水が接着強度や寿命に大きく影響することがあげられる。そのため、水が接着機能に及ぼす影響を明らかにし、材料設計にフィードバックさせることが異材接着の実用化に向けた大きな課題となっている。その解決手段として、我々は中性子反射率測定による塗膜中の水分検出に注目した。

本研究では、接着剤や有機塗膜中における残存水分の侵入を評価するために、ムラサキイガイが分泌する優れた接着物質であるドーパミンを導入したコーティング材料を開発した。このコーティング材料は、温和な条件で金属表面に強固に付着するだけでなく、アニーリング処理を施すことで、緻密な膜が形成され、その結果、数 100nm の薄膜でも高い防錆能を示す。¹ 一方、この塗膜は、アニーリング処理を行わないと、徐々に防錆能が損なわれることも明らかになった。

アニーリングが塗膜の構造にどのような変化をもたらし、それが防錆能にどのように影響しているかを明らかにするため、中性子反射率測定による塗膜中の水分分析を行った。その結果、アニーリング前の塗膜を水中に浸漬させた場合、水に対するバリア能は認められなかったが、アニーリング後の塗膜では、同様の操作を行っても水の侵入は数カ月間認められなかった。

本研究のみならず、接着剤やコーティング剤の耐久性や接着性能に水が重要な役割を果たしていることは従来から考えられてきたが、それを直接的に評価する方法がないのがボトルネックであった。本研究で示したように、中性子反射率測定は薄膜中の水分分析に有力な手段であることから、実用的な異材接着剤の材料設計において、今後ますます強力なツールになると期待される。

1. D. Payra, M. Naito,* Y. Fujii, N. L. Yamada, S. Hiromoto and A. Singh, RSC Adv., 2015, 5, 15977.