



令和3年度
スーパーコンピュータシステム (HPE SGI8600)
利用による 研究成果報告集

令和4年11月
量子科学技術研究開発機構
情報基盤部 IT 運用・学術情報課
(スパコン利用検討委員会事務局)

本研究開発報告集は国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構が不定期に発行する、JAEA 設置のスーパーコンピュータシステム HPE SGI8600 を利用した研究成果の報告書です。

本研究開発報告集の全文電子データ (pdf) は国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構ホームページ (<https://www.qst.go.jp/site/archives/1109.html>) より発信されています。

国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構

情報基盤部 IT 運用・学術情報課

(スパコン利用検討委員会事務局)

目次

大口利用課題 研究成果報告	4
量子生命・医学部門	5
大型生体高分子の構造、ダイナミクス解析のためのシミュレーション技術の開発とその実行	6
放射線影響に対処する大型生体高分子の機能発現メカニズム解析	9
重粒子線による DNA 損傷の物理過程シミュレーション研究	12
量子ビーム科学部門	16
新奇スピントロニクス材料評価に向けた電子・陽電子状態の第一原理計算	17
二次電子制動輻射測定による治療用粒子線モニタリング手法の開発	23
量子メス入射器開発におけるレーザー加速器シミュレーション	25
極短パルスレーザーと物質の相互作用シミュレーション	34
2.5J レーザーパルスと CH ₂ 薄膜によるイオン加速シミュレーション	39
第一原理分子動力学法に基づいた材料解析手法の開発	41
量子エネルギー部門	44
ジャイロ運動論コードを用いた実験解析に基づく乱流輸送モデリング	45
ダイバータプラズマ中の不純物輸送制御に関する研究	51
核燃焼プラズマの動特性に関するシミュレーション研究	53
ダイバータ熱負荷の予想確度向上に向けた 2.5 次元ダイバータ輸送コードの開発	58
磁気流体力学に対する先進的アルゴリズム研究とその実証実験	61
コード高速化・最適化研究成果	64
LMMLEM 画像再構成プログラム及び PET 画像再構成プログラムの GPU 化	65
一般利用者研究成果一覧	67

大口利用課題 研究成果報告

量子生命・医学部門

大型生体高分子の構造、ダイナミクス解析のためのシミュレーション技術の開発とその実行

河野 秀俊、Kumar Amarjeet、櫻庭 俊、田口 真彦、
Chan Wai Soon、Chan Yao Chong Maud

量子生命・医学部門 量子生命科学研究所 生体分子シミュレーショングループ

(1) 利用目的:

生命現象の大きな特徴に、揺らぎの中で、あるいは、揺らぎを利用して、秩序ある運動や機能を生み出すということが挙げられる。無機材料での量子コヒーレンシーを見ようとする、極低温まで温度を下げ、可能な限り外からのノイズを下げて観測する必要がある。しかし、生物はノイズに埋もれた揺らぎのある信号から、秩序を生み出している。その仕組みを解き明かすのが本領域の課題のひとつである。電顕によってクロマチン複合体の構造や1分子ライブセルイメージング及び次世代シーケンス技術により細胞種ごとのクロマチン状態が計測され、時空間の状態情報が得られるようになりつつある。クロマチン構造の異常が、がんやメタボリックシンドローム、精神疾患などの直接的な原因となっていることも分かってきた。しかし、これらによるゲノム機能制御の分子機構はほとんど分かっていない。そこで、量子、原子、分子、さらにマクロレベルのマルチスケールシミュレーションにより、クロマチンの動態と転写、修復、複製の関に焦点を当て遺伝子の発現制御のメカニズムを理解することを目的として研究を展開している。令和03年度は 1)ヌクレオソームメチル化酵素の機能発現機構に関するシミュレーション、2) SARS-cov2 の非構造タンパク質 nsp1 の天然変性領域の機能についてのシミュレーションを行った。

(2) 利用内容・結果:

NSD2メチル化酵素とヌクレオソーム複合体の構造解析及びメチル化機構の解析

我々は外部の研究者とともに、ヌクレオソームとヒストンメチル化酵素 (NSD2)の複合体の構造解析 (図1)に成功した。小児血液がん患者の細胞特有に、この酵素のアミノ酸変異(グルタミン酸からリジン)が見られる。これまでの研究により、その変異はメチル化の異常亢進を引き起こすことが分かっていたが、そのメカニズムは不明であった。そこで、複合体構造に基づき分子動力学シミュレーションを行うことにより、ヒストンメチル

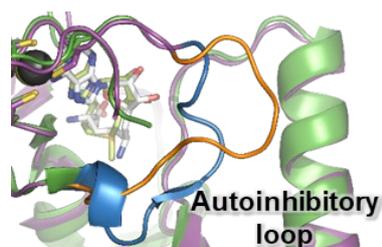


図2. 自己阻害ループの開閉

ル酵素によるヌクレオソーム認識機構や構造

変化による活性化機構を調べた。NSD2のメチル化酵素ドメイン SET (図1の紫色)についてMD計算を行い、がん細胞に見られる変異体と野生型の違いを調べた。結果、autoinhibitory loop (自己阻害ループ)が開閉することでヒストンテールの認識 (図2のオレンジ (閉じた状態)と青

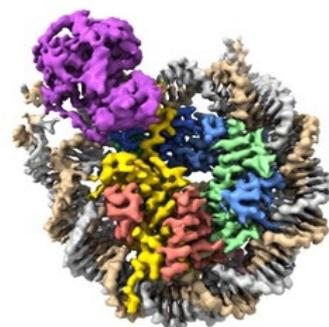


図1. ヌクレオソームとNSDメチル化酵素 (紫)の複合体構造

(開いた状態)が行われていることや開閉の仕組みは疎水性パッチの形成と破壊によって起こることを見出した。また、活性異常を起こす他の変異体も同じ疎水性パッチを壊し、自己阻害ループを開いた状態に保つ構造に遷移することが分かってきた。その成果をまとめて、Nat. Comm. (2021年11月)に発表し、プレス発表を行った。

SARS-CoV-2 nonstructural protein 1 (nsp1) と RNA との相互作用とその影響

SARS-CoV-2 は、宿主のリボソームを使って、自分自身の遺伝子を選択的に発現しているが、その仕組みは謎である。実験的に、その仕組み

には nsp1 タンパク質と SARS-CoV-2 の mRNA の相互作用が深く関わっているということが示唆されている。そこで、nsp1 と mRNA の相互作用の仕方やその結果起こる nsp1 の構造変化を、大規模な計算機シミュレーションによって調べた。nsp1 はリボソームの入り口をブロックすることで宿主の mRNA の翻訳を阻害する (図 3. A) と考えられている。しかし、シミュレーション結果から、nsp1 とコロナウイルスの mRNA が相互作用することにより、そのブロックは外れることが示唆された (図 3. B)。その成果をまとめて、PLoS Comp. Biol.誌に発表した。

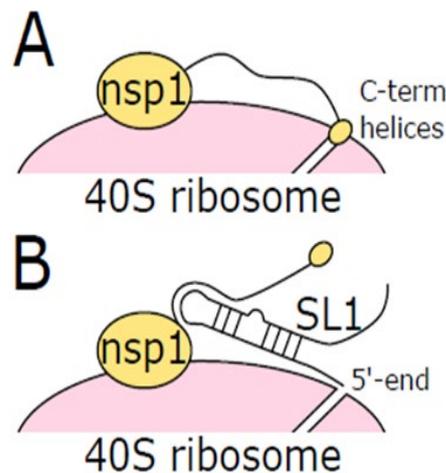


図 3. nsp1 の天然変性領域と RNA (SL1) との相互作用。宿主の RNA とは相互作用せず、ribosome の口をふさぐ (A)。一方、コロナウイルスの RNA とは相互作用し、ribosome の口を開き、翻訳が進む。

(3) 今後の利用予定:

引き続き、ヌクレオソーム多量体の相互作用とその結果による構造・ダイナミクスの変化、ヌクレオソームとそれに結合するタンパク質との相互作用機構の解明を目指して、大規模なシミュレーションを行う。特に、転写過程における分子ダイナミクスと機能発現の関係に注目してシミュレーションを行う予定である。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学術論文

- 1) Overall structure of a fully assembled complex in the cyanobacterial circadian clock system analyzed by an integrated biophysical and computational approach, Yasuhiro Yunoki, Atsushi Matsumoto, Ken Morishima, Anne Martel, Lionel Porcar, Nobuhiro Sato, Rina Yogo, Taiki Tominaga, Rintaro Inoue, Maho Yagi-Utsumi, Aya Okuda, Masahiro Shimizu, Reiko Urade, Kazuki Terauchi, Hidetoshi Kono, Hirokazu Yagi, Koichi Kato, Masaaki Sugiyama, Communications Biology, 11, 561 - 566, 2022.03

- 2) HNF1A POU Domain Mutations Found in Japanese Liver Cancer Patients Cause Downregulation of HNF4A Promoter Activity with Possible Disruption in Transcription Networks, Haque Effi, Teeli Aamir Salam, Winiarczyk Dawid, Taguchi Masahiko, Sakuraba Shun, Kono Hidetoshi, Leszczyński Paweł, Mariusz Pierzchała, Taniguchi Hiroaki, *Genes*, 13(3), 413, 2022.02
- 3) NRF2 DLG Domain Mutations Identified in Japanese Liver Cancer Patients Affect the Transcriptional Activity in HCC Cell Lines, Effi Haque, Magdalena Śmiech, Kamila Łuczyńska, Marie France Bouchard, Robert Viger, Kono Hidetoshi, Mariusz Pierzchała, Hiroaki Taniguchi, *International Journal of Molecular Sciences*, 22(10), 5296, 2021.05
- 4) Extended ensemble simulations of a SARS-CoV-2 nsp1–5'-UTR complex, Shun Sakuraba, Qilin Xie, Kota Kasahara, Junichi Iwakiri, Hidetoshi Kono, *PLoS Computational Biology*, 18(1), e1009804, 2022.02
- 5) Structural basis of the regulation of the normal and oncogenic methylation of nucleosomal histone H3 Lys36 by NSD2, Ko Sato, Amarjeet Kumar, Keisuke Hamada, Chikako Okada, Asako Oguni, Ayumu Machida, Shun Sakuraba, Tomohiro Nishizawa, Osamu Nureki, Hidetoshi Kono, Kazuhiro Ogata, Toru Sengoku, *Nature communications*, 12(1), 6605, 2021.11
- 6) The N-terminal Tails of Histones H2A and H2B Adopt Two Distinct Conformations in the Nucleosome with Contact and Reduced Contact to DNA, Hideaki Ohtomo, Jun-ichi Kurita, Shun Sakuraba, Zhenhai Li, Yasuhiro Arimura, Masatoshi Wakamori, Yasuo Tsunaka, Takashi Umehara, Hitoshi Kurumizaka, Hidetoshi Kono, Yoshifumi Nishimura, *Journal of Molecular Biology*, 433(15), 167110, 2021.07

放射線影響に対処する大型生体高分子の機能発現メカニズム解析

石田 恒、松本 淳

量子生命・医学部門 量子生命科学研究所 生体分子シミュレーショングループ

(1) 利用目的:

生体中では、紫外線などの放射線により DNA は常に損傷を受けている。損傷 DNA の誤った遺伝情報から生じる異常タンパク質は癌化を引き起こす可能性があるため、正常な生体機能を維持するための生体反応が必要不可欠である。特に、DNA を収納する染色体の構造を特徴づける大型生体高分子（ヌクレオソーム）構造において、ヌクレオソーム構造の形成と崩壊は、放射線影響に対処する重要な役割を果たしている。本研究課題では、昨年度までに進めた生体機能発現を解析する方法論を更に拡張、高速化して、DNA の複製、修復、転写に中心的な働きをするヌクレオソームを対象に、ヌクレオソームを構成するヒストンタンパク質から H2A-H2B ヘテロダイマーが脱離するのにもなう、ヌクレオソーム構造崩壊の自由エネルギー地形解析について報告する。

(2) 利用内容・結果:

本計算モデルの系は、DNA とヒストンタンパク質からなるヌクレオソームである (図 1 (a))。ヒストンタンパク質は、2つの H2A-H2B ヘテロダイマー (今後、H2A-H2B、H2A'-H2B'と呼ぶ) と2つの H3-H4 ヘテロダイマー (今後、H3-H4、H3'-H4'と呼ぶ) からなる。H2A-H2B と H3-H4、H3-H4 と H3'-H4'、H3'-H4' と H2A'-H2B'のそれぞれは4ヘリックスバンドル相互作用を通して、H2A-H2B と H2A'-H2B'は L1-L2 ループ相互作用を通して、構造的に安定なヒストンコアを形成する。

ヌクレオソームの系は水、イオンを含めて約50万原子から構成されている。ヌクレオソームの崩壊を促進するために H2A C 末テールの一部は欠損した。初めに、ヌクレオソームの崩壊構造を生成するために、ABMD 法を用いて H2A-H2B (または H2A'-H2B') がヌクレオソームから脱離したさまざまな状態の構造を生成した。ABMD 法はメタダイナミクス法の一つで、シミュレーション中の反応座標値にガウス型の局所的エネルギーを累積して生成されるバイアスポテンシャルを通常の原子間相互作用ポテンシャルに追加して実行する分子動力学シミュレーション法である。次に、H2A-H2B がヌクレオソームから徐々に脱離する32個の状態について、延べ約10マイクロ秒にわたるアンブレラサンプリング計算を実行し、網羅的なサンプリング構造を得た。これによりヌクレオソームの構造崩壊の自由エネルギー地形を調べた。

ヌクレオソーム構造崩壊には大きく3つステップでおきることがわかった。1. H2A-H2B と H2A'-H2B'の L1-L2 ループ相互作用喪失 (約 10kcal/mol) (図 1 (b))。2. H2A-H2B と H3'-H4'の相互作用喪失、特に H2B C 末テールにある H2A ドッキングドメインと H4' C 末テールの相互作用喪失 (約 15kcal/mol) (図 1 (c))。3. H2A-H2B と H3-H4 の相互作用喪失、特に H2B と H4 の4ヘリックスバンドル相互作用喪失。(図 1 (c))。

以上から、H2A ドッキングドメインがヌクレオソーム構造崩壊自由エネルギー (約

35kcal/mol) のうちの約40%に関与することがわかった。ヌクレオソーム構造崩壊を引き起こす分子シャペロン FACT は H2A ドッキングドメインを H3-H4 相互作用接触面から引き離すことが知られている。このことから、H2A ドッキングドメインの相互作用喪失がヌクレオソーム構造崩壊の引き金になっていると考えられる。また、H2A-H2A と H3-H4 間の相互作用面において構造崩壊自由エネルギーに寄与するアミノ酸には癌化に関与するアミノ酸と一致するものが複数観測された。このことはヒストン間相互作用の不安定化が癌化に関与する可能性を示唆している。

以上、ヌクレオソームの構造崩壊には、H2A ドッキングドメインと H4' C 末テールの相互作用が大きな影響を及ぼしていることがわかった。更に、ヒストンコアの不安定化が癌化に関与する可能性が示唆された。このようなヌクレオソーム大規模構造変化は遺伝子発現の調節にも重要な役割を果たしていると考えられる。

(3) 今後の利用予定:

今後は、DNA を特異的に認識しインターカレーションを引き起こすインターカレーターと DNA の相互作用過程などを調べることで、放射線影響に対処する生体分子の機能発現メカニズムを明らかにしていく。

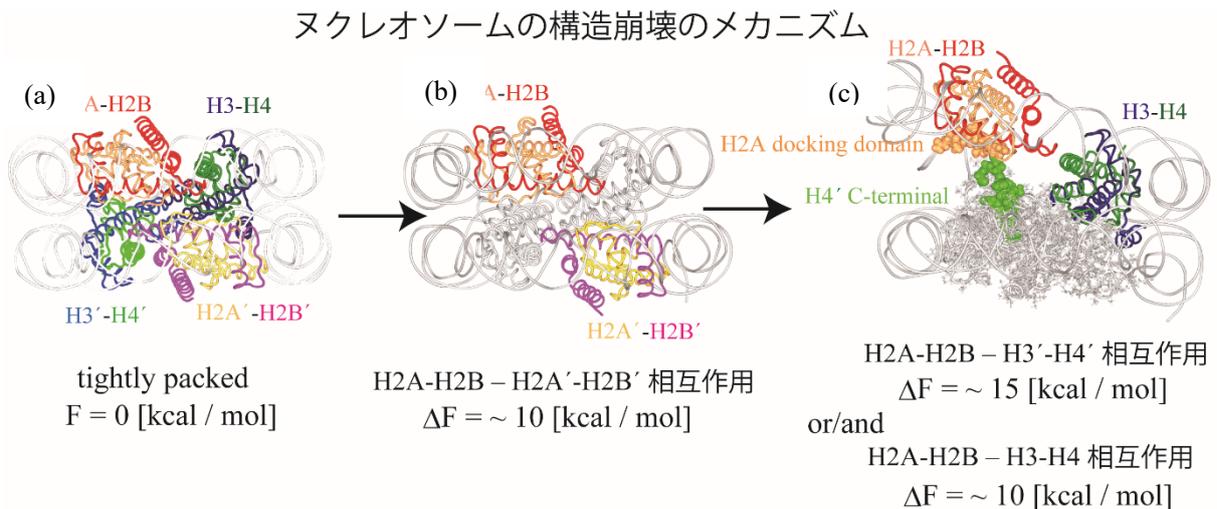


図 1 : ヌクレオソームの構造崩壊メカニズム

(a) DNA (灰色)、ヒストン H3, H3' (濃い青、青)、H4, H4' (濃い緑、緑) H2A, H2A' (オレンジ、黄)、H2B, H2B' (赤、桃) を示す。水、イオンは表示していない。(b) H2A-H2B と H2A'-H2B' の相互作用喪失 (自由エネルギー約 10kcal/mol)。(c) H2A-H2B と H3'-H4' の相互作用喪失 (自由エネルギー約 15kcal/mol) と H2A-H2B と H3-H4 の相互作用喪失 (自由エネルギー約 10kcal/mol)

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Free energy profile of H2A-H2B dimer displacement from nucleosome, H. Ishida, H. Kono, 第 59 回日本生物物理学会年会, オンライン, 2021.11 (Oral)

学術論文

- 2) Free Energy Landscape of H2A-H2B Displacement From Nucleosome, H. Ishida, H. Kono, Journal of Molecular Biology, vol.434, 167707, 2022.8
- 3) Overall structure of fully assembled cyanobacterial KaiABC circadian clock complex by an integrated experimental-computational approach, A. Matsumoto, H. Kono, et al., Communications Biology, vol.5, 184, 2022.3

重粒子線による DNA 損傷の物理過程シミュレーション研究

森林 健悟

量子生命・医学部門 量子生命科学研究所 DNA 損傷化学研究グループ

(1) 利用目的：

重粒子線によるがん治療は高い治療効果を持つことが知られており、その理由の一つはクラスターDNA 損傷を作るからと考えられている。しかしながら、クラスターDNA 損傷の生成機構は分かっていない。この機構が分かれば、より高い治療効果をもつがん治療の実施につながるのではないかと考え、シミュレーションで炭素線でのクラスターDNA 損傷の生成機構を調べている。

クラスターDNA 損傷を知るには、DNA 損傷の空間分布を調べる必要がある。重粒子線による衝突電離で発生する二次電子（重粒子線衝突電離で生じる自由電子）は重粒子線から標的に付与したエネルギーの大部分を広い範囲に運ぶ。この運ばれたエネルギーによって DNA 損傷が生じると考えられている。従って、DNA 損傷の研究には二次電子の運動が重要である。そこで、二次電子の運動シミュレーションモデルの開発を行うことにした。

重粒子線衝突電離は、二次電子だけでなく標的中の分子イオンを生成する。この分子イオンが局所的に高密度に生成するので、これらの分子イオンが作る合成電場 (\vec{E}) が二次電子の運動に影響すると考え、この電場の影響を考慮した二次電子の運動のシミュレーションモデルの開発を行った。この電場が二次電子の運動に影響を与えることは、100 年ほど前に、理論モデルの中に取り入れられていた。この理論で与えられた問題は現在でも未解決のままであるにもかかわらず、我々の新規モデルを除く従来のシミュレーションモデルでは、この影響は無視されてきた。また、この影響の大きいことを示唆した観測が報告されている。我々のシミュレーションは、この観測値の傾向を再現することに成功し、シミュレーションモデルの妥当性を確認した（従来のモデルではこの観測値を説明できないことも明らかにした）[1]。すなわち、このシミュレーションにより、二次電子の運動や DNA 損傷の空間分布に対して従来のモデルよりも現実に近い状況を再現することができ、それによりクラスターDNA 損傷の生成機構の理解も深まることが期待できる。

さらに、重粒子線の軌道付近に生じる電場に捕獲された二次電子は長時間、この軌道付近に留まり、そこで、イオンや他の二次電子と相互作用し、集団的な振る舞いをする。すなわち、プラズマ状態になることが予測される。生成したプラズマ中の電子は、軌道付近に存在する分子に何度も衝突し、軌道付近の線量を増加させることが予測されるが、このプラズマが線量を増加させることを考慮した動径線量（重粒子線の軌道からの垂直方向を関数とした線量）分布関数は、半世紀程度前に提唱されており、このプラズマを考慮した分布関数は放医研（現 QST 病院）での重粒子線がん治療の治療計画に導入されている。しかしながら、このプラズマを取り扱った実験、シミュレーション研究は研究代表者の知る限りなかった。そこで、前に述べた二次電子の運動のシミュレーションからプラズマ生成過程の研究も行っている。

本研究では、二次電子間のクーロン相互作用(F_{ee})のプラズマ生成への影響を考察する。理論

的研究において、二次電子・イオン間のクーロン相互作用(F_{ei})は取り入れているが、 F_{ee} の影響に関しては、理論・シミュレーション研究を通して知る限り、世界で初めての研究である。

(2) 利用内容・結果：

重イオンビームの理論・シミュレーション研究は100年ほど前から始まったが、理論研究では入射イオンの軌道付近にプラズマが発生するのに対して、従来のシミュレーション研究では、プラズマは発生しなかった。この相違が2種類の動径線量分布を普及させるなど、矛盾を生じさせている。本研究では、最新のコンピューターを利用したシミュレーションモデルを開発し、シミュレーションでもプラズマが発生することを実証した[1]。このシミュレーションの入力データは、入射イオンの衝突電離断面積(σ)とエネルギー(E)のみである。

図1は F_{ee} を考慮した場合と無視した場合でのシミュレーションで得た電子密度(N_e)と入射イオンの軌道からの距離(r)の関係を示す。ここで、 $\sigma = (a) 8 \times 10^{-16}$ 及び(b) $2 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ 、 $E_i = 500 \text{ keV/u}$ を取り扱った。この図から F_{ee} を無視すると $r \leq 1 \text{ nm}$ の領域で電子密度が増えていることがわかった [2]。

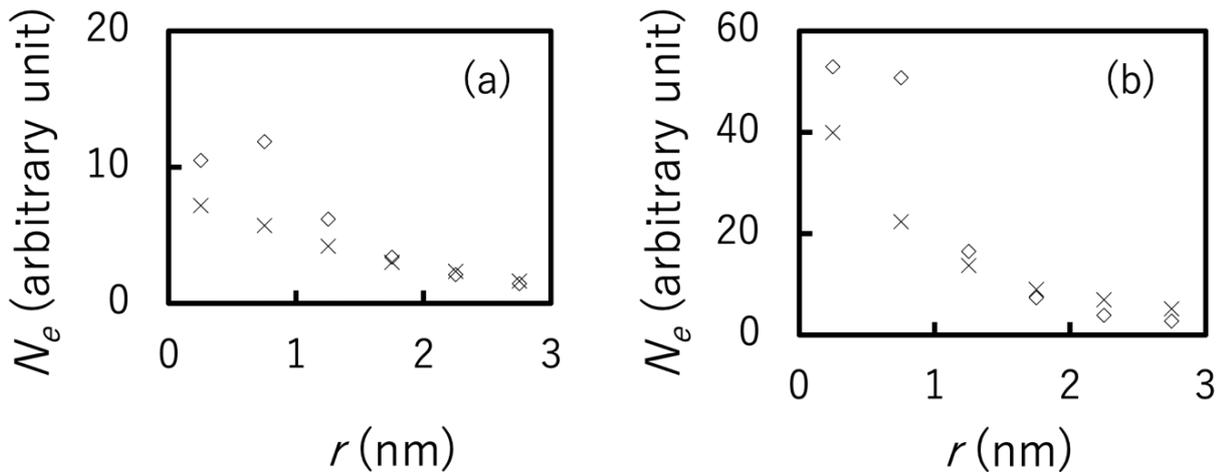


図1 N_e と r との関係。入力データは $\sigma = (a) 8 \times 10^{-16}$ 、(b) $2 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ 、 $E_i = 500 \text{ keV/u}$ とした。記号×、◇はそれぞれ、 F_{ee} を考慮した場合と無視した場合を表す。

次に、プラズマ生成における F_{ee} の影響を調べるため、 F_{ee} を考慮した場合と無視した場合の二次電子の入射イオンの軌道付近で生じる電場から脱出できる確率(P_{es})を入射イオン衝突電離に

対する平均自由行程 (τ) の関数として計算した[2]。
 脱出できない二次電子がプラズマを形成する。図2は F_{ee} を考慮した場合と無視した場合の P_{es} と τ の関係を示す。 F_{ee} を考慮した場合、無視した場合、 P_{es} はそれぞれ、 $\sqrt{\tau}$ 、 τ に比例すること、すなわち、 F_{ee} は P_{es} を減少させる働きがあることがわかった。これは、 F_{ee} が電場に対して (デバイ) 遮蔽[3]をする働きがあるためと考えることができる。すなわち、 P_{es} の増加はプラズマ電子密度の増加につながり、 F_{ee} はプラズマ生成に不可欠であることを示唆している[2]。

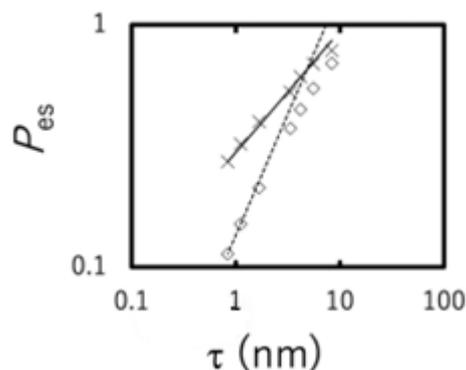


図2 P_{es} と τ の関係。記号 \times 、 \diamond はそれぞれ、 F_{ee} を考慮した場合と無視した場合を表す。実線、破線はそれぞれ、 $\sqrt{\tau}$ 、 τ に比例することを示す。

(3) 今後の利用予定:

F_{ee} は二次電子の運動に対する熱平衡化を引き起こす働きもある。以前の研究で熱平衡化するのに、数 fs かかっていた [1]。この時間は、二次電子が電場を脱出できるかどうか決まる領域に到達するのとほぼ同程度である [3]。また、プラズマも二次電子が脱出するかどうか決まらなると生成しない。そこで、今後は、熱平衡化とプラズマ生成のどちらが速いかを解明することを目指す。そのために、いくつかの疑似的な二次電子の初期エネルギー分布に対して、図2のような P_{es} と τ の関係を計算する。熱平衡化の方が速ければ、初期エネルギー分布に関係なく、ほぼ同じ傾向を示すと考えている。

参考文献

- [1] K.Moribayashi, Jpn. J. Applied Phys. **59** SH0801 (2020)
- [2] K.Moribayashi, Journal of Physics: Conference Series, **2207** 012020 (2022)
- [3] K.Moribayashi, Radiat. Phys. Chem., **184** 109436 (2021)

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) 重イオンビーム照射による散逸構造、自己組織化形成の可能性, 森林 健悟, 日本物理学会 2021 年秋季大会, オンライン, 2021.9 (Oral)
- 2) 重イオンビーム照射で形成する自己組織化と DNA 損傷の可能性, 森林 健悟, 量子生命科学会第 3 回大会, オンライン, 2021.9 (Oral)
- 3) 重イオンビーム照射で生じるプラズマ、熱膨張、自己組織化の可能性, 森林 健悟, 第 22 回「イオンビームによる表面・界面の解析と改質」, 名古屋, 2021.12 (Oral)
- 4) MULTI-SCALE SIMULATIONS AIMING TO ADVANCE HEAVY ION BEAM CANCER THERAPY, K.Moribayashi, H.Matsubara, Y.Yonetani, N.Shikazono, COMDATA2021, Online, 2021.11 (Oral)

- 5) Application of plasma simulation and theory to heavy ion cancer therapy, Kengo Moribayashi, CCP2021, Online, 2021.8 (Poster)
- 6) 重イオンビーム癌治療の治療機構解明：自己組織化の可能性, 森林 健悟, 原子衝突学会第46回年会, オンライン, 2021.10 (Poster)

学術論文

- 7) Debye shield formed by track potential and transport of secondary electrons in heavy ion irradiation, Kengo Moribayashi, Radiation Physics and Chemistry, vol.184, 109436, 2021.7
- 8) Effect of Coulomb interaction between secondary electrons on plasma formation due to heavy-ion irradiation, Kengo Moribayashi, Journal of Physics: Conference Series, vol.2207, 012020, 2022.3

量子ビーム科学部門

新奇スピントロニクス材料評価に向けた電子-陽電子状態の第一原理計算

宮下 敦巳

量子ビーム科学部門 高崎量子応用研究所

先端機能材料研究部 プロジェクト陽電子ナノ物性研究

(1) 利用目的:

近年、トランジスタの微細化による高速化と低消費電力化は性能向上の限界に達しつつあり、シリコンベースのエレクトロニクスデバイスからの脱却が模索されている。そこで注目されているのが、電子の電荷自由度とスピン自由度の双方を同時に制御するスピントロニクス技術である。スピントロニクス材料を正しく評価するためには、単層膜中に注入されたスピン状態を直接観測する評価技術が欠かせないが、従来、磁化状態の評価に使われてきた超伝導量子干渉計(SQUID)装置ではバルク的な材料全体の磁化状態は測定できても局所的な測定は困難である。そこで、我々は電子と陽電子との束縛系であるポジトロニウム(Ps)を用いて物質最表面のスピン状態を測定するスピン偏極 Ps 分光測定法を確立し、スピントロニクス材料の評価を行っている。

物質中に入射した陽電子は、物質との相互作用により数 ps 程度で熱平衡に達する(熱化)。金属元素等は陽電子の仕事関数がしばしば負であり、熱化後の陽電子は自発的に再び表面から放出される。Ps は電子密度が十分に低い最表面の真空側で生成するが、図 1 に示すように、生成する Ps 内のスピン状態が電子と陽電子で並行の場合と反平行の場合とで Ps の消滅過程に差がある。ここで、3 光子消滅過程に着目すると、スピン状態が平行の場合には多く、反平行の場合には少ない。そこで、スピン偏極した陽電子ビームを用いて 3 光子消滅強度を測定することで、表面での電子スピン状態を直接測定出来る。(スピン偏極 Ps 分光測定法)

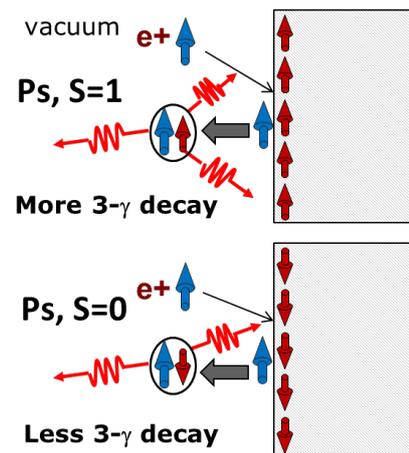


図 1 表面スピンの検出原理。
電子と陽電子のスピンが平行であると、3 光子消滅強度が多くなる。

(2) 利用内容・結果:

表面ポテンシャルに束縛されぬまま陽電子と電子が Ps を生成して放出される過程では、表面から放出される Ps の仕事関数 Φ_{Ps} は電子と陽電子の仕事関数、それぞれ、 Φ_- と Φ_+ を用い、 $\Phi_{Ps} = \Phi_+ + \Phi_- - 6.8\text{eV}$ と表される(6.8eV は Ps の結合エネルギー)ため、 Φ_{Ps} もまた負になる場合が多く、その場合 Ps も自発的に真空外に放出される。陽電子は表面から放出される時には十分に熱化しているため運動エネルギーは無視できる。よって、陽電子がフェルミ準位 E_F のエネルギーを持つ電子と結合して Ps を生成した場合、Ps の持つ運動エネルギーは $|\Phi_{Ps}|$ となる。逆に表面から放出される時のエネルギーをすべて電子の励起エネルギーに使用し、運動エネルギーがほとんど 0 で Ps が放出された場合、 E_F より $|\Phi_{Ps}|$ 分だけ安定したエネルギーを持つ電子でも励起できる。つまり、Ps の生成には E_F から $|\Phi_{Ps}|$ 分のエネルギー幅を持った電子が Ps の生成に寄与

する。よって、表面から放出された Ps の分光スペクトルは E_F から $|\Phi_{Ps}|$ 分のエネルギー幅分だけの表面第一層の電子スピン状態に影響されるため、エネルギー分解したスピン状態の導出が必要となる。

今期においては、①ポジトロニウム(Ps)分光におけるスペクトル解析、②ホイスラー合金系の空孔欠陥導入時における陽電子消滅過程の解析、の2点を目標に令和3年度の研究を進めてきた。

ポジトロニウム(Ps)分光におけるスペクトル解析では、従来の様に Ps 生成が価電子帯電子と陽電子ではなく、我々が提唱している伝導帯電子と陽電子との間でなされている可能性について検証するために、今年度は前年までに行ってきた間接遷移型半導体より効果が出やすいであろうと考えられる直接遷移型半導体である GaN や AlN を用いた Ps 分光実験について、Ps 生成過程をシミュレーションしスペクトルの検証をおこなった結果、実験結果を非常によく再現できた事で、我々の提唱している Ps 生成モデルが確からしい事を検証できた。[1]

また、Ps 分光スペクトルを測定している SP-PsTOF(spin polarized Ps time of flight)装置の状態を再現するために、Ps の放出角度制限を取り入れたスペクトル生成を行った。Ps の垂直方向からの放出角を θ とする場合、水平方向の最大運動量は $k_{//}^{max} = 2/\hbar \cdot \sqrt{m(|\Phi_{Ps}| - E)\sin\theta}$ で表されるため、例えば Ni(111)面からの Ps の放出を考えた場合、 $\Phi_{Ps} = -3.10\text{eV}$ なら $k_{//}^{max} = 1.276\sin\theta(1/\text{\AA})$ となる。図 2 に k 点を $(9 \times 9 \times 1)$ 点で計算した場合の放出角制限の状態を示すが、放出角を 90° にした場合に比べ、放出角を 20° に制限した場合、Ps によって引き出せるのは Γ 点よりの $1/8$ 以下の電子となる。この放出角制限を行った電子・陽電子積からスピン偏極率を求め、SP-PsTOF のスペクトルと比較した所 (図 3)、非常に良い一致を得て SP-PsTOF の活用に道筋をつけた。[2]

ホイスラー合金系の空孔欠陥導入時における陽電子消滅過程の解析では、バルクの Co_2MnGa (CMG)では Co_2MnAl (CMA)が B2 結晶性しかないのに対し、非常に良好な L2₁ 結晶性を持つ。しかしながら CMA が良好な電気伝導特性を持つのに対し、CMG の電気伝導特性は理論から

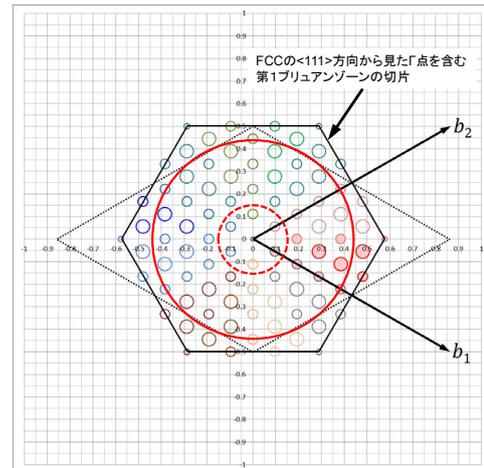


図 2 Ni(111)面での Ps 放出角による k 空間制限。実線:放出角 90° 、破線:放出角 20°

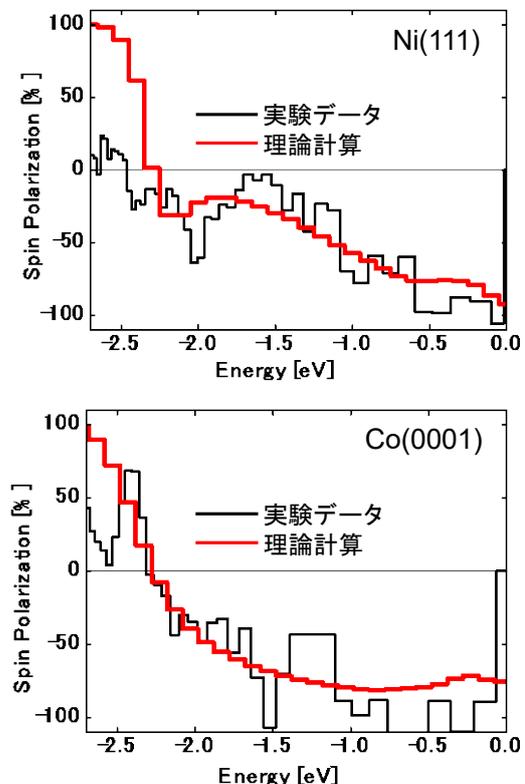


図 3 SP-PsTOF 測定によるスピン偏極率の測定結果と理論計算の比較。

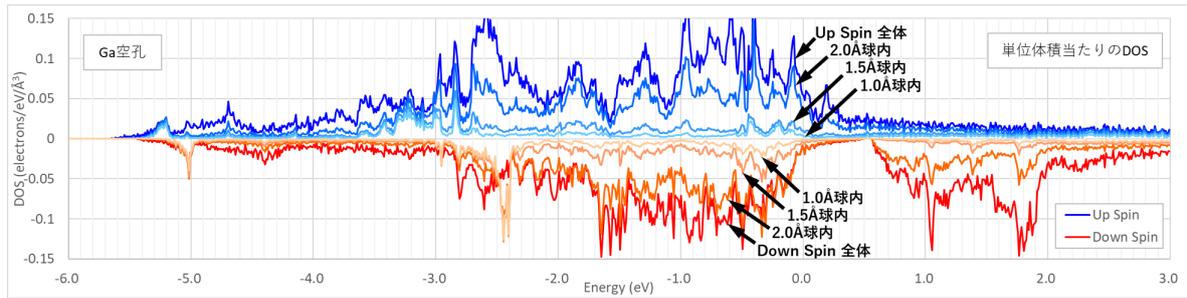


図4 Ga原子空孔を中心とする球内の状態密度関数。

期待された値には全く達していない。この矛盾を解決するために陽電子消滅測定にてその原因を探査した所、CMAにはほとんど空孔欠陥が無いのに対し、CMGには飽和量(100ppm)以上の空孔があり、これが電気伝導特性を劣化させている原因であると推測された。この空孔が何に起因しているのかを確かめるため、CMGに対してCo、Mn、Gaの単空孔を導入した場合の陽電子スペクトルを解析した結果、Ga空孔が生じているとすると良く実験結果を説明できた。そこで、Ga原子空孔が存在する場合の電子状態について調べた。Ga原子

空孔がある場合、陽電子は結晶中でGa空孔を中心とするほぼ球状に分布する。陽電子密度が50%~5%と変化した場合、その分布球の半径は凡そ1.0Å~2.0Åと変化する。そこで、Ga空孔を中心とした球内局所領域のDOS(LDOS)を求めたところ、Ga空孔内で特に高い状態密度を取る波動関数があることが分かった。(図4)その波動関数がどのような状態にあるのかを詳しく知るために、バンド図上に示す特徴的なk点上において、Ga原子空孔領域での波動関数強度を求めたところ、フェルミ準位下の浅い準位と深い準位それぞれに、強い強度を持つ波動関数が認められ、(図5)それらの空間的な分布状態等も求められた。今後、Co₂MnGaの電気伝導特性を評価する場合、これらの電子状態について検討する必要があることが示唆された。[3,4]

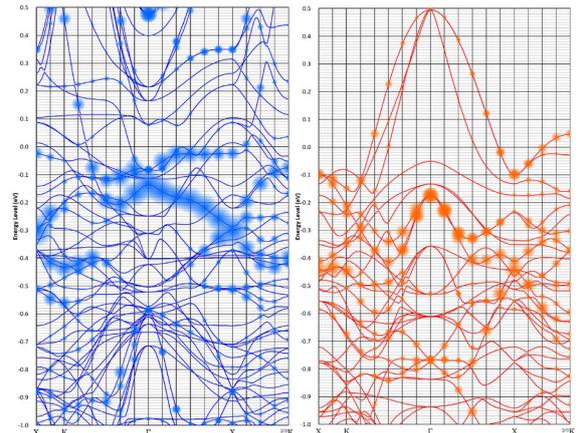


図5 バンド図上に示したGa原子空孔領域での波動関数強度(左)メジャースピン、(右)マイナースピン

(3) 今後の利用予定:

結晶内部では非磁性だが表面付近だけには磁性がある特徴的なトポロジカル物質であるFeSiについて、その磁性の起源を探るために空孔欠陥を中心とする電子状態を解析する。

[1] A. Kawasuso et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **54** (2021) 205202.

[2] M. Maekawa et al., Phys. Rev. Lett. **126** (2021) 186401.

[3] A. Miyashita et al., J. Phys.: Condens. Matter **34** (2022) 045701.

[4] A. Miyashita et al., J. App. Phys. **130** (2021) 225301.

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) スピン偏極ポジトロニウム分光による物質最表面電子状態評価, 前川 雅樹, 宮下 敦巳, 河裾 厚男, 日本物理学会 2021 年秋季大会, 日本物理学会, 2021-09-20 (Oral)
- 2) Evaluation of energy-resolved spin polarization of surface electrons by spin-polarized positronium time-of-flight method, Maekawa Masaki, Miyashita Atsumi, Kawasuso Atsuo, 12.5th International Workshop on Positron and Positronium Chemistry, Maria Curie-Skłodowska University, 2021-08-31 (Oral)
- 3) スピン偏極ポジトロニウム放出エネルギー分光測定による磁性体最表面スピン評価, 前川 雅樹, 宮下 敦巳, 河裾 厚男, 第 58 回アイソトープ・放射線研究発表会, 日本アイソトープ協会, 2021-07-09 (Oral)
- 4) Co_2MnGa 中の不規則性と点欠陥が電気伝導特性に与える影響, 河裾 厚男, 宮下 敦巳, 前川 雅樹, 鈴木 智広, 山本 春也, 関 剛斎, J. Wang, 梅津 理恵, 高梨 弘毅, 日本物理学会第 77 回年次大会, 日本物理学会, 2022-03-17 (Oral)
- 5) ワイル半金属候補物質 Co_2MnGa の多量原子空孔内包 原子空孔の規則化における役割, 河裾 厚男, 宮下 敦巳, 前川 雅樹, 梅津 理恵, 京都大学複合原子力科学研究所専門研究会「陽電子科学とその理工学への応用」, 京都大学, 2021-12-10 (Oral)
- 6) ワイル半金属候補物質 Co_2MnGa の多量原子空孔内包 原子空孔に付随する電子状態, 宮下 敦巳, 前川 雅樹, 河裾 厚男, 梅津 理恵, 2021 年度 京都大学複合原子力科学研究所専門研究会「陽電子科学とその理工学への応用」, 京都大学, 2021-12-10 (Oral)
- 7) 表面ポジトロニウム分光法の高度化, 前川 雅樹, 宮下 敦巳, 河裾 厚男, 日本物理学会第 77 回年次大会, 日本物理学会, 2022-03-17 (Oral)
- 8) スピン偏極ポジトロニウム分光法の開発, 前川 雅樹, 宮下 敦巳, 河裾 厚男, 京都大学複合原子力科学研究所専門研究会「陽電子科学とその理工学への応用」, 京都大学複合原子力科学研究所, 2021-12-10 (Oral)
- 9) ワイル半金属候補物質 Co_2MnGa が内包する多量の磁性空孔ースピン偏極陽電子による観測一, 河裾 厚男, 宮下 敦巳, 前川 雅樹, 瀬古 典明, 下山 陽子, 梅津 理恵, 日本物理学会 2021 年秋季大会, 日本物理学会, 2021-09-20 (Oral)

- 10) Positronium emission from semiconductors, Kawasuso Atsuo, 河裾 厚男, Miyashita Atsumi, 宮下 敦巳, Maekawa Masaki, 前川 雅樹, 和田 健, 石田 明, 長嶋 泰之, 12.5th International Workshop on Positron and Positronium Chemistry (PPC 12.5), Radek Zaleski (Maria Curie-Skłodowska University), 2021-09-03 (Oral)
- 11) 第一原理バンド計算によるポジトロニウム分光スペクトルの解析 放出角制限における k 空間選択, 宮下 敦巳, 前川 雅樹, 河裾 厚男, 第 58 回アイソトープ・放射線研究発表会, 日本アイソトープ協会, 2021-07-09 (Oral)
- 12) GaN(0001)表面における ポジトロニウム生成, 河裾 厚男, 河裾, 前川 雅樹, 宮下 敦巳, 和田 健, 長嶋 泰之, 石田 明, 第 58 回アイソトープ・放射線研究発表会, 日本アイソトープ協会, 2021-07-09 (Oral)
- 13) スピン偏極陽電子消滅法による窒化ガリウムの空孔誘起電子スピンの光制御評価, 前川 雅樹, 河裾 厚男, 宮下 敦巳, QST 高崎サイエンスフェスタ 2021, 高崎量子応用研究所, 2021-12-08 (Poster)

学術論文

- 14) Effect of disorder and vacancy defects on electrical transport properties of Co₂MnGa thin films grown by magnetron sputtering, Miyashita Atsumi, Maekawa Masaki, Suzuki Chihiro, Yamamoto Shunya, Kawasuso Atsuo, Jian WANG, Seki Takeshi, Umetsu Rie, Takanashi Koki, Journal of Applied Physics, 130(22), 225301, 2021-12, DOI:10.1063/5.0071807
- 15) Positronium emission from GaN(0001) and AlN(0001) surfaces, Kawasuso Atsuo, Maekawa Masaki, Miyashita Atsumi, Wada Ken, 長嶋 泰之, 石田 明, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 54(20), 205202, 2021-11, DOI:10.1088/1361-6455/ac32a0
- 16) High-density magnetic-vacancy inclusion in Co₂MnGa single crystal probed by spin-polarized positron annihilation spectroscopy, Miyashita Atsumi, Maekawa Masaki, Shimoyama Yoko, Seko Noriaki, Kawasuso Atsuo, Umetsu Rie, Journal of Physics: Condensed Matter, 34(4), 045701, 2021-11, DOI:10.1088/1361-648X/ac3304
- 17) Activity Enhancement of a Carbon Electrode Material for Vanadium Redox Flow Battery by Electron-Beam Irradiation, Hirokazu Ishitobi, Yamamoto Shunya, Takafumi Ishii, Oba Kosuke, Doki Honoka, Obata Ryusuke, Miyashita Atsumi, Okazaki Hiroyuki, Nobuyoshi Nakagawa, JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING OF JAPAN, 54(5), 219 - 225, 2021-05, DOI:10.1252/jcej.20we096

- 18) Spin-Polarized Positronium Time-of-Flight Spectroscopy for Probing Spin-Polarized Surface Electronic States, Maekawa Masaki, Miyashita Atsumi, Sakai Seiji, Li Songtian, Entani Shiro, Kawasuso Atsuo, physical review letters, 126(18), 186401, 2021-06, DOI:10.1103/PhysRevLett.126.186401

記事の執筆

- 19) 半導体表面からのポジトロニウム放出, 河裾 厚男, 和田 健, 前川 雅樹, 宮下 敦巳, 陽電子科学, (18), 1 - 17, 2022-03

外部資金獲得

- 20) 科学研究費助成事業 基盤研究(B) 新しい最表面分析法-中性化高速ポジトロニウム分光は可能か?, 前川 雅樹, 宮下 敦巳, 河裾 厚男

二次電子制動輻射測定による治療用粒子線モニタリング手法の開発

山口 充孝

量子ビーム科学部門 高崎量子応用研究所

放射線生物応用研究部 プロジェクト「RI イメージング研究」

(1) 利用目的:

粒子線の体内軌跡や到達位置、体内線量分布をリアルタイムで測定できれば、位置ずれが生じた瞬間に粒子線を修正できるようになる。これにより、医師がより効果的で効率的な治療に踏み込めるようになり、結果として、人体の正常組織への影響を最小限に抑え治療効果を最大限に引き出すことが可能になる。利用者等は電子制動輻射を情報源とした粒子線の可視化研究を行っている。電子制動輻射は連続的なエネルギー分布を持つ硬 X 線領域 (30~100 keV) の光子で、エネルギーが低いため対消滅ガンマ線と比較して測定が圧倒的に容易であり、さらに、発生量も格段に大きく感度の非常に高いイメージング装置を実現できる可能性を持つ。また、即発性であるため血流などによる発生源移動の問題も原理的に生じない。これまでに、電子制動輻射の測定によって単純形状の標的 (水槽) に入射した粒子線を、ピンホール型 X 線カメラを用いて撮影することに成功している。

今年度は、電子制動輻射による炭素イオンビームのイメージング手法の臨床応用可能性の検討を目的とした研究を進めた。

(2) 利用内容・結果:

人体の頭部を模したデジタルファントムに、入射エネルギーの違いにより水中飛程が 2 cm ずつ異なる 3 つの炭素イオンビームを入射し、ファントム周囲に配置した X 線カメラにより到達深さの違いを識別可能かどうか、PHITS を用いたモンテカルロシミュレーションによって評価した。

これまで、シミュレーションの計算負荷を軽減するために、SEB-source サブプログラムを用いたシミュレーションを行ってきたが、このサブプログラムは人体ファントムのような構成物質やその密度が標的内の場所によって異なる場合は利用できない。そこで、今回は、以下のような接続計算を行い、電子輸送の計算量を削減したシミュレーションを実現した。まず、電子制動輻射の放出位置と放出方向と、電子制動輻射放出前の電子の進行方向を記録した。次に、記録した電子制動輻射をソースとして一つの電子制動輻射輸送計算を 100 回程度繰り返した。ただし、繰り返す際に電子の進行方向に対する電子制動輻射の放出方向の方位角をイベント毎にランダムに変更した。この接続計算により、計算量の多い電子輸送計算の量を百分の一程度に削減することが可能となった。

図 1 にシミュレーションジオメトリを示す。右手系を定義し y 軸を鉛直にして原点付近に顔面が上を向くように頭部ファントムを配置した。このファントムを取り囲むように 24 台の X

線カメラを 15°置きに配置した。z 軸は頭尾軸と一致させ、y z 平面は矢状面と一致させた。また、ビーム軸は y 軸と一致させ、ビームを形成するイオンの進行方向を y 軸の負方向とした。ビーム中心軸の x, z 座標は 9 箇所程度変化させた。1 回のシミュレーションでの炭素イオン入射数はおよそ 1.0×10^{10} とし、入射エネルギーは 241.5, 210, 190 MeV/u の 3 種類について実施した。横断方向のビーム強度分布はガウス分布とし、分布の半値幅は実測実験において予定している値と一致させた。X 線カメラのジオメトリーは過去のシミュレーション (Seiichi Yamamoto, Mitsutaka Yamaguchi, et al.,

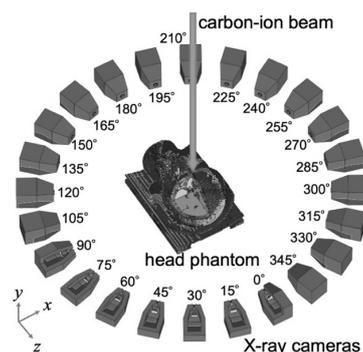


図 2: シミュレーションジオメトリー。カメラおよびファントムの内部を表示するため $x < 0$ かつ $y > 0$ かつ $z < 0$ の領域の物質を非表示にした。

Phys. Med. Biol., 65 (2020) 105008) で用いたものを使用し、タングステンの放射線シールドの中に YAP シンチレーション結晶シートを配置した構造とした。シミュレーションでは YAP シンチレーション結晶に 30~60 keV のエネルギー付与を起こしたイベントを 2 次元ヒストグラムとして記録した。シミュレーション後、2 次元ヒストグラムを座標原点に位置する視野平面に逆投影することでビームイメージを作成し、作成したビームイメージと粒子線治療施設において取得予定の実測結果を用い、2 cm の水中飛程の違いを明確に識別できることが明らかになった。以上の結果について、査読付き論文誌 (Medical Physics) に投稿を行い、現在、査読プロセスが進んでいる。

(3) 今後の利用予定:

本研究により人体ファントム中の治療ビームについて 2 cm の飛程の違いを識別できることが分かった。今後は、ビームエネルギーをさらに細かく変更したシミュレーションを実施し、ミリメートルオーダーの差異の検出可能性を検討する。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Monte Carlo simulation on prompt X-ray imaging of therapeutic carbon-ion beams in a human-head phantom, M. Yamaguchi, S. Yamamoto, M. Kitano, T. Akagi, Y. Nagao, N. Kawachi, 2021 Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference, Yokohama, Japan (Online), 2021 年 10 月 (Poster)
- 2) 頭部ファントム中の治療用炭素イオン線の即発 X 線による可視化, 山口 充孝, 山本 誠一, 喜多野 真紀, 赤城 卓, 長尾 悠人, 河地 有木, 第 68 回応用物理学会春季学術講演会, オンライン開催, 2021 年 3 月 (Oral)

量子メス入射器開発におけるレーザー加速器シミュレーション

近藤 公伯、Koga James、Esirkepov Timur、守田 利昌
量子ビーム科学研究部門 関西光科学研究所 光量子科学研究部

(1) 利用目的:

The goal of this study was to determine how an ultra-high intensity laser interacts with thin targets consisting of Carbon of varying thicknesses via three-dimensional (3D) particle-in-cell (PIC) simulations.

(2) 利用内容・結果:

Ultrahigh intensity lasers interacting with thin solid targets can accelerate ions to high energies. The mechanism by which the ions are accelerated depends on whether the laser pulse is reflected from, partially penetrates, or propagates through the target. We performed 3D PIC simulations using the open-source code EPOCH [1,2]. Figure 1 shows a slice in the z-direction around the center of the simulation box of the interaction of a laser of intensity 4×10^{21} W/cm² and duration of 45 fs with a 30 nm thick mostly Carbon target at an inclination of 45 degrees in the x-y plane where the laser is propagating from the left to the right in the x-direction. The laser has propagated through the target.

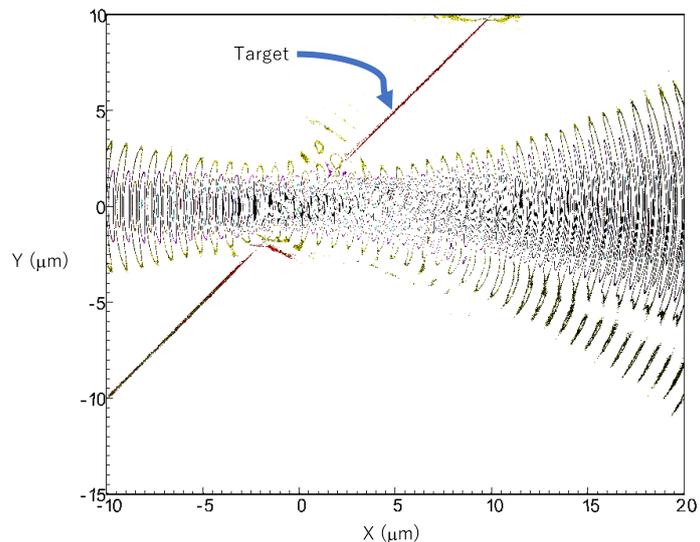


Figure 1. EPOCH 3D PIC simulation of ultra-intense laser interaction with a solid target.

The laser has propagated through the target.

(3) 今後の利用予定:

In the next stages we plan to add the effects of the laser pre-pulse on the target using hydrodynamic simulations. This will more realistically model the ultra-high intensity laser-target interaction.

Acknowledgement

This work was done in collaboration with Nicholas P. Dover and Mamiko Nishiuchi.

References

[1] T. D. Arber et al. ‘Contemporary particle-in-cell approach to laser-plasma modeling’
Plasma Physics & Controlled Fusion, 57 (2015) 113001.

[2] <https://epochpic.github.io>

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Optimization of BISER via Laser and Plasma Tuning, A. Shatokhin, A. Kotov, T. M. Jeong, G. M. Grittani, T. Dzelzainis, G. Hull, S. Dann, Sagisaka Akito, E. Vishnyakov, A. Kolesnikov, Koike Masato, Esirkepov Timur, Kando Masaki, Ogura Koichi, T. A. Pikuz, James Kevin Koga, Kiriyama Hiromitsu, A. Soloviev, E. Ragozin, Sergey Bulanov, Kondo Kiminori, Kawachi Tetsuya, D. Symes, D. Neely, Alexander Pirozhkov, OPIC-2022 (ALPS-2022), OPIC, 2022-04-21(Oral)
- 2) レーザー駆動イオン加速における 横方向エミッタンス診断系の開発, 竹本 伊吹, 榊 泰直, 宮武 立彦, 小島 完興, 近藤 康太郎, 西内 満美子, タンフン ゼン, 錦野 将元, 渡辺 幸信, 岩田 佳之, 白井 敏之, 神門 正城, 近藤 公伯, 第 69 回応用物理学会春季学術講演会, 応用物理学会, 2022-03-22(Oral)
- 3) 量子メス用レーザー駆動イオン加速型入射器の開発, 榊 泰直, 宮武 立彦, 竹本 伊吹, 小島 完興, 近藤 康太郎, 西内 満美子, タンフン ゼン, 錦野 将元, 渡辺 幸信, 岩田 佳之, 白井 敏之, 神門 正城, 近藤 公伯, 第 69 回応用物理学会春季学術講演会, 応用物理学会, 2022-03-22(Oral)
- 4) BISER enhancement with Astra laser, A. Shatokhin, A. Kotov, T. M. Jeong, G. M. Grittani, T. Dzelzainis, G. Hull, S. Dann, Sagisaka Akito, E. Vishnyakov, A. Kolesnikov, Koike Masato, Esirkepov Timur, Kando Masaki, Ogura Koichi, T. A. Pikuz, James Kevin Koga, Kiriyama Hiromitsu, A. Soloviev, E. Ragozin, Sergey Bulanov, Kondo Kiminori, Kawachi Tetsuya, D. Symes, D. Neely, Alexander Pirozhkov, Annual meeting of the JSAP, JSAP, 2022-03-22(Oral)
- 5) 三次元 PIC コードによるレーザー加速イオンの定量評価, 畑 昌育, 小島 完興, 千徳 靖彦, 近藤 康太郎, タンフン ゼン, 宮武 立彦, 長谷川 登, 石野 雅彦, 森 道昭, 榊 泰直, 西内 満美子, 今 亮, 錦野 将元, 神門 正城, 白井 敏之, 近藤 公伯, 日本物理学会第 77 回年次大会, 日本物理学会, 2022-03-15(Oral)

- 6) 超高強度短パルスレーザーの時間波形がイオン加速へ与える影響, Nishiuchi Mamiko, Nicholas Peter Dover, Sakaki Hironao, Hazel Frances Lowe, Kon Akira, Kondo Kotaro, Kiriya Hiromitsu, Kondo Kiminori, Kando Masaki, Miyatake Tatsuhiko, LIU Chang, 畑 昌育, Watanabe Yukinobu, Ditter Emma-Jane, Hicks George, Najmudin Zulfkar, Ziegler Tim, Garten Marco, Goethel Iria, S. Assenbaum, C. Bernert, Stefan Bock, M. Rehwald, Pueschel Thomas, M.E.P. Umlandt, T. Kluge, U. Schramm, K. Zeil, N. Iwata, Y. Sentoku, 第 77 回物理学会年次大会, 日本物理学会, 2022-03-15(Oral)
- 7) 多価重イオンでプローブする高強度短パルスレーザーによるプラズマ中のダイナミクス, 西内 満美子, ドーバー ニコラス ピーター, 畑 昌育, 榊 泰直, 近藤 康太郎, 桐山 博光, コーガ ジェームズ, 岩田夏弥, ピロジコフ アレキサンダー, ファエノフ アナトリー, ピクツ タチアナ, 匂坂 明人, 渡辺 幸信, 神門 正城, 近藤 公伯, データー エマ, エットリンガー オリバー, ヒックス ジョージ, ナジュムディン ゴフカ, チグラウ チム, ザイル カール, シュラム ウルリッヒ, 千徳 靖彦, レーザープラズマ原子過程シミュレーションオンライン研究会, QST, 2021-07-01(Oral)
- 8) Overview of the 10^{22} Experiment with the J-KAREN-P laser, Alexander Pirozhkov, Akito Sagisaka, Koichi Ogura, Esirkepov Timur, Bruno Gonzalez izquierdo, A. N. Shatokhin, E. A. Vishnyakov, C. Armstrong, T. A. Pikuz, M. A. Alkhimova, S. A. Pikuz, W. Yan, T. M. Jeong, S. Singh, P. Hadjisolomou, O. Finke, G. Grittani, M. Nevrkla, C. Lazzarini, A. Velyhan, Takehito Hayakawa, Yuuji Fukuda, James Kevin Koga, Masahiko Ishino, Kotaro Kondo, Yasuhiro Miyasaka, Akira Kon, Masaharu Nishikino, A. O. Kolesnikov, E. N. Ragozin, D. Khikhlikha, I. P. Tsygvintsev, V. A. Gasilov, D. Kumar, J. Nejd, D. Margarone, P. Sasorov, S. Weber, Masaki Kando, Hiromitsu Kiriya, G. Korn, D. Neely, Kiminori Kondo, Sergey Bulanov, Tetsuya Kawachi, OPTO-2021 Symposium on Photon and Beam Science, KPSI QST and ILE Osaka University, 2021-06-22(Oral)
- 9) Multiple diagnostics in laser-plasma experiment at $\sim 10^{22}$ W/cm², Alexander Pirozhkov, Akito Sagisaka, Koichi Ogura, Esirkepov Timur, Bruno Gonzalez izquierdo, A. N. Shatokhin, E. A. Vishnyakov, C. Armstrong, T. A. Pikuz, M. A. Alkhimova, S. A. Pikuz, W. Yan, T. M. Jeong, S. Singh, P. Hadjisolomou, O. Finke, G. Grittani, M. Nevrkla, C. Lazzarini, A. Velyhan, Takehito Hayakawa, Yuuji Fukuda, James Kevin Koga, Masahiko Ishino, Kotaro Kondo, Yasuhiro Miyasaka, Akira Kon, Masaharu Nishikino, A. O. Kolesnikov, E. N. Ragozin, D. Khikhlikha, I. P. Tsygvintsev, V. A. Gasilov, D. Kumar, J. Nejd, D. Margarone, P. Sasorov, S. Weber, Masaki Kando, Hiromitsu Kiriya, G. Korn, D. Neely, Kiminori Kondo, Sergey Bulanov, Tetsuya Kawachi, OPTICS & PHOTONICS International Congress 2021, OPTICS & PHOTONICS International Council, 2021-04-20(Oral)

- 10) X-ray spectroscopy of relativistic plasma with controlled preplasma formation at J-KAREN-P experiments, T. Pikuz, M. A. Alkhimova, S. N. Ryazantsev, I. Yu. Skobelev, S. Pikuz, A. S. Martynenko, M. V. Sedov, A. N. Shatokhin, E. A. Vishnyakov, Sagisaka Akito, Ogura Koichi, B. Gonzalez Izquierdo, Kondo Kotaro, Miyasaka Yasuhiro, Kon Akira, Ishino Masahiko, Nishikino Masaharu, Esirkepov Timur, James Kevin Koga, Kando Masaki, Kiriyama Hiromitsu, Kondo Kiminori, R. Kodama, Kawachi Tetsuya, Fukuda Yuji, Alexander Pirozhkov, Y. Sakawa, International Conference on High Energy Density Sciences (HEDS2021), OPTICS & PHOTONICS International 2021 Congress, Laser Lab., Osaka University, AsianCore program, JSPS, 2021-04-19(Oral)
- 11) X-ray spectroscopy evidence of solid-density ultra-relativistic laser plasma in renewable micron-scale cryogenic clusters targets, S. N. Ryazantsev, T. A. Pikuz, S. A. Pikuz, T. Kaji, H. Tanabe, T. Nakagawa, Asai Takafumi, M. Kanasaki, K. Oda, T. Yamauchi, S. Jinno, T. Taguchi, K. Himeno, K. Iwasaki, T. Hihara, K. Sakai, T. Minami, Y. Abe, A. Tokiyasu, H. Kohri, Y. Kuramitsu, Y. Sakawa, Miyasaka Yasuhiro, Kondo Kotaro, Kon Akira, Sagisaka Akito, Ogura Koichi, Alexander Pirozhkov, Kando Masaki, Kondo Kiminori, Kawachi Tetsuya, Kiriyama Hiromitsu, Fukuda Yuji, International Conference on High Energy Density Sciences (HEDS2021), OPTICS & PHOTONICS International 2021 Congress, Laser Lab., Osaka University, AsianCore program, JSPS, 2021-04-19(Oral)
- 12) Possible precision measurements of Delbruck scattering with high flux polarized gamma-ray sources, James Kevin Koga, Hayakawa Takehito, Japan-US Joint Seminar on High Density Science, Osaka University, 2022-04-06(Oral)
- 13) Temporal characterization of laser wakefield accelerated relativistic electron bunches via electro-optic sampling, KAI HUANG, Kotaki Hideyuki, Mori Michiaki, Esirkepov Timur, James Kevin Koga, Hayashi Yukio, Nakanii Nobuhiko, Kando Masaki, Zhan Jin, Hosokai Tomonao, 第5回 RIKEN-RAP and QST-KPSI Joint Seminar, 理化学研究所 量子工学研究センター (RAP, RIKEN); 量子科学技術研究開発機構・関西光科学研究所 (KPSI, QST), 2022-02-04(Oral)
- 14) New Regime of Ultrahigh Laser and High Electron/Positron Interaction, James Kevin Koga, Kando Masaki, ILC Workshop on Potential Experiments (ILCX), IDT, KEK and JAHEP ILC Steering Panel, 2021-10-27(Oral)
- 15) Searching for Extremely Weakly-Interacting Particles with the Gamma Factory, Sreemanti Chakraborti, Jonathan L. Feng, James Kevin Koga, Mauro Valli, JPS Autumn Meeting 2021, Physical Society of Japan, 2021-09-16(Oral)

- 16) Measurement of BISER, Sagisaka Akito, Ogura Koichi, Esirkepov Timur, David Neely, Tatiana A. Pikuz, James Kevin Koga, Fukuda Yuuji, Kotaki Hideyuki, Hayashi Yukio, KAI HUANG, Bruno Gonzalez izquierdo, Sergey Bulanov, Kiriya Hiromitsu, Kondo Kiminori, Kawachi Tetsuya, Kando Masaki, Alexander Pirozhkov, 光・量子ビーム科学合同シンポジウム 2021, 大阪大学、量子科学技術研究開発機構, 2021-06-22(Poster)
- 17) Recent progress in x-ray spectral diagnostics of contrast dependent plasma at relativistic intensities of $\sim 10^{22}$ W/cm², T. Pikuz, M. Alkhimova, S. Ryazantsev, I. Yu. Skobelev, S. Pikuz, A.S. Martynenko, M.V. Sedov, A.N. Shatokhin, E.A. Vishnyakov, Sagisaka Akito, Ogura Koichi, B. Gonzalez Izquierdo, Kondo Kotaro, Miyasaka Yasuhiro, Kon Akira, Ishino Masahiko, Nishikino Masaharu, Esirkepov Timur, James Kevin Koga, Kando Masaki, Kiriya Hiromitsu, Kondo Kiminori, R. Masui, Y. Kishimoto, M. Ota, Asai Takafumi, M. Kanasaki, S. Jinno, Y. Kuramitsu, R. Kodama, Kawachi Tetsuya, Fukuda Yuuji, Alexander Pirozhkov, Y. Sakawa, 3rd International Conference on Nuclear Photonics NP2020, Institute of Laser Engineering (ILE), Osaka University, 2021-06-07(Poster)
- 18) Generation of hard x-rays at intensities approaching 10^{22} W/cm², Alexander Pirozhkov, Akito Sagisaka, Koichi Ogura, Esirkepov Timur, Bruno Gonzalez izquierdo, A. N. Shatokhin, E. A. Vishnyakov, C. Armstrong, T. A. Pikuz, M. A. Alkhimova, S. A. Pikuz, W. Yan, T. M. Jeong, S. Singh, P. Hadjisolomou, O. Finke, G. Grittani, M. Nevrkla, C. Lazzarini, A. Velyhan, Takehito Hayakawa, Yuuji Fukuda, James Kevin Koga, Masahiko Ishino, Kotaro Kondo, Yasuhiro Miyasaka, Akira Kon, Masaharu Nishikino, A. O. Kolesnikov, E. N. Ragozin, D. Khikhlikha, I. P. Tsygvintsev, V. A. Gasilov, D. Kumar, J. Nejd, D. Margarone, P. Sasorov, S. Weber, Masaki Kando, Hiromitsu Kiriya, G. Korn, D. Neely, Kiminori Kondo, Sergey Bulanov, Tetsuya Kawachi, 3rd International Conference on Nuclear Photonics (NP2020), Organizing Committee of International Conference on Nuclear Photonics 2020, 2021-06-07(Poster)
- 19) On the possibility of the detection of viruses in air via laser induced breakdown spectroscopy, コーガ ジェームズ, 光・量子ビーム科学合同シンポジウム 2022 (OPTO2022) , QST and Osaka University, 2022-06-29(Poster)
- 20) Investigation on the emission timings of electron bunches from laser wakefield acceleration via EO spatial decoding, KAI HUANG, Kotaki Hideyuki, Mori Michiaki, Esirkepov Timur, James Kevin Koga, Hayashi Yukio, Nakani Nobuhiko, Sergey Bulanov, Kando Masaki, 第 25 回産研国際シンポジウム, 大阪大学 産業科学研究所, 2022-01-07(Poster)

- 21) 超高強度レーザーによる高電離重金属プラズマの形成過程の解明, 西内 満美子, N.P.Dover, 畑 昌育, 杉本 薫, コーガ ジェームズ, 今 亮, 近藤 康太郎, 岩田 夏弥, 榎 泰直, 千徳 靖彦, OPTO2021, 大阪大学 QST, 2021-06-22(Poster)
- 22) Delbrück scattering using linearly polarized gamma-rays generated by laser Compton scattering at UVSOR-III, Takehito Hayakawa, Heishun Zen, Keigo Kawase, MAsaki Fujimoto, Yoshitaka Taira, Toshiyuki Shizuma, James K. Koga, Ryoichi Hajima, Toshiteru Kii, Hideaki Ohgaki, Masahiro Katoh, Nuclear Photonics 2020, Osaka University, 2021-06-08(Poster)
- 23) 2021 Astra BISER experiment highlights, A. Shatokhin, A. Kotov, T. M. Jeong, G. M. Grittani, T. Dzelzainis, G. Hull, S. Dann, Sagisaka Akito, E. Vishnyakov, A. Kolesnikov, Esirkepov Timur, Kando Masaki, A. Soloviev, E. Ragozin, D. Symes, D. Neely, Alexander Pirozhkov, 2021 Christmas Meeting of the High Powered Laser Science Community, CLF RAL, 2021-12-14(Poster)

招待発表

- 24) Energetic and highly charged ion acceleration by temporally controlled high intensity femtosecond laser pulses, Nishiuchi Mamiko, NicholasPeter Dover, Sakaki Hironao, HazelFrances Lowe, Kon Akira, Kondo Kotaro, Kiriyama Hiromitsu, Kondo Kiminori, Kando Masaki, Miyatake Tatsuhiko, Watanabe Yukinobu, Ditter Emma-Jane, Hicks George, Najmudin Zulfkar, Ziegler Tim, Garten Marco, Goethel Iria , S. Assenbaum, C. Bernert, Stefan Bock, M. Rehwald, Pueschel Thomas , M.E.P. Umlandt, T. Kluge, U. Schramm, K. Zeil, N.Iwata, Y. Sentoku, International Toki Conference, National Institute for Fusion Science, 2021-11-19
- 25) X-ray spectra features of ultra-relativistic laser plasma with above critical density generated in cryogenic cluster targets by a PW laser pulse, S.N. Ryazantsev, T.A. Pikuz, S.A. Pikuz, T. Kaji, H. Tanabe, T. Nakagawa, Asai Takafumi, M. Kanasaki, K. Oda, T. Yamauchi, S. Jinno, T. Taguchi, K. Himeno, K. Iwasaki, T. Hihara, K. Sakai, T. Minami, Y. Abe, A. Tokiyasu, H. Kohri, Y. Kuramitsu, Y. Sakawa, Miyasaka Yasuhiro, Kondo Kotaro, Kon Akira, Sagisaka Akito, Ogura Koichi, Alexander Pirozhkov, Kando Masaki, Kondo Kiminori, Kawachi Tetsuya, Kiriyama Hiromitsu, Fukuda Yuji, 5th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics, Division of Plasma Physics, Association of Asia-Pacific Physical Societies, 2021-10-01

- 26) Experiment towards the Gamma Flare regime, Alexander Pirozhkov, Akito Sagisaka, Koichi Ogura, Esirkepov Timur, Bruno Gonzalez izquierdo, A. N. Shatokhin, E. A. Vishnyakov, C. Armstrong, T. A. Pikuz, M. A. Alkhimova, S. A. Pikuz, W. Yan, T. M. Jeong, S. Singh, P. Hadjisolomou, O. Finke, G. Grittani, M. Nevrkla, C. Lazzarini, A. Velyhan, Takehito Hayakawa, Yuuji Fukuda, James Kevin Koga, Masahiko Ishino, Kotaro Kondo, Yasuhiro Miyasaka, Akira Kon, Masaharu Nishikino, A. O. Kolesnikov, E. N. Ragozin, D. Khikhlikha, I. P. Tsygvintsev, V. A. Gasilov, D. Kumar, J. Nejd, D. Margarone, P. Sasorov, S. Weber, Masaki Kando, Hiromitsu Kiriya, G. Korn, D. Neely, Kiminori Kondo, Sergey Bulanov, Tetsuya Kawachi, AAPPS-DPP2021, AAPPS-DPP, 2021-09-27
- 27) Enhancement of the accelerated ion beam quality by controlling the temporal profile of the high intensity short pulse laser system, Nishiuchi Mamiko, Nicholas Peter Dover, Sakaki Hironao, Hazel Frances Lowe, Kon Akira, Kondo Kotaro, Kiriya Hiromitsu, Kondo Kiminori, Kando Masaki, Miyatake Tatsuhiko, Watanabe Yukinobu, Ditter Emma-Jane, Hicks George, Najmudin Zulfkar, Ziegler Tim, Garten Marco, Goethel Iria, S. Assenbaum, C. Bernert, Stefan Bock, M. Rehwald, Poeschel Thomas, M.E.P. Umlandt, T. Kluge, U. Schramm, K. Zeil, Asia Pacific Conference on Plasma Physics 2021, Asia Pacific Conference on Plasma Physics, 2021-09-27
- 28) Highly ionized heavy ion acceleration via ultra-relativistic high fields with PW lasers, 西内 満美子, N. P. Dover, Kon Akira, Kondo Kotaro, Chang Liu, Kiriya Hiromitsu, Sakaki Hironao, Hazel Lowe, Kando Masaki, James Kevin Koga, Miyatake Tatsuhiko, Takemoto Ibuki, Emma-Jane Ditter, Gorge S. Hicks, Zulfkar Najmudin, T. Ziegler, S. Bock, T. Poeschel, M. Umlandt, T. Kluge, U. Schramm, K. Zeil, N. Iwata, Y. Sentoku, IBS Conference on Ultrahigh Intensity Lasers (ICUIL2022), IBS, 2022-09-19
- 29) Temporal characterization of laser driven ultrafast electron bunches via electro-optic sampling, KAI HUANG, Kotaki Hideyuki, Mori Michiaki, Esirkepov Timur, James Kevin Koga, Hayashi Yukio, Nakanii Nobuhiko, Zhan Jin, Hosokai Tomonao, Kando Masaki, The 30th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research, National Institute for Fusion Science, 2021-11-19
- 30) Higher Order Delbrück Scattering, James Kevin Koga, Takehito Hayakawa, 3rd International Conference on Nuclear Photonics (NP2020), Osaka University, 2021-06-09
- 31) BISER coherent x-rays source, Alexander Pirozhkov, Esirkepov Timur, Bruno Gonzalez izquierdo, Akito Sagisaka, T. A. Pikuz, Z. E. Davidson, Koichi Ogura, Andreas Bierwage, KAI HUANG, Nobuhiko Nakanii, James Kevin Koga, A. Ya. Lopatin, Yuuji Fukuda, D. Neely, P. McKenna, E. N. Ragozin, S. A. Pikuz, N. I. Chkhalo, N. N. Salashchenko, Shinichi Namba, Hiromitsu Kiriya, Masato Koike, Kiminori Kondo, Tetsuya Kawachi, Masaki Kando, XXV International Symposium "Nanophysics and Nanoelectronics", Institute for Physics of Microstructures of Delbrück RAS, 2021-03-10

学術論文

- 32) 極端紫外 (EUV) 域低入射角高回折効率ラミナー型回折格子の設計, 小池 雅人, 村野 孝訓, 越谷 翔悟, 羽多野 忠, ピロジコフ アレキサンダー, 垣尾 翼, 林 信和, 長野 哲也, 近藤 公伯, 寺内 正己, X線分析の進歩, 53, 70 - 76, 2022-03
- 33) Denoising application for electron spectrometer in laser-driven ion acceleration using a Simulation-supervised Learning based CDAE, Tatsuhiko Miyatake, Keiichiro Shiokawa, Hironao Sakaki, Nicholas Peter Dover, Mamiko Nishiuchi, Hazel Frances Lowe, Kotaro Kondo, Akira Kon, Masaki Kando, Kiminori Kondo, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 999, 165227, 2021-05, DOI:10.1016/j.nima.2021.165227
- 34) Gamma factory searches for extremely weakly interacting particles, Sreemanti Chakraborti, Jonathan L. Feng, James Kevin Koga, Mauro Valli, Physical Review D, 104, 055023-1 - 055023-13, 2021-09, DOI:10.1103/PhysRevD.104.055023
- 35) Relativistic flying laser focus by a laser-produced parabolic plasma mirror, Tae Moon Jeong, Sergey Bulanov, Petr Valenta, Georg Korn, Esirkepov Timur, James Kevin Koga, Alexander Pirozhkov, Kando Masaki, Stepan S. Bulanov, Physical Review A, 104(5), 053533, 2021-12, DOI:10.1103/PhysRevA.104.053533
- 36) Nanoscale subsurface dynamics of solids upon high-intensity femtosecond laser irradiation observed by grazing-incidence x-ray scattering, L.Randolph, M.Banjafar, T.R.Preston, T.Yabuuchi, M.Makita, N.P.Dover, S.Gode, Y.Inubushi, G.Jakob, J.Kaa, A. Kon, J.K.Koga, D.Ksenzov, T.Matsuoka, M.Nishiuchi, M.Paulus, Ch.Rodel, F.Schon, K.Sueda, Y.Sentoku, T.Togashi, M.Vafae-Khanjani, M.Bussmann, T.E.Cowan, M.Kloui, C.Fortmann-Grote, A.P.Mancuso, T.Kluge, C.Gutt, M.Nakatsutsumi, Physical Review Research, 4(3), 33038, 2022-07, DOI:10.1103/PhysRevResearch.4.033038
- 37) Superluminal-subluminal orbital angular momentum femtosecond laser focus, Tae Moon Jeong, Sergey Bulanov, Prokopis Hadjisolomou, Esirkepov Timur, Optics Express, 29(20), 31665 - 31679, 2021-12, DOI:10.1364/OE.439377
- 38) Generation of High Order Harmonics in Heisenberg-Euler Electrodynamics, Pavel Satorov, Francesco Pegoraro, Esirkepov Timur, Sergey Bulanov, New Journal of Physics, 23, 105003, 2021-10, DOI:10.1088/1367-2630/ac28cb

講義・講演

- 39) 量子メス技術開発の成果と課題, 白井 敏之, 近藤 公伯, 第5世代重粒子線がん治療-量子メスシンポジウム, 量子科学技術研究開発機構, 2021-07-15
- 40) Online Seminar The possibility for virus detection in air using high power lasers, James Kevin Koga, Online Seminar, アカデミスト株式会社, QST, 2021-11-21
- 41) Role of plasma behind high intensity laser-matter interaction and future prospect, James Kevin Koga, 第13回 プラズマ科学セミナー, 京都大学学際融合教育研究推進センター 非線形・非平衡プラズマ科学研究ユニット, 2021-08-10
- 42) Science Cafe 高パワーレーザーなどについてディスカッション, James Kevin Koga, Science Cafe, QST, 2021-08-09

プロシーディング

- 43) Ultra-strong attosecond laser focus produced by a relativistic-flying parabolic mirror, Tae Moon Jeong, Sergey Bulanov, Petr Valenta, Georg Korn, Esirkepov Timur, James Kevin Koga, Alexander Pirozhkov, Proceedings of the 17th International Conference on X-Ray Lasers 2020, 11866, 118860H-1 - 118860H-8, 2021-07, DOI:10.1117/12.2592047

記事の執筆

- 44) レーザー駆動イオン加速研究の現状, 西内 満美子, 近藤 公伯, レーザー研究, 50(7), 359 - 364, 2022-07
- 45) 高フラックス偏光ガンマ線源のデルブリュック散乱による量子電磁力学の検証, コーガ ジェームズ, 早川 岳人, プラズマ・核融合学会誌, 97(12), 671 - 675, 2021-12

極短パルスレーザーと物質の相互作用シミュレーション

乙部 智仁、Arqum Hashmi, Venkat Prachi
量子ビーム科学部門 関西光科学研究所
光量子科学研究部 超高速光物性研究グループ

(1) 利用目的:

長らく、光と物質の応答は連続的光による線形応答から 2,3 次の定次非線型現象の観測と理解を中心に発展してきた。しかし近年、フェムト(10^{-15})秒領域のパルス幅で最大強度 $1 \times 10^{12} - 1 \times 10^{20} \text{W/cm}^2$ という高強度極短パルスレーザーが可能となり物質の高速かつ非線型な現象を捉え利用する事が可能となってきた一方、物質科学の分野でも特異な特性を持つ物質（例えば 2次元物質やトポロジカル物質）が発見され次世代材料としても盛んに研究されている。これら物質ではスピン軌道相互作用(SOI)が重要であり、上記新規物質を理解するのに不可欠である。

申請者の乙部は、共同研究者らと共に電子ダイナミクスの第一原理計算手法である時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) の計算対象を気体から固体に拡張し、更に Maxwell 方程式と融合することで非相対論領域での高強度極短パルスレーザーの相互作用を計算できる様にした。このプログラムは SALMON として公開され当該分野でのスタンダードになりつつある。

本研究では SALMON に SOI を導入し、第一原理計算の手法を用いて TMD 単層膜における光吸収・発光過程の緩和ダイナミクスの性質とその特徴的な時間スケールを解明することにより、光・電子デバイス材料としての特性を明らかにする。

(2) 利用内容・結果:

解析を行う為に、まず SALMON への SOI の導入を行い単層 WSe₂ の基底状態計算が正しく行われている事を確認した。図 1 に単層 WSe₂ の基底状態計算の結果を示した。バンド構造が過

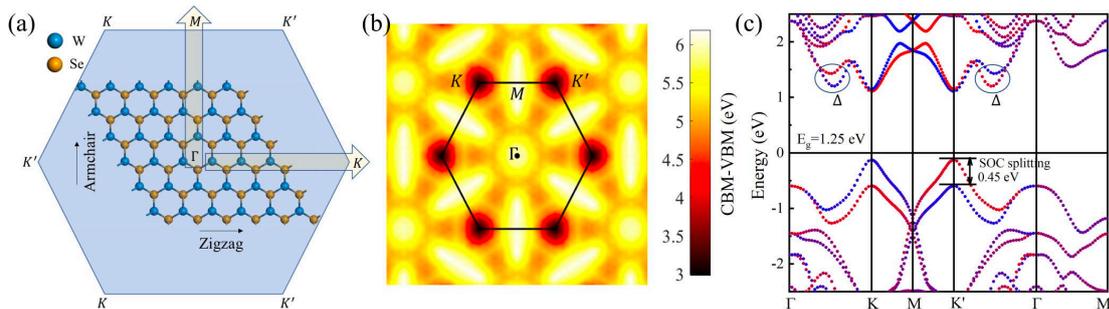


図 1 単層 WSe₂ の基底状態計算。(a)結晶構造方向とバンド構造の関係。(b)バンドギャップの 2次元カラーマップ。(c)スピン (赤がアップスピン、青がダウンスピン) を含んだバンド図。

(A. Hashmi, et al., Phys. Rev. B **105**, 115403 (2022))

去の同様の計算と一致していることが確認できる。特に図 1 (c)に示す SOI によるエネルギー分裂 0.45eV が過去の文献と一致していることは SALMON に SOI が正しく導入されている良い指標である。

次に単層 WSe₂ の特徴である擬スピンによるバレー選択励起が正しく記述できる事を確認す

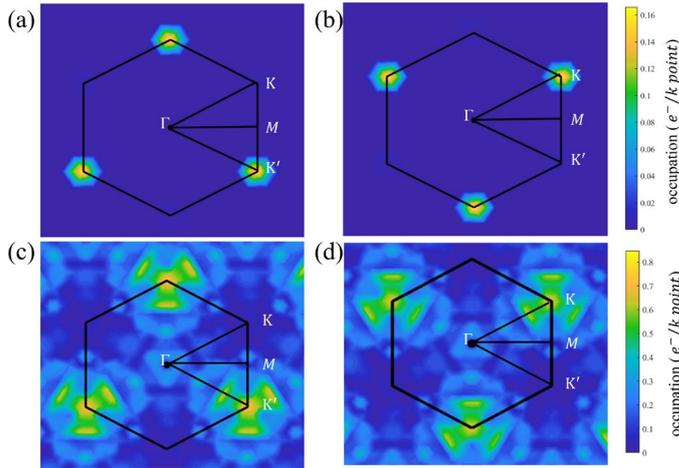


図2 左右円偏光によるキャリア密度分布。(a)(c)右円変更 (b)(d)左円偏光。(a)(b)は線形応答領域のレーザー強度 10^{10} W/cm²。(c)(d)は非線形領域 10^{12} W/cm²での励起。(A. Hashmi, et al., Appl. Phys. Lett. **120**, 051108 (2022))

SALMON が、単層 WSe₂ が持つべき特徴を線形・非線形領域で再現していることがわかった(A. Hashmi, et al., Appl. Phys. Lett. **120**, 051108 (2022))。以上の事から SOI を導入した SALMON がバレートロンクス材料として注目される単層 WSe₂ の基底状態と線形応答、更には非線形応答までを定性的かつ定量的に計算可能である事を示す事ができた。

次のステップとして、非線形応答を利用した新たなバレー選択励起の可能性を探った。先述のように単層 WSe₂ のバレー選択励起は左右円偏光のキラリティを利用するのが普通である。しかし、KK'点付近のバンド構造の非対称性(図1(c))に注目すると、トンネル励起過程の非対称性がバレー非対称性に現れる可能性が見えてくる。そこで我々は振動数 0.4eV の光電場 1 サイクル程度の直線偏光した極短パルスレーザーを想定し、パルスピークと電場の位相(キャリアエンベロープ位相=CEP)を制御することでバレー選択励起が可能か解析した。注意すべき点は、固体電子の運動はブロッホ波数 \vec{k} のベクトルポテンシャル \vec{A} による変化 $\vec{k} + e/c\vec{A}(t)$ であるため、電場ではなくベクトルポテンシャルの非対称性を利用する事にある。

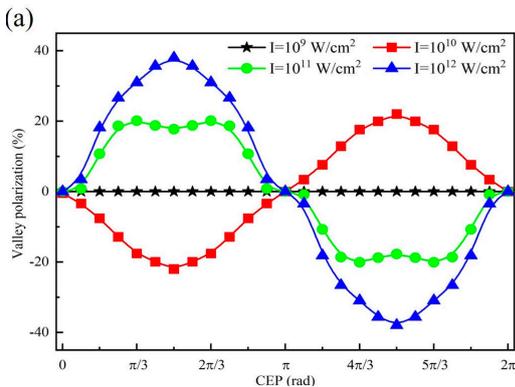


図3 単層 WSe₂ に於けるバレー分極率の CEP 依存性。(A. Hashmi, et al., Phys. Rev. B **105**, 115403 (2022))

るために、左右円偏光を照射した際のブロッホ位相空間でのキャリア密度分布を解析した。その結果を図2に示した。左右円偏光により KK'バレーに選択的励起が起きており擬スピン状態が正しく記述できている事が分かる。

SALMON の特徴として非線形応答の記述が容易である事が挙げられる。非常に強いレーザーを物質に照射すると物質の対称性を反映した高次高調波が発生する。非常に高次の電子応答まで SALMON により計算できており、WSe₂ の3回回転対称性に起因する選択則次数 = $3n \pm 1$ の再現も確認され

バレー分極率が可能か解析した。注意すべき点は、固体電子の運動はブロッホ波数 \vec{k} のベクトルポテンシャル \vec{A} による変化 $\vec{k} + e/c\vec{A}(t)$ であるため、電場ではなくベクトルポテンシャルの非対称性を利用する事にある。

図3に結果を示した。横軸は CEP、縦軸はバレー分極を示している。バレー分極率は KK' のキャリア密度 $\rho_K \rho_{K'}$ の差の比 $P = 2 \frac{\rho_K - \rho_{K'}}{\rho_K + \rho_{K'}}$ で示している。明らかに直線偏光したレーザーの CEP によりバレー選択励起が起きていることが分かる。非線形効果を利用

しているため、弱いレーザー（強度 10^9 W/cm²）では分極が起きておらずレーザー強度と共にバレー分極率が上昇している。興味深い結果として、強度 10^{10} W/cm² から強度 10^{11} W/cm² でバレー分極が反転している。2バンドモデルによる解析から Landau-Zener-Stückelberg 干渉による電子波束の強め合いが原因であることが分かった。

以上の結果から、SALMON への SOI 導入により単層 WSe₂ の基底状態、線形及び非線形応答が記述できることを確認し、更に SALMON の特徴である光-電子融合計算により直線偏光による単層 WSe₂ バレー選択励起の可能性を数値計算から示す事に成功した。

(3) 今後の利用予定:

R3 年度までの開発により SOI が重要な物質の記述が可能となった。SOI が強い物質ではバレー曲率の構造が大きな意味を持つ。単層 WSe₂ の擬スピンもバレー曲率の KK' での反転に起因している。同様に、トポロジカル物質の表面状態もバレー曲率の構造によるものであるため、その非線形光学応答も SALMON を利用することで解析できる。

今後はスピン・バレートロンクスだけでなくトポロジカル物質の表面状態（ディラックフェルミオンやワイルフェルミオン）の非線形応答を局所的スピン流密度の解析や膜厚依存性などから解析し、最終的にはトポロジカル物質の表面状態のレーザー制御手法開発に繋げていきたい。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Ultrafast control of the valley and spin polarization in Transition-metal dichalcogenides, Arqum Hashmi, Shunsuke Yamada, Atsushi Yamada, Yabana Kazuhiro, Otake Tomohito, 69th JSAP Spring Meeting 2022, Japanese society of applied physics, 2022-03-25 (Oral)
- 2) Study of ultrafast lattice dynamics in silicon using Three-Temperature model, Prachi Venkat, Otake Tomohito, The 69th JSAP Spring meeting 2022, The Japan Society of Applied Physics, 2022-03-22 (Oral)
- 3) 楢岡偏光レーザーによる半導体・絶縁体の電子励起確率の理論的研究, 乙部 智仁, Venkat Prachi, 第 69 回応用物理学会春季学術講演会, 応用物理学会, 2022-03-24 (Oral)
- 4) Vlasov Simulation of Electron Dynamics in Solids Under Intense Laser Fields, 谷 水城, Otake Tomohito, 篠原 康, 石川 顕一, CLEO EUROPE 2021, European Physical Society, 2021-06-25 (Oral)
- 5) Semi-Classical Description of Electron Dynamics in Solids Driven by Intense Laser Fields, 谷 水城, Otake Tomohito, 篠原 康, 石川 顕一, CLEO, OSA, 2021-05-10 (Oral)

- 6) Optical response and valley pseudospin of WSe₂ monolayer: 2D Maxwell scheme, Arqum Hashmi, Shunsuke Yamada, Atsushi Yamada, Yabana Kazuhiro, Otobe Tomohito, ViCPEAC-2021, ICPEAC Committees, 2021-07-20 (Poster)
- 7) Theoretical study of electron excitation rates in Diamond and their dependence on laser field polarization, Prachi Venkat, Otobe Tomohito, OPTO2021, QST, University of Osaka, 2021-06-21 (Poster)
- 8) Effect of incident pulse duration on generation of attosecond pulses during relativistic laser-cluster interaction, Prachi Venkat, Otobe Tomohito, Amol R. Holkundkar, ICPEAC, ICPEAC Committees, 2021-04-09 (Poster)

招待発表

- 9) 半導体のレーザー加工シミュレーション, 乙部 智仁, 第 42 回レーザー学会学術講演会, レーザー学会, 2022-01-14
- 10) 電子・電磁場解析プログラム SALMON によるレーザーと誘電体の非線形相互作用解析, 乙部 智仁, 第 95 回レーザー加工学会講演会, レーザ加工学会, 2021-08-30

学術論文

- 11) Three-temperature modeling of laser-induced damage process in silicon, Prachi Venkat, Otobe Tomohito, Applied Physics Express, 15, 041008-1 - 041008-5, 2022-03, DOI:10.35848/1882-0786/ac5edb
- 12) Electron excitation rate in dielectrics under an intense elliptically polarized laser field, Prachi Venkat, Otobe Tomohito, Journal of the Physical Society of Japan, 91(4), 044401, 2022-03, DOI:10.7566/JPSJ.91.044401
- 13) Non-linear dynamics of electromagnetic field and valley polarization in WSe₂ monolayer, Arqum Hashmi, Shunsuke Yamada, Atsushi Yamada, Yabana Kazuhiro, Otobe Tomohito, Applied Physics Letters, 120(5), 051108, 2022-02, DOI:10.1063/5.0077235
- 14) Valley polarization control in WSe₂ monolayer by a single-cycle laser pulse, Arqum Hashmi, Shunsuke Yamada, Atsushi Yamada, Yabana Kazuhiro, Otobe Tomohito, Physical Review B, 105(11), 115403, 2022-03, DOI:10.1103/PhysRevB.105.115403

- 15) Semi-classical description of electron dynamics in extended systems under intense laser fields, 谷 水城, Otobe Tomohito, 篠原 康, 石川 颯一, Physical Review B, 104, 075157, 2021-08, DOI:10.1103/PhysRevB.104.075157

記事の執筆

- 16) Channel-resolved angular correlation between photoelectron emission and fragment ion recoil of ethanol in intense laser fields, Ryuji Itakura, Hiroshi Akagi, Tomohito Otobe, Progress in Ultrafast Intense Laser Science XVI. Topics in Applied Physics, 141, 65 - 81, 2021-07

外部資金獲得

- 17) Q-LEAP フラッグシッププログラム 先端レーザーイノベーション拠点「光量子科学によるものづくり CPS 化拠点」, 乙部 智仁, 錦野 将元, 石野 雅彦, 長谷川 登, タンブン ゲン
- 18) 2021 年度 Q-LEAP フラッグシッププログラム 先端レーザーイノベーション拠点「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」部門, 板倉 隆二, 石井 順久, 永島 圭介, 坪内 雅明, 圓山 桃子, 遠藤 友随, 今坂 光太郎, 乙部 智仁
- 19) JST CREST 新たな光機能や光物性の発現・利活用を基軸とする次世代フォトニクスの基本技術「光・電子融合第一原理計算ソフトウェアの開発と応用」矢花 一浩, 乙部 智仁

2.5J レーザーパルスと CH₂ 薄膜によるイオン加速シミュレーション

守田 利昌

量子ビーム科学部門 関西光科学研究所

光量子科学研究部 高強度レーザー科学研究グループ

(1) 利用目的:

レーザーイオン加速の研究には、J-KAREN のように非常に高性能なレーザーを用い、多くの応用例に十分利用可能となる高エネルギー（～200 MeV/u）なイオン生成の研究がある一方、低価格で容易に入手可能な小規模レーザーシステムを用いた、比較的到低エネルギー（～10 MeV/u）なイオン生成の研究も重要である。後者の研究の目的は、現在レーザー加速で十分に生成が可能な、比較的到低エネルギー（10 MeV/u 程度以下）なイオンビームの実応用への利用を推進することである。そのためには、レーザー加速で生成されるイオンビームの特性を明らかにすることが重要である。本研究ではこの目的のため、比較的到低エネルギーのレーザー（2.5 J）で、著しく高性能ではない（スポット径=5.0 μm、パルス幅=50 fs (FWHM)) レーザーを用いた場合の生成イオンビームの特性を、3次元 PIC シミュレーションにより調査した結果を示す。

(2) 利用内容・結果:

ターゲットにポリエチレン(-CH₂-), H₂O 等の水素を多く含む物質を用いることで、効果的に高エネルギー陽子（水素イオン）が得られることを昨年度までの研究で示した。また薄膜は、特殊な形状のターゲットに比べ、作成や取り扱いが比較的に容易である。そこで、本研究では、ターゲットに CH₂ 薄膜を用いた。レーザーには、低価格なレーザーシステムの性能（エネルギー=2.5 J、スポット径=5.0 μm、パルス幅=50 fs）を用い、垂直入射とした。ターゲット厚は、実現可能な極力薄い厚として 0.1 μm とした。計算における空間分割は 5300×3456×3456 であり、用いた粒子数は 3×10¹⁰ 個である。

計算結果を図 1 に示す。レーザー、粒子分布共に、断面を表示するため $z>0$ の領域を切り取った状態が表示されている。CH₂ であるため、加速陽子と加速炭素イオンが得られる。陽子はそのエネルギーで色分けされており、赤い部分は高エネルギーであることを示している。最大の陽子エネルギー=17 MeV、最大の炭素イオンエネルギー=5 MeV/u である。図 2 は z 軸上から見た 2D 図であり、 $z=0$ の断面を示している。陽子は炭素イオンに比べ軽い ($m_p/q_p < m_c/q_c$) ため、より強く加速され、イオンの空間分布は陽子と炭素イオンの 2 層に分かれる。図 1,2 $t=267$ fs に示されるように、陽子はイオンクラウドの外側に分布し、それに包みこまれるように内側に炭素イオンが分布している。最大エネルギーの陽子は+x 側の先端部に分布しており、そこから内部(-x 側)へ行くほどに陽子エネルギーは低下する。中心付近から-x 側へ行くに従い再び生成陽子のエネルギーは増加し、-x 側の先端部にも比較的高エネルギーな陽子が生成されている。これらの陽子は-x 方向へ進行している。図 3 は+x 方向へ加速されたイオンのエネルギースペクトル図である。+x 方向へ加速されたイオンとしているのは、生成イオンは一般に後段に設置された装置で受けて利用されるからである。陽子は炭素イオンよりも高エネルギーであり、かつ多くの個数が生成され

ている。炭素イオンも 4 MeV/u 程度以下のイオンを利用するのであれば、実応用に利用することが可能となる十分な個数のイオンが生成されている。

本研究により、加速過程における現象を詳細に示し理解を深め、生成イオンビームの特性を明らかにした。エネルギースペクトル図に示されるように、最大エネルギー付近ではなく、より低いエネルギーのイオンを利用することで、多くの個数のイオンが得られる。

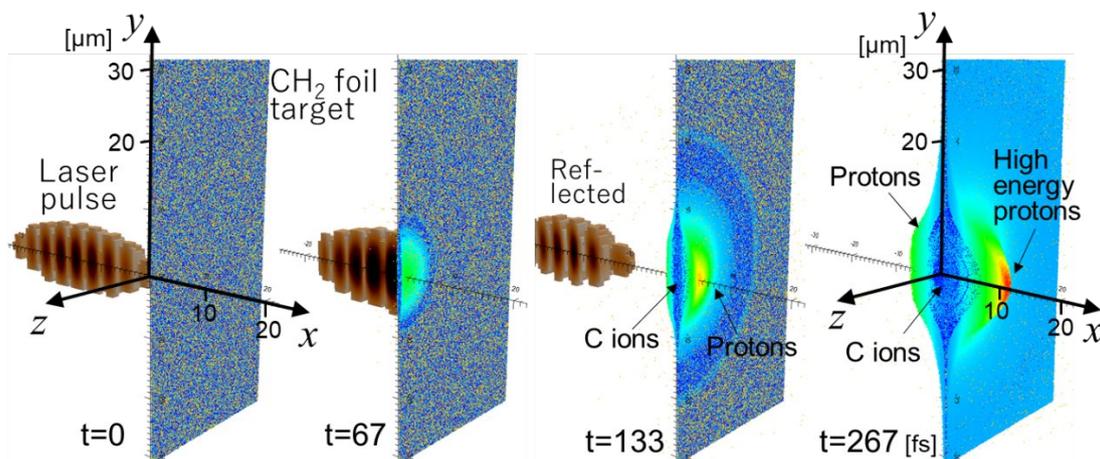


図1 各時刻におけるイオンの空間分布とレーザーパルス (3D 表示)

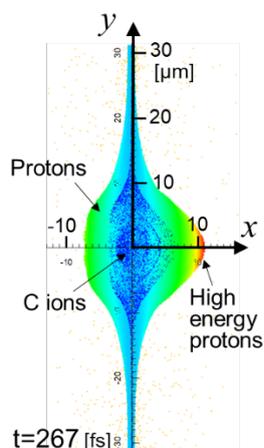


図2 イオンの空間分布 (2D 表示)

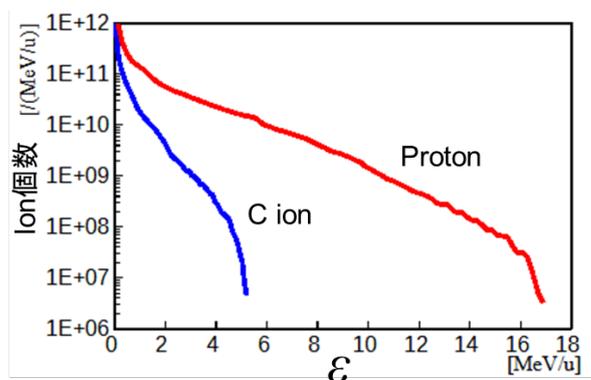


図3 エネルギースペクトル図

(3) 今後の利用予定:

これまでの成果を生かし、イオンビーム生成条件とビーム特性評価の研究を進める。PIC シミュレーションにおいて、現象をより正確に解明し生成イオンビームの特性を正確に評価するには、3次元計算が必要となる。3次元計算では空間領域と用いる粒子数が著しく多くなるため、必要とする計算機資源は増大し、高い計算能力を有する大型計算機が必要となる。また、本報告で示したようなターゲットが激しいクーロン爆発を起こす場合には、大きな空間領域の定義が必要となり、高い計算能力を有する計算機が必要である。また、多くの計算時間も必要となる。よって、今後も大型計算機を用いて大規模計算を実施して行く予定である。

第一原理分子動力学法に基づいた材料解析手法の開発

池田 隆司

量子ビーム科学部門 関西光科学研究所

放射光科学研究センター 量子シミュレーション研究グループ

(1) 利用目的:

実験データに頼らない第一原理シミュレーション手法は、高機能材料等の研究開発に計算科学からアプローチするために不可欠な基盤技術である。当課題では、新機能材料・物質の創製等に資するため、高精度密度汎関数電子状態計算法に基づいた第一原理分子動力学法と量子シミュレーション手法を融合し、シミュレーション技術の更なる高度化を図る。開発した手法を駆使して量子物性研究の観点から物質科学のフロンティアを開拓するとともに、新規材料の機能発現機構等の解明を目指す。

(2) 利用内容・結果:

令和 2 年度に引き続き、第一原理リングポリマー分子動力学 (FP-RPMD) コードの高度化を行い、水素貯蔵材料の有力候補と考えられている水素クラスレートハイドレートに適用することにより高度化したコードの性能評価を行った。令和 2 年度に実施した検討により原子核の量子性の影響が大きく異なる振動モードを精度良く同時に取り扱うことができないことが現状の FP-RPMD シミュレーションの技術上の課題として明らかになっている。令和 3 年度は、FP-RPMD における原子核の量子性の記述に由来する resonance 問題を解消するために導入した GLE thermostat の適用方法に改良を加えることによって上記課題の克服に取り組んだ。図 1 に改良前

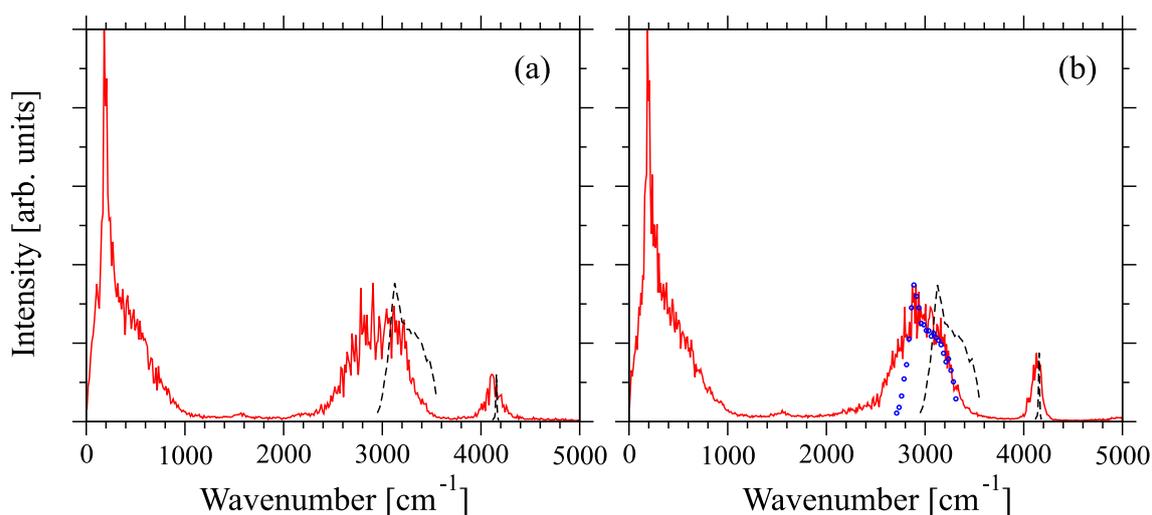


図 1 (a)改良前と(b)改良後の FP-RPMD により求めたトラジェクトリに DFPT を適用して求めた水素クラスレートハイドレート C_6 相のラマン散乱スペクトル。OH 伸縮と HH 伸縮領域の実験結果を破線で示した。(b)中の青丸は OH 伸縮領域の実験結果を -238 cm^{-1} 平行移動させたスペクトルである。

と改良後の FP-RPMD シミュレーションによって生成したトラジェクトリに対して密度汎関数摂動論 (DFPT) を適用して求めた水素クラスレート水ドレート C_0 相 (0.5 GPa, 280 K) におけるラマン散乱スペクトルの計算結果と Strobel ら [T. A. Strobel *et al.*, J. Am. Chem. Soc. **138**, 13786 (2016)] による実験結果との比較を示す。GLE thermostat の適用方法の変更によって、 3000 cm^{-1} 付近に存在する水分子の OH 伸縮に帰属されるラマンバンドの形状が実験結果と良く一致するようになることがわかる。また、水素分子の HH 伸縮に帰属される 4200 cm^{-1} 付近のピークもより鋭くなり実験結果との一致が改善されている。図 2 に原子核の量子性を無視し密度汎関数理論 (DFT) における一般化密度勾配近似 (GGA) の 1 つである revPBE (図 1 の計算結果でも使用) とそれに対応する hybrid 汎関数である revPBE0 を用いて求めたラマンスペクトルの比較を示す。交換汎関数に含まれる自己相互作用を取り除くことにより OH 伸縮振動数がおよそ 180 cm^{-1} 高くなることがわかる。この結果は、GGA を用いて求めた OH 伸縮によるラマンバンドの振動数が過小評価される原因は主に DFT の交換汎関数に含まれるエラーによることを示している。令和 3 年度の検討により、FP-RPMD に

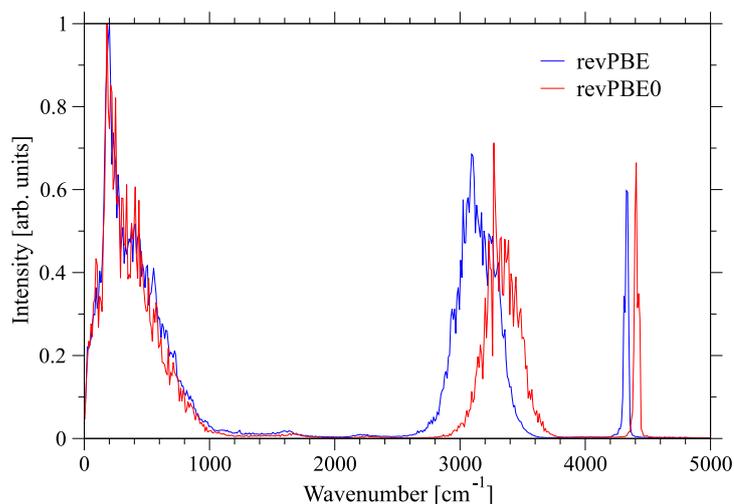


図 2 原子核の量子性を無視し revPBE と revPBE0 を用いて求めた水素クラスレート水ドレート C_0 相のラマン散乱スペクトルの比較。

によって核量子効果を考慮して、実験スペクトルと直接比較可能なラマン散乱スペクトルが格子定数等の実験データを参照することなく計算することが可能となった。

(3) 今後の利用予定:

FP-RPMD コードの高速化等、第一原理経路積分分子動力学法に基づいた材料解析手法の開発を継続する。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) 第一原理分子動力学に基づいた水素クラスレート水ドレートの分子振動スペクトルシミュレーション, 池田 隆司, 日本物理学会 2021 年秋季大会, オンライン, 2021.9 (Poster)
- 2) 第一原理分子動力学に基づいた水素クラスレート水ドレートの分子振動スペクトルシミュレーション II, 池田 隆司, 日本物理学会 第 77 回年次大会 (2022 年), オンライン, 2022.3 (Poster)

學術論文

- 3) Simulating Raman spectra of hydrogen hydrates using first-principles path-integral ring-polymer molecular dynamics, T. Ikeda, Chemical Physics Letters, vol.792, 139416, 2022.1

量子エネルギー部門

ジャイロ運動論コードを用いた実験解析に基づく乱流輸送モデリング

成田 絵美

量子エネルギー部門 那珂研究所

先進プラズマ研究部 先進プラズマモデリンググループ

(1) 利用目的:

核融合出力は密度と温度によって決定づけられる。トカマクプラズマでの輸送は乱流によって支配されるため、乱流粒子束・熱流束を算出し、密度と温度の分布予測に用いられる乱流輸送モデルが核融合出力の予測精度向上の鍵となる。乱流輸送モデルを統合型輸送コードに組み込むことで、乱流輸送以外の物理モデルと無矛盾に密度や温度を予測することが可能になる。従来は、ジャイロ運動論やジャイロ流体に基づく乱流輸送モデルが実験を良く再現するとして広く用いられてきたが、計算コストが高いために、統合型輸送コードを用いたシミュレーションの計算速度の低下の一因となり、多くの試行回数を要する運転シナリオの開発などへの適用は難しかった。そこで、機械学習モデルの一種であるニューラルネットワーク(NN)モデルを利用し、従来用いられてきた乱流輸送モデルを高速に模擬するモデルの開発が国内外で進められている。開発された機械学習乱流輸送モデルは、実験解析や運転シナリオ開発などに対する実用に近いレベルに達している。

申請者は NN モデルを利用した乱流輸送モデル DeKANIS の開発を進めてきた。他の NN 乱流輸送モデルは TGLF や QuaLiKiz という既存の輸送モデルを模擬する代理 NN モデルを構築しているが、DeKANIS の NN モデルは、ジャイロ運動論コードによる計算結果と実験データの両方に基づいている。ジャイロ運動論コードによる輸送レベルの推定には、並列計算で 1,2 週間ほど掛かる非線形計算が必要であるため、その結果を用いて多数のデータ点で構成される学習用データを構築することは現実的ではない。そこで、本研究課題では、輸送レベルの推定に JT-60U の実験データを用い、複数ある乱流輸送の駆動源ごとの寄与の大きさの決定に比較的計算時間が短いジャイロ運動論コードの線形計算を用いることによって、計算時間を削減しつつ、他の輸送モデルでは困難な輸送の駆動源の区別を実現している。

今年度は汎用性を高めるため、輸送レベルを推定する飽和モデルの改良と NN モデルの訓練に用いるデータの拡張を行なった。

(2) 利用内容・結果:

DeKANIS は、電子の乱流粒子・熱流束を次のように表現する: $\bar{\Gamma}_e = \bar{D}(R/L_{n_e} + C_T R/L_{T_e} + C_P)$, $\bar{Q}_e = \bar{\chi}_e(R/L_{T_e} + C_N R/L_{n_e} + C_{HP})$ 。ここでは、準線形理論を仮定しており、 \bar{D} と $\bar{\chi}$ は規格化された粒子・熱拡散係数、 R/L_{n_e} と R/L_{T_e} は規格化された密度と温度の勾配値である。乱流粒子・熱流束は対角項(拡散)と非対角項(非拡散)から構成されており、 $C_{T,P,N,HP}$ は非拡散過程による流束の向きと大きさを表す係数である。これら非対角項の係数($C_{T,P,N,HP}$)と粒子・熱拡散係数(\bar{D} と $\bar{\chi}_e$)を求めることで、対角・非対角項をそれぞれ予測することができる。ただし、 $\bar{\Gamma}_e$ と \bar{Q}_e は Onsager 対称性を満たすため、 $\bar{\chi}_e = \bar{D}(C_T + 1.5)/C_N$ が成り立つ。電子の粒子・熱流束に加え、イオンの熱流束

を次のように表現する： $\bar{Q}_i = (\bar{\chi}_{i,\text{eff}}/\bar{\chi}_{e,\text{eff}})\bar{\chi}_{e,\text{eff}}R/L_{T_i}$ 。ここで、 $\bar{\chi}_{\text{eff}}$ は熱流束を対角項のみで表したときの熱拡散係数であり、 $\bar{\chi}_{i,\text{eff}}/\bar{\chi}_{e,\text{eff}}$ を求めることで、 \bar{Q}_e に基づいて \bar{Q}_i が算出される。

NNモデルはSGI8600で実行されたジャイロ運動論コードGKWの線形計算によって評価された $C_{T,P,N,HP}$ 、 $\bar{\chi}_{i,\text{eff}}/\bar{\chi}_{e,\text{eff}}$ 、 \bar{k}_θ 、 $\bar{\gamma}$ を再現するよう訓練されている。ここで \bar{k}_θ はイオン温度勾配/捕捉電子モードが支配的な低波数領域において最大の線形成長率を持つ規格化波数であり、 $\bar{\gamma}$ はその規格化線形成長率である。NNモデルから予測された \bar{k}_θ と $\bar{\gamma}$ を比例則に代入して \bar{D} を求める。これまでは次の比例則を用いていた： $\bar{D}_{\text{model,pre}} \propto (\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2)^\alpha \bar{L}_{\text{ZF}}^{-\beta}$ [E. Narita, et al., Plasma Phys. Control. Fusion 60 (2018) 025027]。ここで、 $\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2$ は準線形拡散係数、 \bar{L}_{ZF} は残留帯状流の大きさであり、帯状流の寄与は乱流の大きさに比例すると仮定し、 $\bar{L}_{\text{ZF}} \equiv K_{\text{RH}}(\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2)^{0.5}$ で定義する。 K_{RH} は無衝突仮定で導出された帯状流の応答関数である。指数部の α と β はJT-60Uにおける粒子束の実験値に合うように最適化している。粒子束の実験値は、中性粒子ビームによる粒子供給量が、乱流及び新古典粒子輸送量とバランスすることを仮定して評価したものである。ここでは壁からのリサイクリングによる粒子供給を考慮していないため、規格化小半径 ρ が0.7あたりより小さい位置のみにしか適用できないモデルとなっていた。そこで、まず比例則の最適化に用いる実験値を電子熱流束に変更した。この実験値は、中性粒子ビーム及びジュール加熱による熱供給量、電子・イオン間衝突による熱緩和量、放射損失量、乱流及び新古典熱輸送量がバランスすることを仮定して評価されている。比例則の最適化は遺伝的アルゴリズムを用いた回帰により行った。図1(a)に示すように、回帰に用いたデータに対してもばらつきが大きく、比例則のテストのために用いたJETのデータを過小評価している。ここで、JETのデータはITPA International Multi-Tokamak Profile Databaseに登録された放電のうち中性粒子ビームによって加熱されている16の放電から取得した。さらに、回帰によって得られた指数部は $\alpha = 1.20$ と $\beta = 2.47$ となっており、正味の $\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2$ の指数部は $\alpha - 0.5\beta = -0.035$ とほぼ零であるため、混合長理論に沿わないモデルとなっている。なお、これらの問題は粒子束の実験値に対して回帰を行った場合でも生じていた。これらの問題を解決するため、次に比例束の関数形を変更した： $\bar{D}_{\text{model,new}} \propto (\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2)^\alpha (\bar{\tau}_r(\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2)^{0.5} + 1)^{-\beta}$ 。帯状流を表現する部分に変更されており、帯状流による乱流抑制効果の衝突依存性[F.L.

Hinton and M.N. Rosenbluth, Plasma Phys. Control. Fusion 41 (1999) A653]を考慮するよう、 K_{RH} に代わって $\bar{\tau}_r =$

$(v_f^2/\omega_f^2 + K_{\text{RH}}^2 \omega_f^2/v_d^2)^{0.5}$ を用いている。ここで、 ω_f はイオン熱速度を大半径で割ったものであり、 v_f は ω_f と $\exp(-q^2)$ の積(q は安全係数)、 v_d は $v_d \equiv 0.67/(\tau_{ii}\epsilon)$ で定義される(τ_{ii} はイオン間衝突時間、 ϵ は局所逆アスペクト比)。衝突周波数が低く

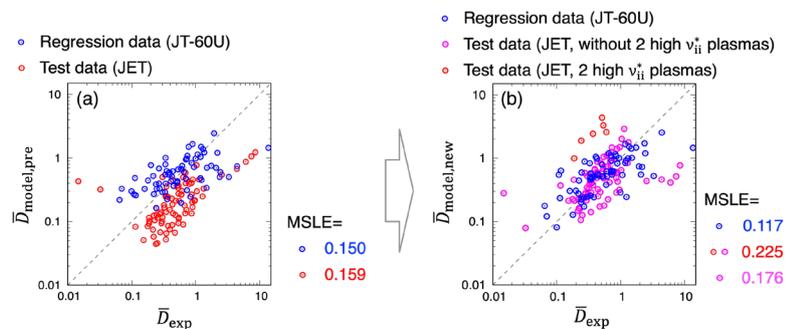


図 1: 規格化粒子拡散係数 \bar{D} の半経験的に求めた値と(a)以前及び(b)新しいモデルによる予測値の比較。

なるほど、帯状流の効果は大きく、乱流流束を小さく予測するモデルである。比例則の右辺における二つ目の括弧内で 1 が加算されているのは、衝突周波数が大きくなった場合に流束が急増することを避けるためである。回帰に用いたデータでは、当該括弧内の第一項である $\bar{v}_r(\bar{\nu}/k_\theta^2)^{0.5}$ が 1 よりも一桁大きいため、括弧内は概ね第一項のみで決まる。回帰によって得られた指数部は $\alpha = 0.763$ と $\beta = 1.033$ であり、正味の $\bar{\nu}/k_\theta^2$ の指数部は概ね 0.247 となり、正の値が得られた。また、図 1(b) に示すように、回帰に用いたデータに対する平均二乗対数誤差は減少している。テストデータに対する誤差は上昇しているものの、過小評価の傾向は解消できている。以上のように、以前の比例則で生じていた問題点は解決できた。新しい比例則によって過大評価しすぎたテストデータは、回帰に用いた JT-60U のデータがほとんどカバーできていない高い衝突周波数 ($\nu_{ii}^* > 0.1$) のプラズマに対応するものであった。仮に高い衝突周波数のデータ点を除けば、新しい比例則に変更することによる誤差の増加はある程度抑えられる (図 1(b))。

NN モデルの訓練に用いるデータは、これまで JT-60U の 23 の H モードプラズマの実験データが及ぶ範囲で構成されていた。図 2 に例として温度比 T_e/T_i と磁気シア s の値を示す。 $T_e/T_i < 1$ と $s < 1$ にデータが集中しており、範囲外の領域では NN モデルはジャイロ運動論コードから得られる計算結果の再現が難しいと考えられる。そこで、先述の JET の 16 放電の実験データから得た変数でジャイロ運動論コードの計算を実施し、訓練データがカバーする領域を拡張した。図 2 に示すように、用いた JET のデータは $T_e/T_i > 1$ と $s > 1$ に値が及んでいる。拡張のため、GKW の線形計算を SGI8600 で実施し、訓練データを 7,039 点から 11,172 点まで増加させた。拡張後の訓練データを用いて新しく NN を構築した。図 2 に示すように、以前の NN モデルは $T_e/T_i > 1$ や $s > 1$ の場合、GKW が評価する非拡散項の係数 C_T をあまり良く再現できていなかったが、新しい NN モデルは GKW の評価結果に近い値が予測できるようになった。他の出力変数も同様である。

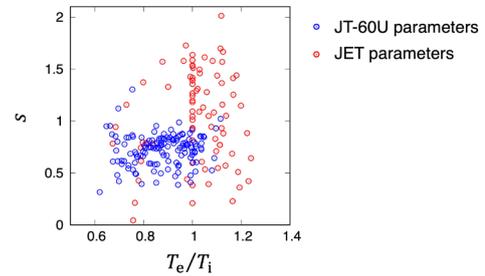


図 2: JT-60U と JET の実験データセットにおける温度比 T_e/T_i と磁気シア s の値の比較。

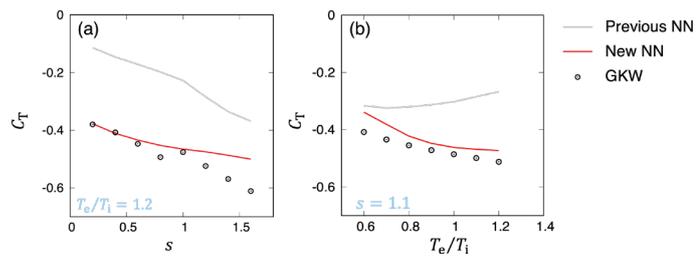


図 2: (a) 温度比 T_e/T_i と (b) JT-60U 磁気シア s に対する非拡散項の係数 C_T の依存の NN モデル及び GKW による

(3) 今後の利用予定:

これまでは半径方向位置が $\rho = 0.65$ 以内を対象に GKW の線形計算を実施してきたが、飽和モデルの比例則に用いる実験値を電子熱流束に変更し、より外側の領域についても対象を広げることが可能になったため、 $\rho > 0.65$ に対する GKW の線形計算を行い、さらに訓練データを拡張する。また、これまでは重水素プラズマの計算を行ってきたが、軽水素の計算も実施し、訓練データに取り入れることで、同位体効果を再現できるモデルへと DeKANIS を改良する。さらに、新しいモデルを用いて、JT-60SA や ITER における温度や密度の分布予測を行う。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) 機械学習を利用した半経験的乱流輸送モデルの汎用性改善に向けた拡張, 成田 絵美, 本多 充, 仲田 資季, 林 伸彦, 第 77 回日本物理学会年次大会, 日本物理学会, 2022-03-16 (Oral)
- 2) Improvements in efficiency of gyrokinetic simulation runs with convolutional neural network models analyzing nonlinear saturation processes, Narita Emi, Honda Mitsuru, Maeyama Shinya, Watanabe Tomo-Hiko, Fourth IAEA Technical Meeting on Fusion Data Processing, Validation and Analysis, IAEA, 2021-11-30 (Oral)
- 3) Temporal evolution of momentum transport in JT-60U H-mode plasma, Ohtani Yoshiaki, Yoshida Maiko, Honda Mitsuru, Narita Emi, Asia-Pacific Transport Working Group Meeting US-EU Transport Task Force Workshop, 2021, Kyushu Univ., 2021-07-06 (Oral)
- 4) Development of the framework to cope with advanced transport models using parallel computing and deep learning techniques, Honda Mitsuru, Narita Emi, Asia-Pacific Transport Working Group Meeting, 九州大学, 2021-07-08 (Oral)
- 5) Neural-network-based turbulent transport modeling with development of saturation rules based on gyrokinetic analysis of JT-60U plasmas, Narita Emi, Honda Mitsuru, Nakata Motoki, Yoshida Maiko, Hayashi Nobuhiko, Asia-Pacific Transport Working Group Meeting, 九州大学, 2021-07-08 (Oral)
- 6) ニューラルネットワーク輸送モデルによる統合輸送シミュレーション, 成田 絵美, 本多 充, 仲田 資季, 吉田 麻衣子, 林 伸彦, 第 10 回 IFERC-CSC 研究会, IFERC-CSC, 2021-04-05 (Oral)
- 7) 乱流輸送シミュレーションの高効率な実行に向けた波数空間画像解析モデルの開発, 成田 絵美, 本多 充, 前山 伸也, 渡邊 智彦, スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会, シンポジウム「富岳百景」事務局, 2022-03-14 (Poster)
- 8) Development of semi-empirical particle and heat transport model and improvement in its turbulent saturation rule, 成田 絵美, 本多 充, 仲田 資季, 吉田 麻衣子, 林 伸彦, 第 19 回核燃焼プラズマ統合コード研究会, 九州大学, 2022-01-07 (Poster)

- 9) Quasilinear Turbulent Particle and Heat Transport Modeling with Development of Unique Saturation Rules for Insights into Profile Formation Mechanisms, Narita Emi, Honda Mitsuru, Nakata Motoki, Yoshida Maiko, Hayashi Nobuhiko, 28th IAEA Fusion Energy Conference (FEC 2020), IAEA, 2021-05-14 (Poster)
- 10) Development of a novel integrated model GOTRESS+ for predictions and assessment of JT-60SA operation scenarios including the pedestal, Honda Mitsuru, Aiba Nobuyuki, Seto Haruki, Narita Emi, Hayashi Nobuhiko, IAEA 核融合エネルギー会議 2020, IAEA, 2021-05-11 (Poster)

招待発表

- 11) QSTにおけるデータ科学への取り組み - 機械学習による輸送モデリング -, 成田 絵美, 第2回プラズマインフォマティクス研究会, 核融合科学研究所, 2022-02-25
- 12) 機械学習による核融合プラズマの輸送モデリング, 成田 絵美, 本多 充, プラズマ・核融合学会 第38回年会, プラズマ・核融合学会, 2021-11-24
- 13) A deep-learning approach to analyze wavenumber-space images of gyrokinetic simulations for faster calculations, Honda Mitsuru, Narita Emi, Maeyama Shinya, Watanabe Tomohiko, 5th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics, AAPPS-DPP, 2021-09-28
- 14) Machine-learning-based modeling for acquiring insights into turbulent transport in fusion plasmas, Narita Emi, Honda Mitsuru, 3rd International Conference on Data Driven Plasma Science, 大阪大学, 2021-04-02

学術論文

- 15) Quasilinear turbulent particle and heat transport modelling with a neural-network-based approach founded on gyrokinetic calculations and experimental data, Narita Emi, Honda Mitsuru, M. Nakata, Yoshida Maiko, Hayashi Nobuhiko, Nuclear Fusion, 61(11), 116041, 2021-12, DOI:10.1088/1741-4326/ac25be
- 16) Development of a novel integrated model GOTRESS+ for predictions and assessment of JT-60SA operation scenarios including the pedestal, M. Honda, Aiba Nobuyuki, Seto Haruki, Narita Emi, Hayashi Nobuhiko, Nuclear Fusion, 61, 116029, 2021-10, DOI:10.1088/1741-4326/ac2639

- 17) Application of transient transport analysis method for modulation experiment, Ohtani Yoshiaki, Yoshida Maiko, Honda Mitsuru, Narita Emi, AIP Advances, 11(8), 085306, 2021-08, DOI:10.1063/5.0056982
- 18) Review of hydrogen isotope effects on H-mode confinement in JT-60U, Urano Hajime, Narita Emi, Plasma Physics and Controlled Fusion, 63(8), 084003, 2021-07, DOI:10.1088/1361-6587/ac048c
- 19) Prediction of a single Gaussian shape of spectral line measured with low-dispersion spectrometer by using machine learning, Kin Fumiyoshi, Nakano Tomohide, Oyama Naoyuki, Terakado Akihiro, Wakatsuki Takuma, Narita Emi, Review of Scientific Instruments, 92(5), 053505, 2021-05, DOI:10.1063/5.0039781

プロシーディング

- 20) Development of a semi-empirical particle and heat transport model and improvement in its turbulent saturation rule, Narita Emi, Honda Mitsuru, Nakata Motoki, Yoshida Maiko, Hayashi Nobuhiko, 第19回核燃焼プラズマ統合コード研究会, 2022-02

記事の執筆

- 21) AIで高速・高精度化, 成田 絵美, 日刊工業新聞, 2021-10
- 22) 第23回「若手科学者によるプラズマ研究会」会議報告, 成田 絵美, 隅田 脩平, 宇藤 裕康, プラズマ・核融合学会誌, 97(6), 373 - 374, 2021-06

専門委員

- 23) 国際トカマク物理活動 輸送閉じ込めトピカルグループ 日本委員, 成田 絵美, ITER 機構, 2021-04-01 ~ 2022-03-31

関連学会役員・幹事

- 24) 核融合エネルギーフォーラムプラズマ物理クラスター閉じ込め・輸送サブクラスター世話人, 成田 絵美, 核融合エネルギーフォーラム, 2020-10-09 ~ 2022-03-31

外部資金獲得

- 25) 科学研究費助成事業 (学術研究助成基金助成金) 若手研究 第一原理乱流計算と機械学習モデリングによる核融合プラズマの分布形成過程の研究, 成田 絵美

ダイバータプラズマ中の不純物輸送制御に関する研究

矢本 昌平

量子エネルギー部門 那珂研究所

先進プラズマ研究部 先進プラズマモデリンググループ

(1) 利用目的:

JT-60SA や ITER、原型炉においては、不純物入射によりダイバータへの熱負荷を低く保ちつつ、高性能炉心プラズマを維持する必要がある、周辺プラズマでの不純物の輸送制御手法の確立は必須の課題である。本プロジェクトでは、QSTにて開発中の統合ダイバータコード SONIC を用いて、単一種だけでなく複数種の不純物入射を考え、(i)JT-60SA 及び ITER プラズマ予測計算、(ii) 核融合反応により発生する He 灰も含めた原型炉プラズマ予測計算を行う。(i)(ii)を通じてシミュレーションコードの物理モデルの妥当性検討、及びプラズマ-不純物間の複雑な相互作用とその特性を明らかにし、JT-60SA、ITER、原型炉の運転に向けた不純物輸送制御手法を確立することを目的とする。

(2) 利用内容・結果:

2021 年度は、JT-60SA の高 B 定常運転シナリオ及び ITER ライク運転シナリオのプラズマ予測計算を実施し、各運転シナリオにおいてセパトトリクス電子密度及びダイバータ熱負荷の目標値を満たす燃料ガス及び不純物入射量等の運転条件を求めることができた。また、より正確な運転予測のために、図 1 に示すような炉心プラズマ及び周辺プラズマを自己無撞着に解くことができる TOPICS-SONIC 統合コードの近代化を実施し、その開発サポートに SGI8600 の計算資源を利用した。その結果、最新版 SONIC と TOPICS を MPMD を利用して結合することに成功し、さらにテスト計算によりコードの妥当性の確認ができた。以上の成果から、JT-60SA 予測計算及び TOPICS-SONIC 統合コード開発を通じてアクションプランにおける、「ダイバータプラズマシミュレーション開発」、及び「ダイバータ SMC の重点開発・利用」を加速することができた。

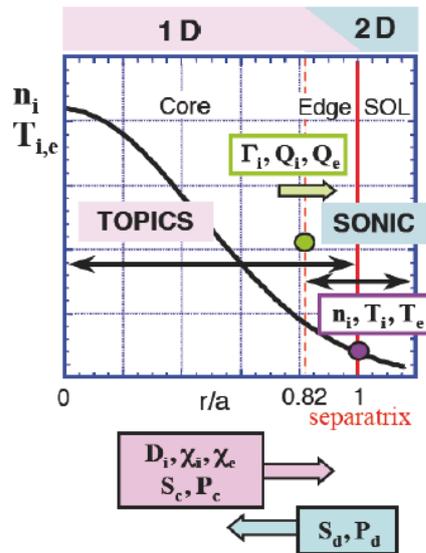


図 1 TOPICS-SONIC 計算の概略図。

(3) 今後の利用予定:

JT-60SA プラズマ予測計算では、JT-60SA の典型運転シナリオを対象とし、炭素壁、金属壁の場合それぞれの壁材不純物を考慮した上で、①Ar 入射、②Ne 入射、③Ar+Ne 混合の不純物入射ケースについて、ダイバータ熱負荷や炉心端密度から JT-60SA シナリオの成立性の調査を行う。さらに、それぞれの不純物種入射ケースにおける不純物輸送・放射特性及び炉心への不純物侵入量について系統的に評価を行う。また、ITER プラズマ予測計算では①N₂ 入射、②Ne 入射の不純物入射ケースの計算を行う。以上を通じて ITER や原型炉にも応用可能な不純物輸送制御手法の確立に寄与する。また、炉心プラズマと周辺プラズマの輸送を矛盾なく解く TOPICS-SONIC 統合コードのテスト計算を行うことで開発をサポートし、JT-60SA 実験解析のための基盤構築を推進する。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等): 学会発表

学会発表

- 1) Improved screening effect of seeded high-Z impurity through SOL plasma flow enhanced by additional low-Z impurity injection, S. Yamoto, K. Hoshino, Y. Homma, T. Nakano, N. Hayashi, 28th IAEA Fusion Energy Conference, Online, 2021.5 (Poster)

核燃焼プラズマの動特性に関するシミュレーション研究

矢木 雅敏、ピアワーゲ アンドレアス、ワン ウエイ、瀬戸 春樹

量子エネルギー部門 六ヶ所研究所

核融合炉システム研究開発部 プラズマ理論シミュレーショングループ

(1) 利用目的:

プラズマ理論シミュレーション Gr においては、本中期計画において、核燃焼プラズマの動特性を中心としたプラズマ予測精度の向上のためのシミュレーション研究を推進している。令和 3 年度の年次計画においては核融合プラズマシミュレーションコードの実験検証を行うとともに、ディスラプション等の核燃焼プラズマの動特性の評価を進めることを目標とした。これを達成するために大規模シミュレーション研究に関連して課題を設定し、担当者がそれぞれの課題に取り組むこととした。進展が見られた課題に関して報告する。

(2) 利用内容・結果:

GKNET コードを用いた JT-60SA 高ベータプラズマにおける乱流輸送研究

GKNET コードに固定境界平衡コード TASK/EQ を結合し、実験解析が行えるようコードの拡張を行い、楕円度や三角度がイオン温度駆動型ドリフト波(ITG)や捕捉電子モード(TEM)不安定性に及ぼす効果を調べている。これまでは計算量の低減と計算の安定化のため磁場に捕捉された電子の運動のみを扱う計算であったが、今回はじめて、全ての電子の運動を扱う完全な運動論的電子モデルを実装して反転磁気シア配位の捕捉電子モードの線形解析を実現した。図 1(a)は解析した成長率の波数依存性、図 1(b)は成長率の凹みが見られるトロイダルモード数 15 のモード構造を示したものである。(右図では安全係数の極小値付近で共鳴するモードが抑制されていることが確認できる。) 図 1 の結果に加え、完全な運動論的電子モデルでは従来の捕捉電子のみを考慮したモデルに比べて高波数領域で成長率が高くなるという結果も得られた。

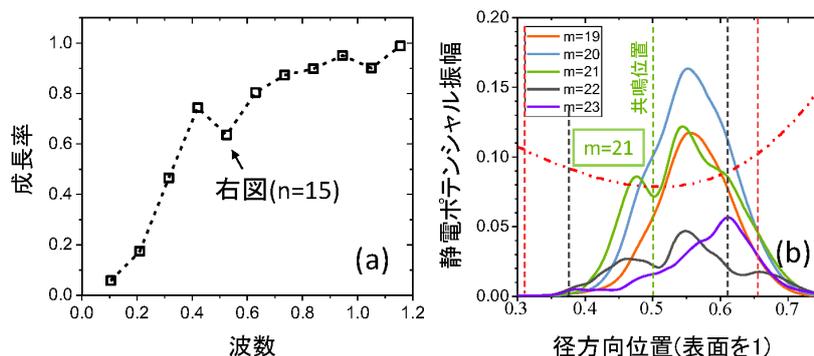


図 1. (a) 運動論的電子モデルで評価した捕捉電子モードの成長率(横軸:イオン回転半径で規格化した波数、縦軸:イオン熱速度の走行時間で規格化した成長率). (b) トロイダルモード数 15 の静電ポテンシャルのモード構造. 安全係数の極小値付近に共鳴面を持つモードが強く抑制されている.

今回行われた完全な運動論的電子モデルへの拡張は高ベータ領域における電磁乱流効果を考慮するための重要な開発ステップである。今後は JT-60SA の高ベータ放電における電磁乱流の解析に向けた開発を進めていく。

R5F2 コードを用いた核燃焼プラズマの粒子制御に向けたシミュレーション研究

これまで、1次元領域分割法に基づく R5F コードと 2次元領域分割法に基づく R5F2 コードのベンチマークを進めてきた。2つのコードでベンチマーク結果が一致しないという問題があったが、R2年度の作業により集団通信の実装に問題があることが判明、その部分の修正を行ったところ、線形問題のベンチマークに関しては両者が一致することが確認できた。今回、非線形問題に対してベンチマークを進め、両者がよく一致していることを確認した。図2に各モードに対する電磁エネルギーの時間発展を示す。左図は1次元領域分割版コードによる結果であり、右図は2次元領域版コードによる結果である。線形成長率はよく一致しておりエネルギーの飽和レベルもほぼ一致していることが確認できた。

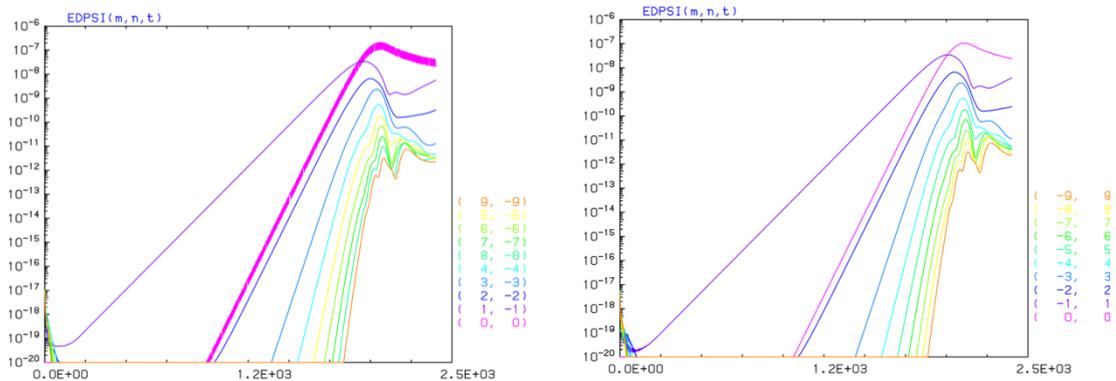


図2. 各モードに対する電磁エネルギーの時間発展。横軸はポロイダルアルフヴェン時間で規格化された時間、縦軸は規格化された電磁エネルギーを示す。

次に周辺部にハンブを持つ密度分布を初期値として与え、その時間発展を追跡した。図3に $T=200$ (ポロイダルアルフヴェン時間)における磁気面平均された密度分布、図4に $T=200$ における $z=0$ 断面上の2次元密度分布をそれぞれ示す。

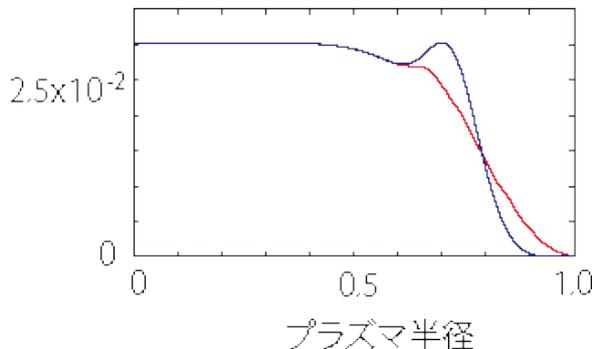


図3. $T=200$ における磁気面平均された密度分布 (赤色) および初期分布 (紺色)

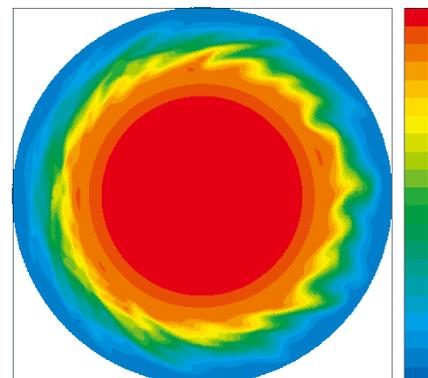


図4. $T=200$ における $z=0$ 断面上の2次元密度分布

図4から明らかなように初期分布において $r > 0.7$ の密度勾配により強い乱流が発生し、これが密度分布の緩和に寄与している。 $0.6 < r < 0.7$ にある逆向きの密度勾配による内向きの粒子フラックスを期待したが、 $T=200$ ではすでに分布が緩和してしまい、逆向きの密度勾配は維持されていない。この結果、 $0.6 < r < 0.7$ においても外向きの粒子フラックスが生成されていることが解析より明らかとなった。局所解析では逆向きの密度勾配が維持されるという仮定のもと内向きの粒子ピンチが発生することを指摘したが、大局的なシミュレーションでは状況が大きく異なることが明らかになった。

(3) 今後の利用予定:

大局的なシミュレーションでは逆向きの密度勾配を維持することは困難であることが判明したので B. Coppi らが提唱していた ion mixing mode の可能性について検討したい。このモードは slab ITG モードと磁力線方向の電子の熱輸送が結合して内向きの粒子フラックスを生成するものであり、反転密度勾配は必要としない。このためには現在の 5 場モデルを 6 場モデルに拡張し、ITG モードを導入する必要がある。6 場モデルにおいて ITG モードが起きるプラズマパラメータを確認し、数値実験のための適当なパラメータを設定した上で粒子ピンチが起こるのかどうかを検証する必要がある。また、捕捉電子モード (TEM) を流体モデルの範囲で導入できれば、ITG が捕捉電子モードの影響を受けて内向きの粒子フラックスを作り出すことも可能である。通過粒子が作り出す内向きのフラックスと捕捉電子が作り出す内向きのフラックスの大小関係に対して衝突効果がどのように依存してくるのかを明らかにする。それらを整理することで密度分布の尖塔化を行う手法を開拓していく予定である。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) 企画セッション「不純物輸送」趣旨説明, 矢木 雅敏, 第 19 回核燃焼プラズマ統合コード研究会, 九州大学応用力学研究所, 2022-01-06 (Oral)
- 2) Global gyrokinetic study of magnetic shaping effect in reversed magnetic shear plasmas, Wei Wang, 今寺 賢志, Seto Haruki, Yagi Masatoshi, 17th Technical Meeting on Energetic Particles and Theory of Plasma Instabilities in Magnetic Confinement Fusion, IAEA, 2021-12-10 (Oral)
- 3) Global gyro-kinetic study of plasma shaping effect on trapped electron mode (TEM) with reversed magnetic shear, Wei Wang, 今寺 賢志, Seto Haruki, Yagi Masatoshi, Asia-Pacific Transport Working Group Meeting, Kyushu University, 2021-07-06 (Oral)

- 4) Numerical study of helium ash and fast particle dynamics in a sawtooth tokamak plasma, Andreas Bierwage, Shinohara Koji, Yevgen Kazakov, Vasili Kiptily, Philipp Lauber, Massimo Nocente, Ziga Stancar, Sumida Shuhei, Yagi Masatoshi, Jeronimo Garcia, Ide Shunsuke, JET Contributors, 17th Technical Meeting on Energetic Particles and Theory of Plasma Instabilities in Magnetic Confinement Fusion (EPPI), IAEA, 2021-12-07 (Oral)
- 5) 運動論プラズマに対する Lagrangian-Eulerian 混合解法, 白戸 高志, 松山 顕之, 矢木 雅敏, 日本物理学会 2021 年秋季大会, 日本物理学会, 2021-09-20 (Oral)
- 6) 全円環トーラス周辺乱流シミュレーションのための計算手法開発, 瀬戸 春樹, B.D. Dudson, X.Q. Xu, 矢木 雅敏, 第 38 回プラズマ・核融合学会年会, プラズマ・核融合学会, 2021-11-24 (Poster)
- 7) 捕捉電子不安定性に及ぼす通過電子の非断熱応答効果, 矢木 雅敏, 王 ウェイ, 瀬戸 春樹, 今寺 賢志, 第 38 回プラズマ・核融合学会年会, プラズマ・核融合学会, 2021-11-24 (Poster)
- 8) The influence of heat source profile on turbulent transport statistics in flux-driven gyro-kinetic simulations, Wei Wang, 岸本 泰明, 今寺 賢志, Yagi Masatoshi, 第 37 回プラズマ・核融合学会 年会, プラズマ・核融合学会, 2020-12-02 (Poster)
- 9) Turbulence burst in resistive ballooning mode driven ELM crash, Yagi Masatoshi, Seto Haruki, Xu Xueqiao, Dudson Ben, Plasma Edge Theory Workshop / PET 2021, Swiss Plasma Center, EPFL, 2021-09-15 (Poster)
- 10) A charge-momentum-energy-conserving alternative numerical method for the Vlasov-Maxwell system, Shiroto Takashi, Matsuyama Akinobu, Yagi Masatoshi, XXXII IUPAP Conference on Computational Physics, Coventry University, 2021-08-02 (Poster)

招待発表

- 11) 非線形 MHD コード BOUT++による境界層プラズマシミュレーション研究の進展, 瀬戸 春樹, X.Q. Xu, B.D. Dudson, 矢木 雅敏, プラズマシミュレータシンポジウム 2021, 核融合科学研究所, 2021-09-17

学術論文

- 12) R&D Activities for Fusion DEMO in the QST Rokkasho Fusion Institute, Yasutomo Ishii, Aiba Nobuyuki, Ando Masami, Asakura Nobuyuki, Andreas Bierwage, Edao Yuuki, Hasegawa Kazuo, Hayashi Takumi, Hiwatari Ryoji, Hoshino Tsuyoshi, Ikeda Yoshitaka, Ishida Shinichi, Isobe Kanetsugu, Iwai Yasunori, Kasugai Atsushi, Kawamura Yoshinori, Jaehwan Kim, Kondo Keitaro, Saerom Kwon, Masuda Kai, Matsuyama Akinobu, Miyato Naoaki, Nakajima Motoki, Nakamichi Masaru, Nozawa Takashi, Ochiai Kentaro, Ota Masayuki, Oyaizu Makoto, Sakamoto Yoshiteru, Sato Satoshi, Seto Haruki, Shiroto Takashi, Someya Yoji, Tanigawa Hiroyasu, Tokunaga Shinsuke, Uto Hiroyasu, Wei Wang, Watanabe Yoshiyuki, Yagi Masatoshi, P.Cara, H.Dzitko, D.Gex, A.Jokinen, S.C.Lorenzo, K.Morishita, N.Nakajima, T.Ozeki, K.Sakamoto, M.Sugimoto, Fusion Science and Technology, 77(7-8), 532 - 548, 2022-02, DOI:10.1080/15361055.2021.1925030

- 13) A mass-energy-conserving discontinuous Galerkin scheme for the isotropic multispecies Rosenbluth–Fokker–Planck equation, Shiroto Takashi, Matsuyama Akinobu, Aiba Nobuyuki, Yagi Masatoshi, Journal of Computational Physics, 449, 110813, 2021-10, DOI:10.1016/j.jcp.2021.110813

- 14) Summary of the 16th IAEA technical meeting on energetic particles in magnetic confinement systems—theory of plasma instabilities, M. Barbarino, Todo Yasushi, Yagi Masatoshi, Nuclear Fusion, 60(11), 117001, 2020-08, DOI:10.1088/1741-4326/ab788e

- 15) Drift reduced Landau fluid model for magnetized plasma turbulence simulations in BOUT++ framework, Zhu Ben, Seto Haruki, Xu Xueqiao, Yagi Masatoshi, Computer Physics Communications, 267, 108079, 2021-07, DOI:10.1016/j.cpc.2021.108079

ダイバータ熱負荷の予想精度向上に向けた 2.5 次元ダイバータ輸送コードの開発

瀬戸 春樹

量子エネルギー部門 六ヶ所研究所

核融合炉システム研究開発部 プラズマ理論シミュレーショングループ

(1) 利用目的:

エネルギー増倍率 $Q=10$ を目標とした ITER 運転シナリオ(ITER- $Q=10$ シナリオ)や原型炉では H モード放電が標準運転モードであるが、ダイバータ構造材の工学的要請からダイバータ上の最大熱負荷を $10\text{MW}/\text{m}^2$ 以下に設計する必要がある。一方で、ITER- $Q=10$ シナリオでは 100MW 程度、日本の原型炉設計 (JA-DEMO) では 250MW 程度の熱がコア領域から磁力線がダイバータ板へと接続する周辺領域へと放出されるため、周辺領域における熱輸送予測の精度を向上させることは核融合発電の実現に向けた重要課題の一つである。本課題では周辺 MHD・乱流コード BOUT++を用いて、低計算負荷の二次元輸送コードと三次元周辺 MHD 乱流コードを結合した 2.5 次元の統合ダイバータ輸送コードを開発する。電子系とイオン系の熱輸送チャンネルを考慮した統合ダイバータ輸送シミュレーションを行い、既存装置の Eich 則の外挿性、電子・イオン熱輸送チャンネルがダイバータ熱負荷の内外非対称性に与える影響、ドリフト輸送や乱流輸送 (異常拡散) が周辺熱輸送分布に与える影響等を検証する。これらによって周辺統合輸送コード開発の高度化に貢献する。

(2) 利用内容・結果:

昨年度に開発した三次元版 BOUT++ コードで長波長成分の流れポテンシャルを安定して計算可能な境界値ソルバーを本計算規模の空間解像度 (径方向 1024: 格子点、磁力線方向: 128 格子点、従法線方向: 256 点、合計: 3355 万格子点) における全円環トーラス (トーラスの大円方向全域) の円形断面平衡トカマクのペDESTAL崩壊数値計算に適用した。

長波長用の境界値ソルバーと従来の短波長用境界値ソルバーを組み合わせることで、従来の BOUT++コードでは数値的安定性から困難であった全円環トーラスを対象とした非線形数値計算が現実的な計算コストで可能であること、並びに圧力ペDESTALが MHD 不安定性により崩壊する際にペDESTAL崩壊を駆動した微細な構造を持つ短波長の乱流の非線形相互作用からトロイダル方向に 1 回 ($n=1$)、ポロイダル方向に 2 回 ($m=2$) の対称性を持つティアリングモード様の大域的な流れ場が非線形的に生成されることを確認した (図 1)。

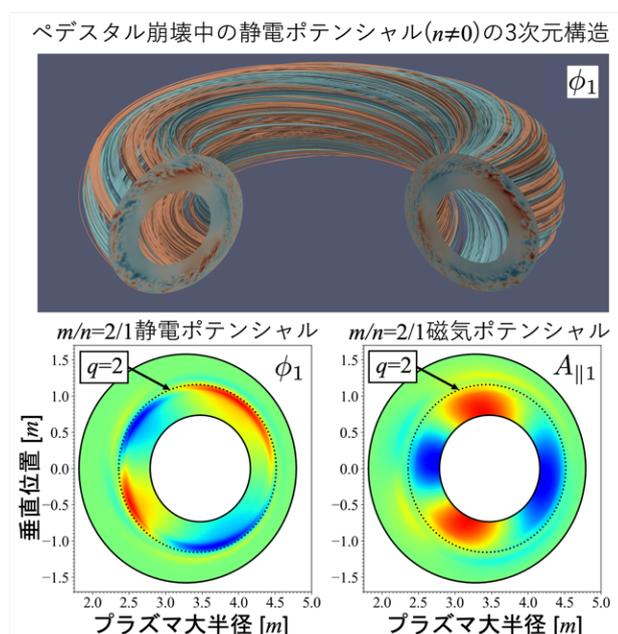


図 1: 全円環トーラスの円形断面平衡におけるペDESTAL崩壊中の静電ポテンシャル (流れ場) のトロイダル非対称成分の 3 次元構造 (上)、並びに非線形励起された $m/n=2/1$ 成分の静電ポテンシャルと磁気ポテンシャルのポロイダル断面図。ここで三次元構造の図は、可読性のために正面 1/4 領域を透明化している。

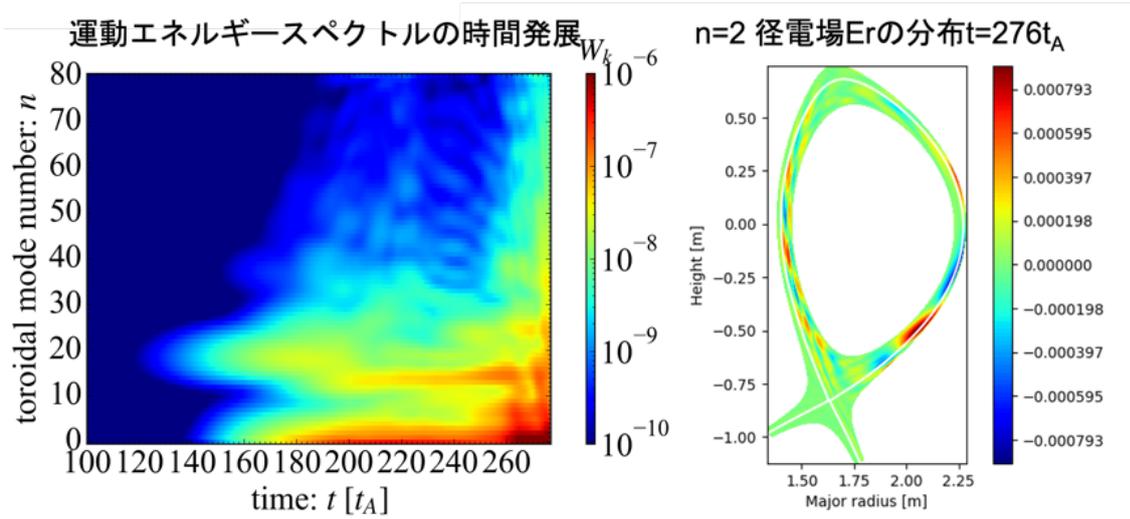


図 2 : ダイバータ配位平衡における全円環トーラス乱流数値計算の予備計算における運動エネルギースペクトルの時間発展と非線形飽和時 ($t=276t_A$) における長波長($n=2$)成分の径電場(流れ)のポロイダル断面図。従来の計算手法だと計算最初期 ($t \sim 1t_A$ 程度) に数値不安定性から計算が以上終了していたが、開発した手法により非線形飽和までの計算が可能となった。

また、長波長用の境界値ソルバーを用いることにより、従来の BOUT++コードでは長波長成分に起因する数値的不安定性から特に実施が困難であったダイバータ配位トカマク平衡における全円環トーラスの乱流数値計算を非線形飽和状態まで数値的に安定に計算できることを確認した(図 2)。

(3) 今後の利用予定:

令和 4 年度も利用を継続し、年度前半にダイバータ配位における周辺乱流の本計算に向けてダイバータ板に設定する境界条件の実装を行う。年度後半に EAST 装置のドリフト波周辺乱流を対象にした全円環トーラスのダイバータ配位の乱流数値計算の本計算を実施し、周辺乱流の空間構造の内外非対称性等の解析を進める予定である。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Turbulence burst in resistive ballooning mode driven ELM crash, Yagi Masatoshi, Seto Haruki, Xu Xueqiao, Dudson Ben, Plasma Edge Theory Workshop / PET 2021, on-line, Swiss Plasma Center, EPFL, 2021-09-15(Poster)
- 2) 全円環トーラス周辺乱流シミュレーションのための計算手法開発, 瀬戸 春樹, B.D. Dudson, X.Q. Xu, 矢木 雅敏, 第 38 回プラズマ・核融合学会年会, オンライン, プラズマ・核融合学会, 2021-11-24(Poster)

招待発表

- 3) 非線形 MHD コード BOUT++による境界層プラズマシミュレーション研究の進展, 瀬戸 春樹, X.Q. Xu, B.D. Dudson, 矢木 雅敏, プラズマシミュレータシンポジウム 2021, オンライン, 核融合科学研究所, 2021-09-17

学術論文

- 4) Drift reduced Landau fluid model for magnetized plasma turbulence simulations in BOUT++ framework, Zhu Ben, Seto Haruki, Xu Xueqiao, Yagi Masatoshi, 2021-08-13, Computer Physics Communications, N. Stanley Scott, PhD, ELSEVIER, 267, 108079, 2021.7, 0010-4655, 10.1016/j.cpc.2021.108079, <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465521001910>, 0010-4655, 4.390, 9.5
- 5) R&D Activities for Fusion DEMO in the QST Rokkasho Fusion Institute, Yasutomo Ishii, Aiba Nobuyuki, Ando Masami, Asakura Nobuyuki, Andreas Bierwage, Edao Yuuki, Hasegawa Kazuo, Hayashi Takumi, Hiwatari Ryoji, Hoshino Tsuyoshi, Ikeda Yoshitaka, Ishida Shinichi, Isobe Kanetsugu, Iwai Yasunori, Kasugai Atsushi, Kawamura Yoshinori, Jaehwan Kim, Kondo Keitaro, Saerom Kwon, Masuda Kai, Matsuyama Akinobu, Miyato Naoaki, Nakajima Motoki, Nakamichi Masaru, Nozawa Takashi, Ochiai Kentaro, Ota Masayuki, Oyaizu Makoto, Sakamoto Yoshiteru, Sato Satoshi, Seto Haruki, Shiroto Takashi, Someya Yoji, Tanigawa Hiroyasu, Tokunaga Shinsuke, Uto Hiroyasu, Wei Wang, Watanabe Yoshiyuki, Yagi Masatoshi, P.Cara, H.Dzitko, D.Gex, A.Jokinen, S.C.Lorenzo, K.Morishita, N.Nakajima, T.Ozeki, K.Sakamoto, M.Sugimoto, 2022-02-24, Fusion Science and Technology, , Tayler & Francis, 77, 7-8, 532, 548, 2022.2, 1536-1055, 10.1080/15361055.2021.1925030, <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/15361055.2021.1925030>, 1536-1055, 1.100, 8.7

外部資金獲得

- 6) 科学研究費助成事業(学術研究助成基金助成金), 原型炉に向けた 2.5 次元統合輸送コードによるダイバータ熱負荷評価の研究, 瀬戸 春樹

磁気流体力学に対する先進的アルゴリズム研究とその実証実験

白戸 高志

量子エネルギー部門 六ヶ所研究所

核融合炉システム研究開発部 プラズマ理論シミュレーショングループ

(1) 利用目的:

核融合炉の実機形状に適合する計算メッシュを使用して高ベータな磁気流体力学 (MHD) 現象の解析を行うことを目的として、不連続ガレルキン (DG) 法に基づく非線形 full-MHD コード「MUSES」の開発を進めている。DG 法は非構造格子に対して高い空間精度を達成可能であるのみならず、セル境界における微小な数値不連続に対してリーマン問題を立てることで自然と数値粘性が導入されるため、一般的な有限要素法と比較して移流項に対する数値安定性が高いことが知られている。

しかしながら、MHD 方程式に特徴的な拘束条件である磁場のソレノイダル条件 ($\nabla \cdot \vec{B} = 0$) を満足できなければ、数値的に不安定となることがよく知られている。これは、MHD では存在しないと仮定されている磁気単極子が数値誤差により発生してしまい、非物理的な力による加速を受けて運動エネルギーが増幅されることになる。その一方で、全エネルギーは保存されることから、その皺寄せにより圧力が負となることで計算が発散するというのが数値不安定の原理である。したがって、数値的な磁気単極子が発生しないようにする計算法や、非物理的な力を補正する計算法を開発しなければ、MHD 方程式を安定に解くことは困難となる。本研究では、磁場のソレノイダル条件に係る数値不安定を解消する先進的アルゴリズムを開発し、それを実装した独自開発のコードとスーパーコンピュータを組み合わせることで、DG 法による高精度な核融合プラズマシミュレーションを実証することが目的となる。

(2) 利用内容・結果:

令和2年度末の時点では前述した MHD 特有の数値不安定の観点から、円柱プラズマにおけるアルヴェン波等の単純な振動問題しか計算できていなかった。令和3年度の前半にはこの問題の原因が磁場のソレノイダル条件の数値的な破れであることを特定し、locally divergence-free DG 法と Powell の移流拡散法を組み合わせることで実装することにより、この数値不安定性を解消することに成功した。Locally divergence-free DG 法は磁場をダイバージェンスフリーな基底関数の線形和で表す手法であり、移流拡散法はセル境界における磁力線の不連続に起因する誤差を流線に乗せて移流させることで誤差の局所的な蓄積を回避するモデルである。このような改良を施した上で、円柱プラズマにおける内部キンクモードの数値実験を行った。線形理論により予測される成長率を2%未満の誤差で再現しており、図1に示すようにケルビン・ヘルムホルツ不安定性を伴って非線形崩壊の様子が確認された。

年度後半には、MUSES コードの一般座標系への書き換えを行うことで、トーラス形状シミュレーションを実行可能とするための取り組みが行われた。この作業における最大の困難は、ソレノイダル条件に起因する数値不安定性を回避するためのアルゴリズムが、一般座標系に対応していなかったという点である。結論のみ示すが、反変成分磁場にヤコビアンを乗じた変数を未知

変数として選択することで、座標系に依存しない形式に拡張することに成功した。これに合わせて、他の保存変数についても全てヤコビアンを乗じたものに修正を行うことで、既存の計算手法からの修正が最小となるようにコードの設計を行った。このような改修の効果を確認するために、初期条件として解析平衡を与えた場合に平衡を維持できるかどうか検証を行った。図2にトーラス形状シミュレーションにおけるベータ値の分布を示す。一般座標系への拡張を行うのみでソレノイダル条件に関する対処を行わないコードの場合、数値不安定により解が発散している様子が確認された。一方、今回新たに開発した一般座標用の *locally divergence-free* DG 法の場合は、深刻な数値不安定が回避されることが確認された。したがって、世界で初めて *locally divergence-free* DG 法を任意の座標系に拡張したと言って差し支えないだろう。

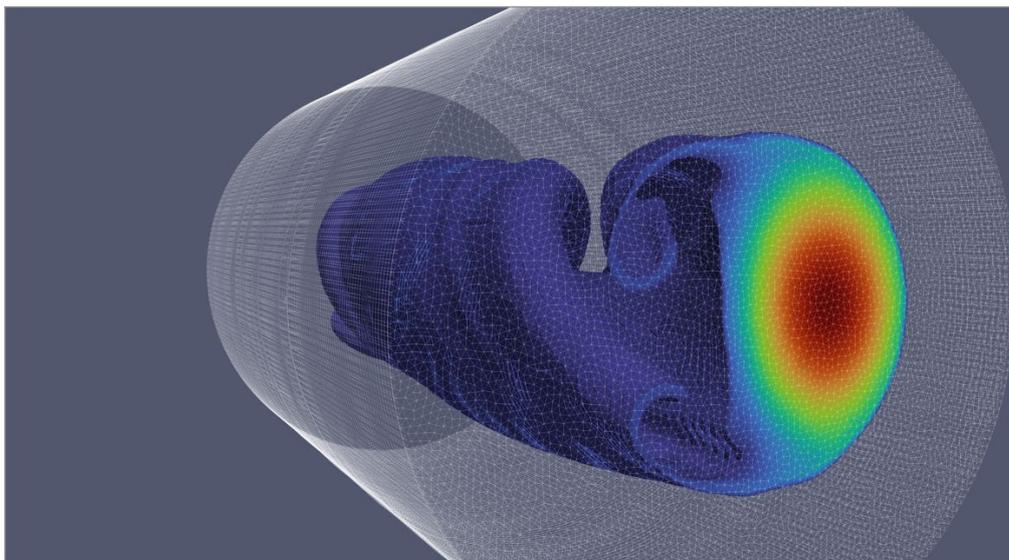


図1 円柱プラズマにおける内部キンクモードの計算例。

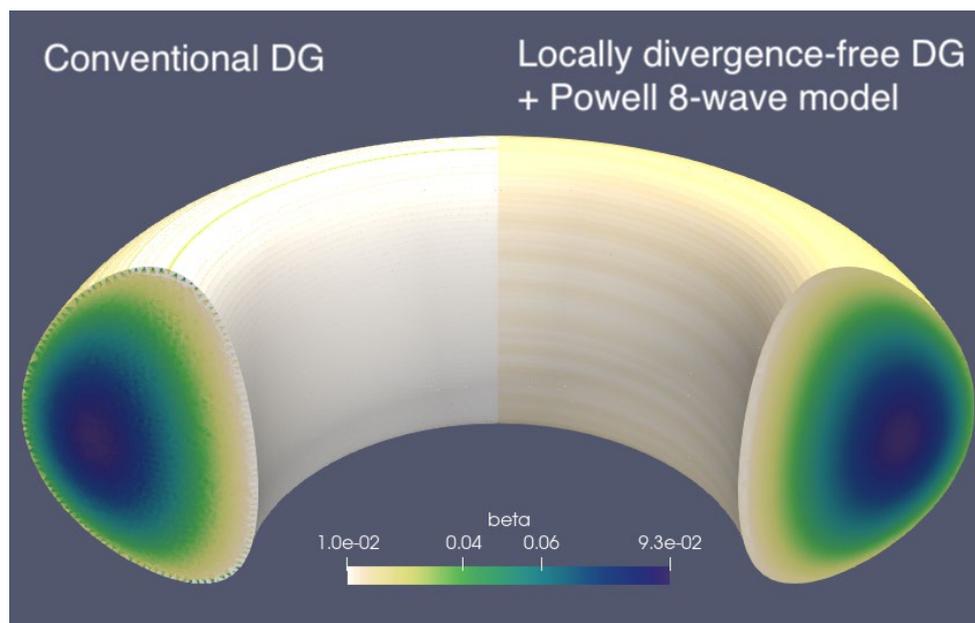


図2 一般座標に拡張した *locally divergence-free* DG 法を用いた計算例。

(3) 今後の利用予定:

令和4年度は、抵抗性 MHD 方程式に拡張したコードによる円柱プラズマの計算と、一般座標コードによるトーラスプラズマの計算を行う予定である。年度の前半には円柱プラズマにおける抵抗性内部キンクモードを数ケース計算し、線形理論などとの比較を行う。計算コストは 100,000 ノード時程度の予定である。年度後半には、トーラスプラズマにおける理想内部キンクモードの計算に着手するとともに、一般座標に拡張した抵抗性 MHD コードの動作試験を行う予定である。計算コストは約 200,000 ノード時である。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) ダイバージェンスフリーな不連続ガレルキン法による非線形 MHD コード開発, 白戸高志, 松山 顕之, 相羽 信行, 第 38 回プラズマ・核融合学会, オンライン, 2021.11 (Oral)

- 2) 完備な基底関数の実装による非線形 MHD コードの改良, 白戸 高志, 松山 顕之, 相羽 信行, 日本物理学会第 77 回年次大会, オンライン, 2022.03 (Oral)

コード高速化・最適化研究成果

LMMLEM 画像再構成プログラム及び PET 画像再構成プログラムの GPU 化

山口 充孝¹, 長尾 悠人¹, 河地 有木¹, 田島 英朗², 山谷 泰賀²
¹量子ビーム科学部門 高崎量子応用研究所 放射線生物応用研究部
プロジェクト「RI イメージング研究」,
²量子生命・医学部門 量子医科学研究所 先進核医学基盤研究部
イメージング物理研究グループ

(1) 利用目的:

まず、PHITS シミュレーション出力の画像再構成プログラム(以降、LMMLEM 画像再構成プログラム) の GPU 化を試みた。このプログラムは実機測定結果やモンテカルロシミュレーション結果(複数の検出器におけるエネルギー付与のリストデータ) から、リストモード期待値最大化最尤推定(LM-MLEM)によってガンマ線源の分布を再構成するソフトウェアである。すでに OpenMP での並列化は実装済みであり、今回、GPU 化による高速化を目的とした。

次に、PET 装置によって得られた画像をリストモード OSEM (Ordered Subset Expectation Maximization) 法によって再構成するプログラム(以降、PET 画像再構成プログラム) について GPU 化を試みた。このプログラムは、既に CUDA での GPU 化は実装済みであり、今回の課題では OpenACC による GPU 化での高速化およびこれを通じた知見の蓄積を目的とした。

(2) 利用内容・結果:

評価環境は SGI8600 の GPGPU 演算部 1 ノードを使用し、以下の手順で作業を行った。

1. SGI8600 での動作確認
2. CPU 実行時の性能検証
3. GPU 化前の調査およびソース修正
4. OpenACC による GPU 化の検討、実装
5. GPU 化後の性能検証

LMMLEM 画像再構成プログラムについては、GPU 化により CPU 実行より実行時間を短くすることができ、並列化区間について最大で 770 倍程度の性能改善が実現された(図 1)。画像再構成プログラムの高コストループ内には GPU が不得意である if 文がなかったため、性能改善が実施できたと考えられる。なお、今回 GPU 化を行わなかったループはファイル I/O 等の存在が原因となっている。

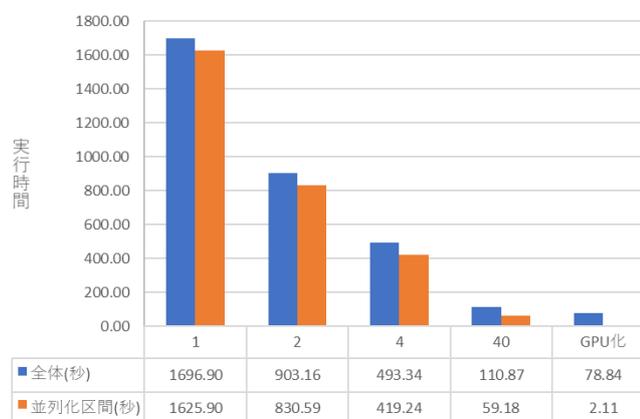


図 1: GPU 化前の OpenMP による 1, 2, 4, 40 並列時の実行時間と GPU 化後の実行時間の比較結果

次に、PET 画像再構成プログラムについて GPU 化を試みた、OpenMP によるスレッド実行にて並列化されていた箇所を GPU 化対象とし、GPU 化後のプログラムにおいて、実行時間を計測したが、システムの SGI8600 におけるジョブの上限（48 時間）を超える結果となり、改善が見られなかった。GPU 化コード実装後のコンパイルの段階で“NVC++-S-0155-Accelerator region loops nested too deeply”という不測の事象が発生し、本事象を踏まえた上で性能改善を目指すべく、対策として計算に使用するデータの設定をホスト側、計算処理をデバイス側で行うようコード変更を試みた。しかしながら、並列実行を目指した箇所において並列化を行うことが出来ず、性能改善は行えなかった。OpenACC を用いて並列化を行うには、操作を行う配列のインデックスがループインデックス以外を使用しないコードに変更する必要がある。また、対象区間におけるループや関数のネスト数、定義されるローカル変数の個数などにも注意が必要である。GPU 化による性能改善を進めるためには、アルゴリズムに対する相性を考慮した上で適した GPU 化手法を選択することが望ましい。

(3) 今後の利用予定:

LMMLEM 画像再構成プログラムについては GPU 化により大幅な計算時間の短縮が達成された。本プログラムを活用することで通常 1 時間程度必要であった計算時間を 3 分程度に短縮でき、測定装置による計測終了からほぼリアルタイムで測定結果の可視化が可能となった。今後、本プログラムの測定装置への実装を進める予定である。

PET 画像再構成プログラムについては、高速化の実現は達成出来なかった。しかし、今回の機会 OpenACC による並列化を行う際に必要となる留意点に関する多くの知見を得ることができた。この知見を、本プログラムおよび周辺プログラムの今後の並列化実装の際に活用していく予定である。

一般利用者研究成果一覽

1. 量子生命・医学部門

学会発表

- 1) Evaluation of Monte Carlo calculated beam quality correction factors for several ionization chamber types in carbon-ion beams, Yuka Urago, The 9th Korea-Japan Joint Meeting on Medical Physics, Virtual Meeting, 2021.9 (Oral)

2. 量子ビーム科学研究部門

学会発表

- 1) 同位体選択的分子配向の量子制御, 黒崎 讓, 横山 啓一, 大槻 幸義, 分子科学討論会 2021, 札幌, 2021.9 (Poster)
- 2) Quantum control of isotope-selective molecular orientation, Y. Kurosaki, K. Yokoyama, Y. Ohtsuki, ICCMSE2021, Greek, 2021.9 (Oral)
- 3) 三次元 PIC コードによるレーザー加速イオンの定量評価, 畑 昌育, 日本物理学会第 77 回年次大会, オンライン, 2022.3 (Oral)
- 4) 三次元 PIC コードによるレーザープラズマ相互作用研究, 畑 昌育, レーザープラズマシミュレーション・データ駆動研究会, オンライン, 2022.3 (Oral)
- 5) 反強磁性モット絶縁体における時間分解スペクトルの逆位相振動, 筒井 健二, 兵庫県立大学大学院理学研究科セミナー, 兵庫県, 2021.10.15 (Oral)
- 6) Antiphase oscillations in the time-resolved spin structure factor of photoexcited two-dimensional Mott Insulator, Takami TOHYAMA, Kazuya SHINJO, Kenji TSUTSUI, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, SCES, 2021.9.30 (Oral)
- 7) ハバード模型の光励起状態に対する時間分解スペクトルのクラスター計算 IV, 筒井 健二, 新城 一矢, 遠山 貴巳, 日本物理学会第 77 回年次大会, 2022.3.17 (Poster)
- 8) ハバード模型の光励起状態に対する時間分解スペクトルのクラスター計算 III, 筒井 健二, 新城 一矢, 遠山 貴巳, 日本物理学会 2021 年秋季大会, 2021.9.22 (Poster)
- 9) 3 GeV 次世代放射光施設におけるビームライン遮蔽設計, 松田 洋樹, 竹内 章博, 萩原 雅之, 糸賀 俊朗, 小西 啓之, 日本原子力学会 2021 年秋の大会, オンライン, 日本原子力学会, 2021.9.8 (Oral)

- 10) Shielding design for 3 GeV next generation synchrotron radiation facility, Matsuda Hiroki, Hagiwara Masayuki, Takeuchi Akihiro, Itoga Toshihiro, Konishi Hiroyuki, 2021 Symposium on Nuclear Data, オンライン, 日本原子力学会, 2021.11.18, <https://conference-indico.kek.jp/event/136/overview> (Poster)
- 11) 3 GeV 次世代放射光施設における放射光による遮蔽設計, 松田 洋樹, 萩原 雅之, 竹内 章博, 糸賀 俊朗, 小西 啓之, 日本原子力学会 2022 年春の大会, オンライン, 日本原子力学会, 2022.3.16, <https://confit.atlas.jp/guide/event/aesj2022s/top> (Oral)

学術論文

- 12) Ab initio study of palladium dichloride PdCl₂ and its anion PdCl₂⁻, Y. Kurosaki, R. Nakanishi, M. Saeki, H. Ohba, Chemical Physics, vol. 551, 111349, 2021
- 13) Quantum control of isotope-selective molecular orientation, Yuzuru Kurosaki, Keiichi Yokoyama and Yuki Yoshi Ohtsuki AIP Conference Proceedings 2611, 020010 (2022)

3. 量子エネルギー部門

学会発表

- 1) CONCEPTUAL DESIGN OF ADVANCED FUSION NEUTRON SOURCE (A-FNS), S. SATO, A. KASUGAI, K. OCHIAI, K. MASUDA, M. NAKAMURA, M. OHTA, M. OYAIIDZU, S. KWON, 28th IAEA Fusion Energy Conference, オンライン, 2021.5 (Poster)
- 2) Design of Test Modules and Planning of Neutron Irradiation Tests for Fusion Reactor Materials in A-FNS, S. Sato, S. Kwon, M. Ohta, M. Oyaidzu, K. Ochiai, K. Masuda, A. Kasugai, K. Hasegawa, K. Sakamoto, S. Ishida, International Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRM-20), オンライン, 2021.10 (Oral)
- 3) JENDL-5 の検証(8) JAEA/FNS でのチタン実験を用いた JENDL-5 ベンチマークテスト, 太田 雅之, 今野 力, 権 セロム, 佐藤 聡, 日本原子力学会 2022 年春の年会, オンライン, 2022.3 (Oral)
- 4) JENDL-5 の検証 (7) JAEA/FNS での銅、鉛実験を用いたベンチマークテスト, 権 セロム, 今野 力, 太田 雅之, 佐藤 聡, 日本原子力学会 2022 年春の年会, オンライン, 2022.3 (Oral)

学術論文

- 5) Identification of Slow-Wave Ion Cyclotron Emission on JT-60U, S. Sumida, K. Shinohara, M. Ichimura, T. Bando, A. Bierwage, S. Ide, Nuclear Fusion, vol.61, no.11, 116036, 2021.11
- 6) Conceptual design of advanced fusion neutron source (A-FNS) and irradiation test modules, S. Sato, A. Kasugai, K. Ochiai, K. Masuda, M.M. Nakamura, M. Ohta, M. Oyaidzu, S. Kwon, K. Sakamoto and S. Ishida, Nuclear Fusion, 61, 106026 (2021), 2021.8
- 7) Conceptual design of radio isotope production module and application for neutron measurement in A-FNS, Masayuki Ohta, Saerom Kwon, Satoshi Sato, Mitsuhiro Maida, Atsushi Kasugai, Fusion Engineering and Design, 168, 112591 (2021), 2021.5

発行年月 2022年11月

編集発行 国立研究開発法人 量子科学技術研究開発機構

連絡先 〒263-8555

千葉県千葉市稲毛区穴川4-9-1

情報基盤部 IT運用・学術情報課

(スパコン利用検討委員会事務局)

TEL : 043-206-3485 Fax : 043-290-1112

Email : super_comp_jimu@qst.go.jp

URL : <https://www.qst.go.jp/>

©2022 国立研究開発法人 量子科学技術研究開発機構