

コンプトンプロファイルにおける三次元再構成

梅田 駿一郎

実験で観測されたデータを評価するために、実験結果と理論計算の比較はよく行われている。本研究で扱うコンプトンプロファイルの場合も同様だが、実験で得られるコンプトンプロファイルは三次元の物理量を二方向に積分した一次元データであるため三次元的な細かい構造までは比較することができない。そこで現在では、実験でコンプトンプロファイルを三次元に再構成し、これによって得られる三次元電子運動量密度を、理論計算で求められた三次元電子運動量密度と比較している。これは情報量の多い三次元データ同士の比較なので、より精密な比較が可能となる。しかし、ここで課題として挙げられるのは三次元再構成の過程で生じる誤差と考えられるのだが、それがどの程度であるのかが必ずしも明確になっていないことである。この誤差を求めるためには、理論計算の結果に対しても実験で行われるのと同じ手順により三次元電子運動量密度を求めれば、元々の三次元電子運動量密度と比較することにより、これらの誤差を評価することができる。

そこで本研究では理論計算によって、まず三次元電子運動量密度を求め、それを積分し、複数の方向に対するコンプトンプロファイルを計算する。このコンプトンプロファイルから三次元電子運動量密度の再構成を行う。そして元の電子運動量密度との比較を行い、どの程度の誤差が生じるのかを解析する。

三次元再構成の手順としては、まず三次元電子運動量密度分布からコンプトンプロファイルが求め、次にこのコンプトンプロファイルを一次元フーリエ変換し、フーリエ空間の分布を作る。そして次に電子運動量密度分布を求めるためには、フーリエ分布に対して三次元逆フーリエ変換を行う必要がある。そのためには r 空間の格子点上の値を求めなければならず、それには三次元内挿を行う。そのためには三次元の内挿点をメッシュ状にとり、フーリエ変換で得られたデータを基にしてそれぞれの内挿点における値を求める。この三次元内挿の後に三次元逆フーリエ変換を行うことで、電子運動量密度分布を求めることができる。そして元の理論上の電子運動量密度分布と求められたデータとの比較によって、実験における三次元再構成でどの程度の誤差が出るのかが分かると考えられる。

結果として、コンプトンプロファイルの三次元再構成によって電子運動量密度分布を得ることができたが、元の電子運動量密度分布との誤差解析には至らなかった。また、三次元再構成の過程である三次元内挿、逆フーリエ変換において問題が見つかり、正確な再構成を達成できなかったため、その問題の解決が必要となる。そして、元の電子運動量密度分布との比較・解析により、誤差の傾向を導出することが次への段階となる。

(指導教員 松本 紳)