

QST-R-32



令和5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6年12月  
量子科学技術研究開発機構  
情報基盤管理部 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  
情報基盤管理部 IT 運用・学術情報課  
(スパコン利用検討委員会事務局)

## 内容

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
光合成系・材料系の光電変換過程における量子効果の解明 .....	12
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 .....	16
量子技術基盤研究部門 .....	19
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 .....	20
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の高精度化 .....	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 .....	28
H <sub>2</sub> O 円盤ターゲットを用いたレーザーイオン加速シミュレーション .....	34
Polarization Effects in Ultra-high intensity laser thin target interactions .....	36
第一原理分子動力学法に基づいた材料解析手法の開発 .....	38
量子エネルギー部門 .....	40
ダイバータプラズマ中の不純物輸送制御に関する研究 .....	41
R6F2 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 .....	44
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 .....	48
Exploratory study of laser-assisted regulation of tokamak plasmas .....	51
Sensitivity Analysis of Broad Spectrum of Low-Frequency Energetic Particle Driven Magnetohydrodynamics Instabilities Observed in the Low Magnetic Shear $q \sim 1$ Tokamak Plasmas .....	52
コード高速化・最適化研究成果 .....	56
Laser Induced Breakdown of Air with Ultrashort Laser Pulses .....	57
画像認識学習プログラムの GPU 並列化の検討 .....	59
一般利用者研究成果一覧 .....	61

# 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、櫻庭 俊、Kumar Amarjeet、Chan Wai Soon  
量子生命・医学部門 量子生命科学研究所

### (1) 利用目的:

アミロイド形成タンパク質及びクロマチンの動構造解析のために、i) アミロイド形成タンパク質である TDP-43 について野生型及び変異体のシミュレーション、ii) PET プローブ PBB3 とアミロイド線維との複合体のシミュレーション、iii) クロマチンの粗視化モデルの構築を行う。

### (2) 利用内容・結果:

i) TDP-43 のアミノ酸変異は、筋萎縮性側索硬化症 (ALS) や前頭側頭葉変性症 (FTLD) などの疾患と関連していると考えられている。変異の影響を調べるために、アミロイド線維にアミノ酸置換を導入し、野生型の線維と置換された線維の構造安定性を調べた。

図 1 に示すように、野生型のペプチド 2 本の上に、変異を入れたペプチドを 3 本、5 本、11 本それぞれスタッキングさせた系を用意し、それぞれ 1 マクロ秒のシミュレーションを行った。計算は、実験により線維構造が安定な変異体と不安定化する変異体について行った。

結果、不安定化する 2 つの変異体 (390 番目のアスパラギン→アスパラギン酸変異体、384 番目のグルタミン酸→アルギニン変異体) は、アミノ酸

の変異によって、ペプチドのスタッキング構造において静電相互作用エネルギーが高くなり、変異が起こった部分から構造が壊れていくことがわかった。

一方、安定化する変異体 (321 番目のアラニン→グリシン) では、ペプチド 3 本、5 本の小さな系でのシミュレーションでは野生型と比べて変化が見られなかった。しかし、ペプチドを 11 本スタッキングした系においては、違いが現れ始めた。より小さいアミノ酸への変異によって近くにある環状のアミノ酸同士の  $\pi$ - $\pi$  相互作用が安定化することで構造が安定化すると予想していたが、そのようなことは見られなかった。安定化のメカニズムについては、来年度以降引き続き解析を行う。

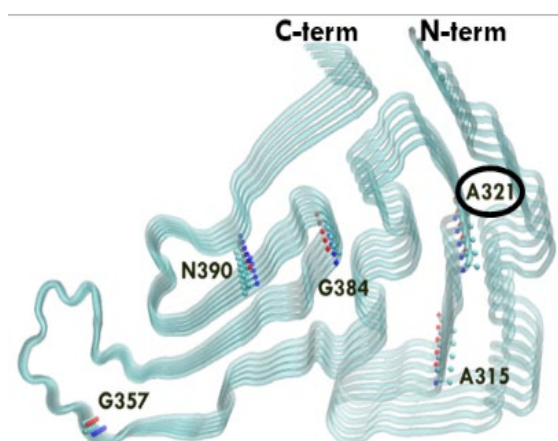


図 1. アミロイド線維構造とアミノ酸変異部位

ii) PBB3 低分子とタンパク質複合体構造の解明研究では、タウタンパク質が形成するアミロイド線維に対して、PBB3 がどの位置に結合するのか、また、その結合の様式を調べた。結果、図 2 に示すように、緑色部分に多く PBB3 が結合することが分かった。さらに、結合状態を詳細に解析すると、右図のように、2つのアミノ酸の間に滑り込むように結合していることが分かった。また、主な相互作用は van der Waals 力で、タウタンパク質線維の分子表面の形状と PBB3 の分子形状が相補的に合致している（凸と凹がうまくかみあった形になっている）ことが分かった。

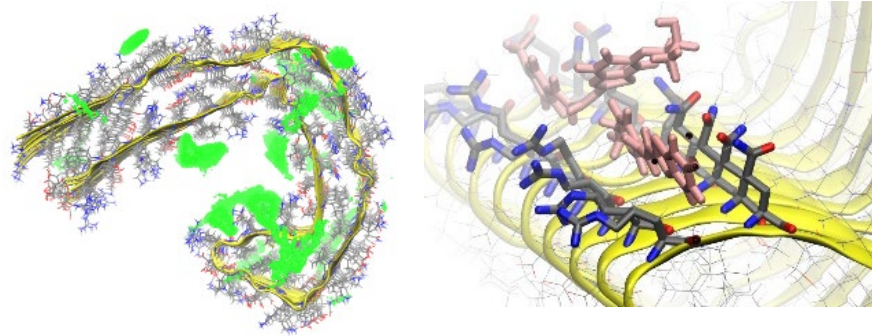


図 2 タウタンパク質線維。左：PBB3 の分布（緑）。右：PBB3（ピンク）が2つのアミノ酸の間に結合している様子。

iii) クロマチンの粗視化モデルの構築では、i)、ii)と比べて3桁以上分子量が違う分子の系があるので、通常の粒子系の分子動力学シミュレーションを適用することはできない。そこで、ポリマーシミュレーションと組み合わせてシミュレーションを実施した。ポリマーシミュレーションでは、実験データに基づいてポリマー内の距離拘束をかけてシミュレーションを行い、実験データと矛盾しない構造群を発生させた。発生させた構造をより細かい粒子モデルに載せ替えてシミュレーションを行い、粒子モデルの力場を求めるようなフレームワークを構築することができた。

### (3) 今後の利用予定:

アミロイド線維については、詳細な解析により、アミノ酸変異が線維構造を安定化、不安定化する要因を明らかにする。PBB3 については、PBB3 誘導体について同様のシミュレーションを実施し、PBB3 の改良を行う。クロマチンについては、粗視化モデルを完成させ、翻訳後修飾によるクロマチン状態の変化や構造の特徴を明らかにしていく。

### (4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 学術論文

- 1) クロマチン基本構造体、ヌクレオソームのダイナミクスと安定性, 河野秀俊, 生体の科学, vol. 74, 211-216, 2023.6
- 2) Benchmarking of force fields to characterize the intrinsically disordered R2-FUS-LC region, Chan-Yao-Chong, M. Chan, W. Soon and Kono, H. Scientific Reports, vol. 13, 14226, 2023.8

- 3) Designer adaptor proteins for functional conversion of peptides to small-molecule ligands toward in-cell catalytic protein modification, Fujimura, A. Ishida, H. Nozaki, T. Terada, S. Azumaya, Y. Ishiguro, T. Kamimura, Y. Kujirai, T. Kurumizaka, H. Kono, H. Yamatsugu, K. Kawashima, S. and Kanai, M. ACS Central Science, vol. 9, 2115-2128, 2023.10
  
- 4) Structural and Dynamic Changes of Nucleosome upon GATA3 Binding, Ishida, H. Matsumoto, A. Tanaka, H. Okuda, A. Morishima, K. Paul, A. W. Kurumizaka, H. Sugiyama, M. and Kono, H. Journal of Molecular Biology, vol. 435, 168308, 2023.10



## 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

### (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。DNA は、2本の DNA 鎖を構成するアデニンとチミン、グアニンとシトシンがそれぞれ塩基対を形成し、二重らせん構造をとる。DNA 構造を認識する様々な分子は、遺伝子の機能発現の調節などに関与している。特に、平面芳香族分子が DNA 二重らせん構造の塩基対間に平行に入り込む現象はインターカレーションと呼ばれる。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にはエチジウムブロマイドのように発癌性をもつものもあれば、アドリアマイシン (Doxorubicin、ドキソルビシンとも呼ばれる) のように抗癌剤に利用されるものもある。しかしながら、様々なインターカレーターと DNA の複合体構造やダイナミクスについてはよくわかっていない。本研究課題では、抗がん剤アドリアマイシンがインターカレーションした DNA における伸長過程、およびアドリアマイシンがインターカレーションしたヌクレオソームの構造変化解析について主に報告する。

### (2) 利用内容・結果:

本研究モデルの系は、アドリアマイシンと  $d(5'-TGAACGAACGAACGC-3')^2$  の 18 塩基対 DNA から成る。アドリアマイシンの力場は、量子化学計算を用いて作成した。DNA の周りに 4 つのアドリアマイシンを配置し、さらに水分子と  $Na^+$  イオンおよび  $Cl^-$  イオンを塩濃度が 150mM となるように配置した。系の大きさは、周期境界条件の  $105 \text{ \AA} \times 105 \text{ \AA} \times 105 \text{ \AA}$  の正方形セルとした (総原子数: 約 11 万原子)。

インターカレーションを促進するために、光ピンセット実験における DNA 伸長を模して、ABMD 法を用いて徐々に DNA の両端を伸ばした。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

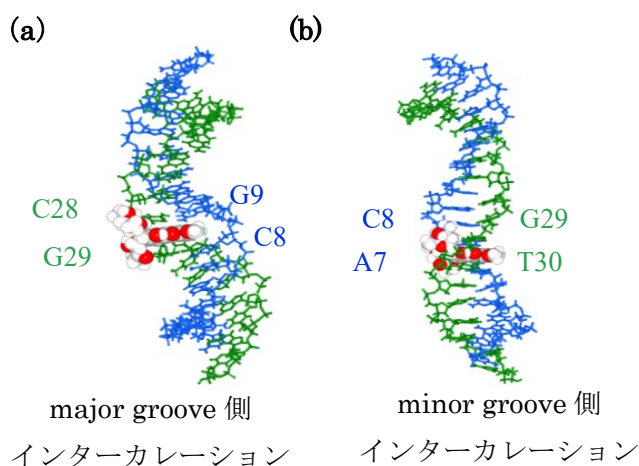


図 1: 抗がん剤アドリアマイシン (空間充填モデル) がインターカレーションした 18 塩基対 DNA (球棒モデル) の例 (a) DNA らせん構造の広い溝の major groove 側からアドリアマイシンがインターカレーションした状態。(b) 狭い溝の minor groove 側からアドリアマイシンがインターカレーションした状態。

法である。反応座標には、DNA 末端間距離を用いた。ABMD 法により、インターカレーションした状態を生成することに成功した (図 1)。また、インターカレーション状態の DNA は約 3Å 伸長し、ねじれが緩み柔らかくなることがわかった。

更に、ヌクレオソーム (ヌクレオソーム DNA とヒストンタンパク質の複合体) と 20 分子のアドリアマイシンから構成される系の分子動力学シミュレーションを 1 マイクロ秒以上にわたり実施した。アドリアマイシンはヌクレオソーム DNA によく結合し、ヒストンタンパク質にはあまり結合しないことがわかった。また、アドリアマイシンは DNA 上に不均等に分布することがわかった (図 2)。DNA minor groove とヒストンタンパク質は互いに相互作用していることが知られているが、アドリアマイシン存在下では、H4 ヒストンのアルギニン 45 と H3 ヒストンのアルギニン 83、H2A ヒストンのアルギニン 42 との間の原子コンタクト数が減少していることがわかった。この結果は、アドリアマイシンがヒストン脱離を引き起こすという生化学実験と整合している。つまり、アドリアマイシンがヒストン-ヌクレオソーム相互作用を弱めることが、ヒストン脱離のトリガーになると考えられる。

以上のように、抗がん剤アドリアマイシンが DNA やヌクレオソーム DNA にインターカレーションする過程を分子動力学シミュレーションにより観測することに成功した。また、インターカレーション状態の DNA やヌクレオソームの構造変化を解析した結果、アドリアマイシンが DNA やヌクレオソームを不安定化させる可能性が示唆された。

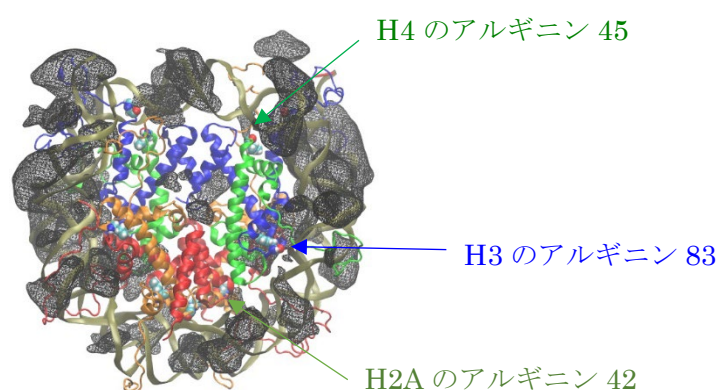


図 2 :ヌクレオソーム (H3 :青色、H4 :緑色、H2A :橙色、H2B :赤色、DNA :黄褐色) に結合した抗がん剤アドリアマイシンの分布図 (灰色)。

その他、抗体タンパク質の構造安定性を解析するための分子動力学シミュレーションを実施した。本研究の目的は、抗体医薬品製造過程の低 pH 水溶液中で出現する変性構造を明らかにすることであり、それにより製薬の効率化に貢献できると考えられる。昨年度には、SAXS データを再現する多数のモデルの構築を行い、その中から、短時間の MD シミュレーションによって、低 pH 水溶液中で安定に存在する構造モデルを得ることができた。今年度は、長時間 (1 マイクロ秒) の MD シミュレーションにより、構造モデルをさらに絞り込むことができた。絞り込んだモデル

は、中性水溶液中の MD シミュレーションでも安定に存在した。これは実際の現象と整合しているため、絞り込んだモデルが低 pH での構造である可能性が高いと考えられる。

### (3) 今後の利用予定:

今後は、インターカレーション状態のヌクレオソームが不安定化した原因を原子レベルで解析する。そして、抗がん剤アドリアマイシンがどのように遺伝子転写・発現に寄与しているのかを、ヌクレオソームの動態変化の観点から原子レベルで調べることで、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。また、抗体医薬品製造過程において起こる抗体タンパク質の凝集化のメカニズムを明らかにするため、構築した抗体タンパク質の変性構造を用いて、その 2 量体構造を明らかにする。更に、構造のない生体分子の機械学習力場の開発にも取り組む。

### (4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 学会発表

- 1) The conformational analysis of DNA and nucleosome with doxorubicin analyzed by molecular dynamics simulation, Hisashi Ishida and Hidetoshi Kono, Joint congress of 21st IUPAB(International Union of Pure and Applied Biophysics) and 62nd BSJ (Biophysics Society of Japan), Kyoto, Japan, 2024 年 6 月 (Poster)
- 2) Analysis of conformations of intercalated DNA using molecular dynamics simulations, 石田恒, 河野秀俊, 第 61 回日本生物物理学会年会, 名古屋, 2023 年 11 月 (Poster)
- 3) Identification of biomolecules in electron microscopy images with deep learning, 松本淳, 第 61 回日本生物物理学会年会, 名古屋, 2023 年 11 月 (Poster)

#### 学術論文

- 4) Structural and Dynamic Changes of Nucleosome upon GATA3 Binding, Ishida Hisashi, Atsushi Matsumoto, Hidetoshi Kono, Journal of Molecular Biology, vol.435, no.23, 168308, 2023, 10

## 光合成系・材料系の光電変換過程における量子効果の解明

藤田 貴敏

量子生命・医学部門 量子生命科学研究所 タンパク質機能解析

### (1) 利用目的:

本研究課題では光合成や人工光合成系のエネルギー変換過程を量子論的観点からの解明を目指した計算科学的研究に取り組み、研究の成果を新しい材料設計につなげることにより、持続可能な環境・エネルギーの実現を目指す。より具体的には光合成アンテナ系、有機薄膜太陽電池、機能性超分子を対象として、分子シミュレーション、電子状態計算、量子ダイナミクス、分光理論などを用いることにより、光電子物性や励起状態ダイナミクスを量子論的に解析する。

### (2) 利用内容・結果:

#### A. P3HT/PCBM の電荷分離ダイナミクスと過渡吸収スペクトル

ポンプ-プローブ分光法や 2 次元電子分光法など種々の時間分解分光法は光励起後のダイナミクスを解析するための実験手法であり、有機薄膜太陽電池の電荷分離の解析に用いられてきた。しかし、有機薄膜太陽電池のミクロな構造を得るのが難しく、スペクトルの帰属についても曖昧さが残るため、励起子やキャリアのダイナミクスと分光シグナルとの対応は十分に明らかになっているとは言い難い。

そこで本研究では励起状態計算・量子ダイナミクス法・分光理論を統合することにより、有機薄膜太陽電池系の励起状態ダイナミクスと時間分解分光シグナルのための計算手法の構築を行った。P3HT/PCBM ブレンドを計算対象として、構造を分子動力学法で作成した。得られた構造からおよそ 30 分子を切り出した構造を P3HT/PCBM ブレンドのモデルとして(図 1(a))、電子状態・励起子ダイナミクス・分光シグナル (吸収スペクトルと過渡吸収スペクトル) を計算した。時間分解分光シグナルの励起状態吸収の寄与の計算のためには、single excitation manifold(SEM)に加えて、double excitation manifold(DEM)も必要になる。本研究では SEM として P3HT 励起子状態と P3HT-PCBM 電荷移動(CT)状態を、DEM として P3HT-PCBM の正孔励起した CT 状態を励起状態の透熱基底として考慮し、励起状態ダイナミクスや時間分解分光シグナル計算のモデルハミルトニアンとする。

電子状態計算より得られたエネルギーダイアグラム (電子-正孔距離 vs 励起エネルギー) を図 1(b)に示す。赤点が P3HT の励起子状態、緑点が CT 状態、青点が正孔励起した CT 状態である。図 2(c)が吸収スペクトルであり P3HT の励起子状態が主に寄与する。本研究の励起状態のモデルでは、ポンプ光で P3HT のエキシトン状態が生成され(図 2(b): 赤点)、電荷移動(図 2(b)(赤点→緑点)後の CT 状態がプローブ光を吸収して正孔励起する(緑点→青点)。さらに、電荷分離ダイナミクスと過渡吸収分光シグナルを詳細に比較したところ、ポンプ-プローブの励起状態吸収の異方性のダイナミクスが、電荷分離の時定数とよく相関していることを示した。

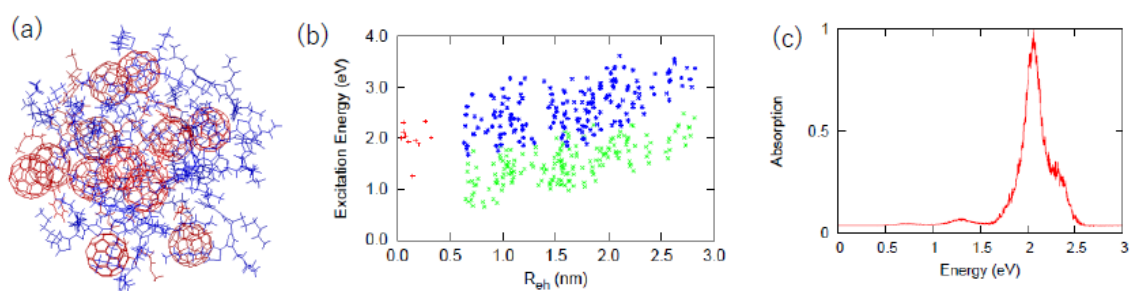


図 1:(a)P3HT(赤)/PCBM(青)のアモルファス構造。(b)電子-正孔距離(横軸)・励起エネルギー(縦軸)のエネルギーダイアグラム。(c)吸収スペクトル

### B. 光合成反応中心における電荷分離経路の解析

光合成の初期過程において光化学系 II(PSII)反応中心(図 2(a))で起こる光合成の初期電荷分離過程は 2 つの異なった電荷分離経路が提案されている(図 2(b))。ChlD1 経路( $RC^* \rightarrow ChlD1 + PheD1 \rightarrow PD1 + PheD1^-$ )が有力だといわれているものの、PD1 経路( $RC^* \rightarrow PD1 - ChlD1 \rightarrow PD1 + PheD1^-$ )の関与も指摘されており、結論は出ていない。本研究では構造ベースで励起状態ダイナミクスやスペクトルを計算することにより、これら二つの電荷分離経路を区別するためのスペクトルの解析方法を提案する。

PSII 反応中心の構造として PDB:ID 3wu2 の構造を用いた。PDB 構造から反応中心を構成する色素 6 分子と周囲のアミノ酸 20 分子程度を切り出し、フラグメント分子軌道法による電子状態計算を行うことにより、励起状態のモデルハミルトニアンを作成した。量子ダイナミクス手法の精度向上のため、波束ダイナミクスが長時間極限で正しい熱平衡状態を与えるような補正を行った。この熱補正した波束ダイナミクス法により励起状態のダイナミクスを計算したところ、電荷分離のタイムスケールとして実験値と近い値が得られた。さらに、ポンプ-プローブの励起状態吸収の寄与の異方性を解析することにより、PD1 経路と ChlD1 経路を判別可能なことを示した。

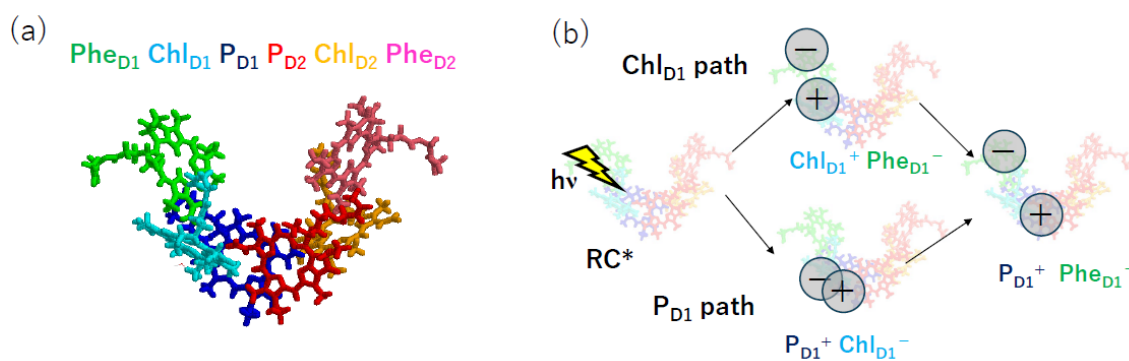


図 2:(a)PSII 反応中心の色素分子(構造は PDB:ID 3wu2)。(b)電荷分離経路

### C. 光合成アンテナタンパク質 APC の励起状態計算とスペクトル

フィコビリソームはシアノバクテリアの光合成アンテナであり、多数のタンパク質-色素複合体から構成されている。他の光合成アンテナ系と比べると色素が粗に存在している、色素のフィコビルリンは溶液中で短い蛍光寿命を持つ、といった特徴にもかかわらず、フィコビリソームは90%以上の量子収率で吸収した光を反応中心に輸送することができる。しかし、高い量子収率がどのように実現されているかについてはよくわかっていない。

本研究ではフィコビリソームを構成するタンパク質-色素複合体の1つである、アロフィコシアニン(APC)を研究対象とする。APC(図3(a))はフィコシアノビルリンと共有結合した $\alpha$ -サブユニットと $\beta$ -サブユニットの6量体から構成される。APCに対してフラグメント分子軌道法による励起状態計算を行った。励起エネルギー及び色素間の励起子カップリングを計算し、得られた吸収スペクトルとCDスペクトルを実験と比較した。吸収スペクトルが高エネルギー側にシフトしていること、吸収スペクトルの吸収極大と肩のエネルギー差が再現できていないという問題点はあるものの、CDスペクトルの特徴は再現できた。

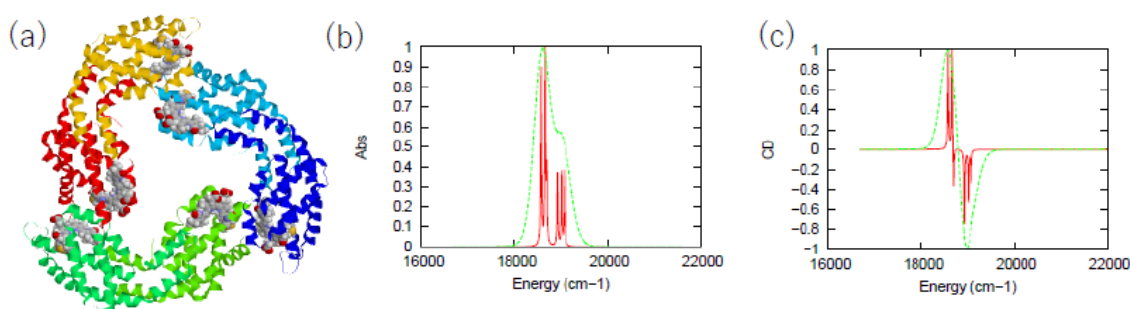


図3:(a)APCの構造(PDB:ID 2v8a)。(b)吸収スペクトル (c)CDスペクトル

### (3) 今後の利用予定:

今後は下記の研究項目についての利用を予定している。

#### A. P3HT/PCBMの電荷分離の時間スケール

P3HT/PCBMの励起状態ダイナミクスのシミュレーションは波束ダイナミクス法で行ったが、この手法は熱平衡に緩和しない・再配置効果が入らないという問題点がある。そのため量子ダイナミクスの精度改善のために、熱補正と再配置補正を考案し、電荷移動の時間スケールが定量的に算出できるかを検討する。

#### B. APC色素のプロトン化状態と励起状態

APCに結合した色素であるフィコシアノビルリンには考えられるプロトン化状態が3通りあるが、X線の結晶構造からは水素の位置を決めることはできない。特に色素のプロトン化状態の違いが、APCの色素サイトのエネルギー差やAPCとCPCとの吸収波長の違いに寄与している可能性がある。そのため、今後は色素サイトの励起エネルギーがプロトン化状態にどのように依存するかを計算を行う。

#### (4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

##### 学会発表

- 1) フラグメント分割型励起状態計算法の開発と分子集合体の励起子ダイナミクスへの応用, 藤田 貴敏, 日本コンピュータ化学会 2023 年秋季年会, 高松, 2023.11.25 (Oral)
- 2) メゾヒエラルキー物質における励起子ダイナミクス, 藤田 貴敏, 学術変革領域研究(A) 「キラル光物質科学」「メゾヒエラルキー」 合同シンポジウム, 千葉, 2023.10.26 (Oral)
- 3) Pump-Probe ESA Anisotropy による PSII 反応中心の電荷分離経路解析, 藤田 貴敏, 第 13 回日本光合成学会年会, 名古屋, 2023.6.3 (Poster)
- 4) Pump-Probe ESA Anisotropy による PSII 反応中心の電荷分離経路解析, 藤田 貴敏, 量子生命科学会 第 5 回大会, 大阪, 2023.5.18 (Poster)
- 5) 大規模励起状態計算を用いた有機薄膜太陽電池の電荷分離ダイナミクスと時間分解分光, 藤田 貴敏, ELSEES 研究会, 東京, 2023.5.13 (Oral)

##### 学術論文

- 6) Manipulation of photosynthetic energy transfer by vibrational strong coupling, Jun-Yu Dong, Yasutaka Kitahama, Takatoshi Fujita, Motoyasu Adachi, Yasuteru Shigeta, Akihito Ishizaki, Shigenori Tanaka, Ting-Hui Xiao, Keisuke Goda, The Journal of Chemical Physics, vol. 160, no 4, 045101, 2024.1.28
- 7) Ab Initio Study of Charge Separation Dynamics and Pump-Probe Spectroscopy in the P3HT/PCBM Blend, Takatoshi Fujita, Takeo Hoshi, The Journal of Physical Chemistry B, vol. 127 no. 25, 7616-7623, 2023.8.28

# 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

## (1) 利用目的:

重粒子線癌治療は他の放射線治療に比べて少ない線量で治療ができるため、体に優しい治療法と言われ世界中に普及している。しかしながら、何故、少ない線量で治療できるのかは、よくわかっていない。その要因を明らかにするため、重粒子線照射で生じるプラズマの影響に注目して研究を行った。このプラズマは、入射粒子線の軌道付近の局所領域の線量を大きくするというモデルがある。さらに、大きな線量の場合、細胞を殺傷する割合を大幅に増加させるという LQ モデルもあるが、プラズマの影響による線量の増大を考慮した LQ モデルは、重粒子線照射による細胞の生存率の観測の再現に成功し、放医研（現 QST 病院）での重粒子線癌治療の治療計画に導入された。しかしながら、このような実用的な医療応用があるにもかかわらず、このプラズマは大雑把な理論研究しか行われておらず、プラズマの生成機構や細胞に与える影響など不明な点が多い。そこで、このプラズマ生成過程をシミュレーションで模擬し、細胞に与える影響等を解明することを目指した研究を行っている。このシミュレーションでは、従来のモデルで考慮されている二次電子の運動に加えて、重粒子線衝突電離で生じる分子イオンを考慮し、この分子イオンが局所的に高密度に生成されるため、これらのイオンが作る合成電場が二次電子の運動に影響し、プラズマ生成に繋がるのではないかと考えた[1]。その結果、シミュレーションでは知る限り、世界で初めて重粒子線照射でプラズマを生成させることに成功した。さらに、このシミュレーションは、プラズマの影響が大きいことを示唆した観測例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が確認できた[1]。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できるが、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た。

重イオン照射の研究では生成したイオンは直線上（一次元）に分布する。それに対してイオンの分布が三次元に広がった場合、プラズマの生成過程、動径線量はどのように変化するのかに興味を持ち、クラスターイオン（いくつかの原子で構成されるイオン）の研究を行うことにした。まず、動径線量の研究から始めた。その成果[2]を以下に示す。

## (2) 利用内容・結果:

クラスターイオンを構成するイオンの数( $n$ )、イオン間距離( $R$ )、イオン衝突電離断面積( $\sigma$ )と動径線量との関係を明らかにする。シミュレーションを単純化するため、図 1 (a)のように、クラスターイオンを構成する  $n$  個の原子を半径  $R$  の正  $n$  角形の位置に配置し、図 3(b)のように照射する。図 2 に  $n\sigma = 1.2 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$  とした場合の様々な  $n$  と  $R$  に対する動径線量と入射イオンの中心からの距離( $r$ )[図 1(a)参照]の関係を示す。ここで、 $n\sigma$ が一定のとき、クラスターイオン照射で標的中に生成する分子イオンの数は一定となる。また、 $n = 1$  は一つのイオンが  $r = 0 \text{ nm}$  を  $\sigma = 1.2$



$\times 10^{-15} \text{ cm}^2$  で照射する場合を表す。この図から以下のことがわかった。(i)動径線量は  $n$  にほとんど依存しない。(ii) $R = 0.2 \text{ nm}$  では動径線量は  $n \geq 2$  と  $n = 1$  とではほぼ、同じ値をとる。(iii)  $R = 0.5 \text{ nm}$  のときも、 $n \geq 2$  に対する動径線量は  $r \sim 0 \text{ nm}$  であるが、 $n \geq 2$  に対する動径線量は  $n = 1$  に対するものより、 $r \sim 0 \text{ nm}$  付近でほんの少し小さくなる。(iv)  $R \geq 1 \text{ nm}$  に対しては、動径線量の最大値が  $r \sim R$  に現れ、また、 $r \sim 0 \text{ nm}$  では一定値をとることがわかった。(v) $R = 1 \text{ nm}$  では、 $r = 0 \text{ nm}$  付近と  $r \sim R$  とで、動径線量はほぼ、同じ値になったのに対して  $R = 2 \text{ nm}$  では  $r = 0 \text{ nm}$  付近の動径線量は  $r \sim R$  での動径線量よりも小さくなることわかった[2]。

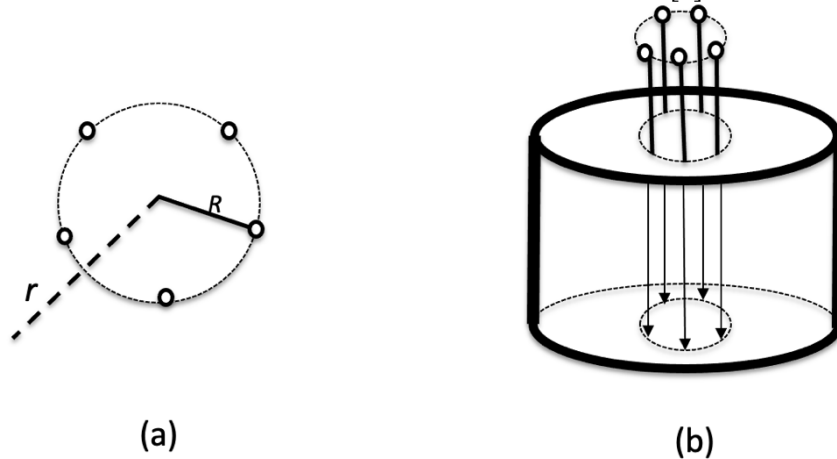


図1  $n = 5$  の場合の(a)正  $n$  角形のクラスターイオンを構成する原子の位置(○の記号で表す)。また、正  $n$  角形の中心からの距離で定義する。(b)クラスターイオンを構成する原子の標的中の軌道。

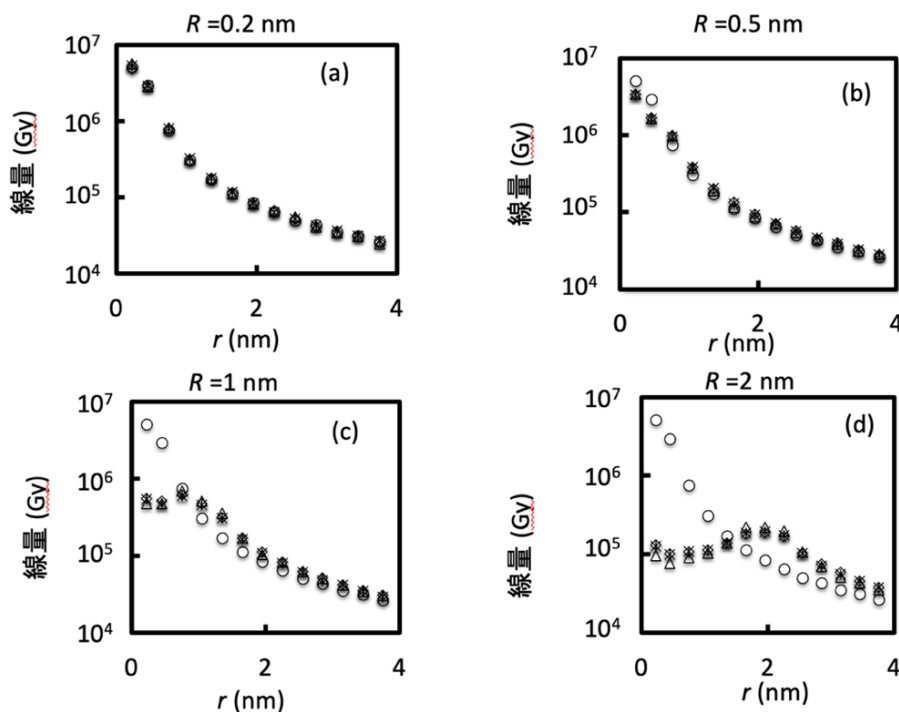


図2 様々な  $n$  と  $R$  に対する動径線量と入射イオンの中心からの距離( $r$ )の関係。ただし、 $n\sigma = 1.2 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$  とした。 $R =$ (a) 0.2、(b) 0.5、(c) 1、(d) 2 nm。 $n = 1, 2, 3, 6$  はそれぞれ、○、△、×、◇の記号で表す。

### (3) 今後の利用予定:

これまでは、1つの重イオンで熱平衡状態とプラズマの生成との関係およびクラスターイオンの動径線量等を調べた。今後は、2つの研究を組み合わせた研究、すなわち、クラスターイオン照射での二次電子の熱平衡状態とプラズマの生成との関係を調べる。

### 参考文献

- [1] K.Moribayashi, Jpn. J. Applied Phys. 59 SH0801 (2020)
- [2] K. Moribayashi, Radiat. Phys. Chem., 208, 110870/1-7 (2023)

### (4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 学会発表

- 1) 単色 X 線ナノサイズ領域照射で生じる光電子の加熱効果, 森林 健悟, 日本物理学会 2024 年春季大会, オンライン, 2024.3 (Oral)
- 2) 放射線の局所領域照射で生じる自由電子による加熱とその医療・産業応用, 森林 健悟, 「プラズマの分光診断と原子分子素過程研究フロンティア」研究会, 土岐市, 2023.12 (Oral)
- 3) Development of a simulation model aiming to study plasma formation and thermalization of secondary electrons in heavy ion irradiation, K. Moribayashi, 21st International Conference on Radiation Effects in Insulators (Rei-21), Fuoka0-city, Japan, 2023.9 (Poster)
- 4) Radial dose simulations in the irradiation of cluster ions, K. Moribayashi, Conference on Computer Physics, International Union of Pure and Applied Physics (IUPAP), Kobe-city, Japan, 2023.7 (Poster)

#### 学術論文

- 5) Multi-Scale Simulations Aiming To Advance Heavy Ion Beam Cancer Therapy, "K. Moribayashi, H. Matsubara, Y. Yonetani, N. Shikazono", API conference proceedings, vol.2756, 030001/1-8, 2023.6

量子技術基盤研究部門

## 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

高崎量子応用研究所

量子バイオ基盤研究部 RI イメージングプロジェクト

### (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の軌道や位置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、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。利用者らは二次電子制動放射線を情報源とした粒子線の可視化研究を行っている。二次電子制動放射線は連続的なエネルギー分布 (30~100 keV) をもつ光子で、エネルギーが低いため測定が容易であり、発生量も格段に大きく感度の高いイメージング装置を実現できる。また、即発性であるため血流などによる発生源移動に付随する課題も原理的に生じない。

今年度は、二次電子制動放射線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、臨床線量に近い入射粒子数における mm オーダーの飛程変化の検出可能性について、シミュレーションによる評価を実施した。

### (2) 利用内容・結果:

人体頭部ファントムを想定し、複雑形状標的に対応したシミュレーションソフトウェアの改変を進めたが、改変後も想定を上回る計算時間が必要となることが判明したため、標的を直方体形状のアクリル標的に変更し、臨床において用いられている炭素イオン入射粒子数における飛程推定精度を正確に評価するためのシミュレーションスタディを実施した。

アクリル標的に、飛程が 44.7 mm から 96.1 mm まで、おおよそ 4.3 mm ずつ異なる 13 種類の炭素イオンビームを入射し、標的の側面に配置した X 線カメラにより、二次電子制動放射線の測定により得られるビーム画像を、PHITS を用いたモンテカルロシミュレーションによって計算した。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。カメラは鉛とタングステンによる放射線遮蔽体と IP から構成した。電子・光子輸送計算の下限値は 10 keV に設定し、IP に付与されたエネルギーを 2 次元ヒストグラムとして記録し、シミュレーション後に 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た。

統計精度を無視できる画像を作成するために、まず、入射粒子数を  $10^{10}$  に設定し、それぞれの飛程についてのビーム画像を作成した。得られたビーム画像を用いて、モンテカルロ法によって入射粒子数  $10^7$ 、 $10^8$  個の 2 種類の入射粒子数に対応するイメージを、各飛程についてそれぞれ 1000 枚ずつ作成した。最後に、作成した画像を用いて飛程推定における不確かさを評価した。その結果、入射粒子数  $10^7$ 、 $10^8$  個に対し、それぞれ、1.4 mm と 4.4 mm の飛程推定の不確かさを持つことが明らかとなった。得られた結果は、査読付き論文誌 (*Japan. J. Appl. Phys.*) に投稿し

査読中である。

### (3) 今後の利用予定:

人体頭部ファントムを標的として想定したシミュレーション結果については、少数の飛程変化についての計算結果をまとめ、査読付き論文 (*Trans. Radiat. Plasma Med. Phys.*) に投稿した。今後、計算時間短縮の工夫を施した上で、飛程変化の幅をより細かく変更した計算を実施する。

### (4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 学会発表

(口頭発表)

- 1) Simulation study on uncertainty evaluation of estimated range shifts in carbon ion therapy using Secondary Electron Bremsstrahlung, Tsuda Michiko, Yamaguchi Mitsutaka, Yabe Takuya, Nagao Yuuto, Kawachi Naoki, Sakai Makoto (Gunma Univ.), Kamiya Tomihiro (Gunma Univ.), Watabe Hiroshi, PET 秋の学校 in 東北 2023, 東北大学, 2023-12-02
- 2) イメージングプレートを用いた粒子線の可視化, 津田 路子, 山口 充孝, 矢部 卓也, 佐鳥 凌太 (群馬大), 長尾 悠人, 河地 有木, 渡部 浩司, 酒井 真理 (群馬大), 加田 渉 (群馬大), 神谷 富裕 (群馬大), 第 60 回アイソトープ・放射線研究発表会, 公益社団法人日本アイソトープ協会, 2023-07-06
- 3) 重粒子線治療ビームの二次電子制動放射線計測による 3 次元画像化, 津田 路子, 山口 充孝, 矢部 卓也, 長尾 悠人, 河地 有木, 渡部 浩司, Symposium on Advanced Medical Imaging Technology for Young Investigators (SAMIT) 2023, 一般社団法人 日本医用画像工学会, 2023-09-30
- 4) A multi-modal imaging system to simultaneously measure prompt gamma photons, prompt X-rays and induced positrons during proton beam irradiation, Yamamoto Seiichi (Waseda Univ.), Watabe Hiroshi, Nakanishi Kohei (Nagoya Univ.), Yabe Takuya, Yamaguchi Mitsutaka, Kawachi Naoki, Kamada Kei (Tohoku Univ.), Yoshikawa Akira (Tohoku Univ.), Yamashita Tomohiro (Kobe Proton Center), Kobayashi Yusuke (Kobe Proton Center), Akagi Takashi (Hyogo Ion Beam Medical Center), Kataoka Jun (Waseda Univ.), The 3rd Annual Conference of the Asia-Oceania Particle Therapy Co-Operative Group (PTCOG-AO 2023), The Particle Therapy Co-Operative Group (PTCOG), 2023-11-24

- 5) Simulation evaluation of range-estimation uncertainty for therapeutic carbon-ion beams by measuring secondary electron bremsstrahlung with a large-pinhole X-ray camera, Tsuda Michiko, Yamaguchi Mitsutaka, Yabe Takuya, Nagao Yuuto, Kawachi Naoki, Watabe Hiroshi, Tomihiro Kamiya (Gunma Univ.), 第 125 回日本医学物理学会学術集会, (公社) 日本医学物理学会, 2023-04-14

(ポスター発表)

- 6) イメージングプレートによる重粒子線画像化シミュレーション, 津田 路子, 山口 充孝, 矢部 卓也, 長尾 悠人, 河地 有木, 酒井 真理 (群馬大), 加田 渉 (東北大), 神谷 富裕 (群馬大), 渡部 浩司, QST 高崎サイエンスフェスタ 2023, 国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構 (QST) 量子技術基盤研究部門 高崎量子応用研究所, 2023-12-06

- 7) Development of a GAGG prompt gamma camera and simultaneous imaging with prompt X-rays during irradiation by proton beams at clinical dose level, Yamamoto Seiichi (Waseda Univ.), Tomohiro Yamashita (Kobe Proton Center), Kobashi Yusuke (Kobe Proton Center), Yabe Takuya, Nakanishi Kohei (Nagoya Univ.), Akagi Takashi (Hyogo Ion Beam Medical Center), Yamaguchi Mitsutaka, Kawachi Naoki, Kei Kamada (Tohoku Univ.), Yoshikawa Akira (Tohoku Univ.), Kataoka Jun (Waseda Univ.), 2023 IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference, IEEE, 2023-11-08

- 8) Simulation evaluation of range-estimation uncertainty for therapeutic carbon-ion beams by measuring secondary electron bremsstrahlung, Tsuda Michiko, Yamaguchi Mitsutaka, Yabe Takuya, Nagao Yuuto, Kawachi Naoki, Sakai Makoto (Gunma Univ.), Kamiya Tomihiro (Gunma Univ.), Watabe Hiroshi, 2023 IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference, IEEE, 2023-11-08

学術論文

- 9) A triple-imaging-modality system for simultaneous measurements of prompt gamma photons, prompt x-rays, and induced positrons during proton beam irradiation, Yamamoto Seiichi (Waseda Univ.), Watabe Hiroshi, Nakanishi Kohei (Nagoya Univ.), Yabe Takuya, Yamaguchi Mitsutaka, Kawachi Naoki, Kamada Kei (Tohoku Univ.), Yoshikawa Akira (Tohoku Univ.), Miyake Masayasu (Tohoku Univ.), Tanaka S. Kazuo (Waseda Univ.), Kataoka Jun (Waseda Univ.), Phys. Med. Biol., 69, 055012, 2024-02, DOI:10.1088/1361-6560/ad25c6

- 10) Optimization of a YAP(Ce) prompt X-ray camera for imaging with spot scanning proton beams at clinical dose levels, Yamamoto Seiichi (Waseda Univ.), Yamashita Tomohiro (Kobe Proton Center), Kobayashi Yusuke (Kobe Proton Center), Yabe Takuya, Akagi Takashi (Hyogo Ion Beam Medical Center), Yamaguchi Mitsutaka, Kawachi Naoki, Kamada Kei (Tohoku Univ.), Yoshikawa Akira (Tohoku Univ.), Kataoka Jun (Waseda Univ.), *Journal of Instrumentation (JINST)*, 18, T12005, 2023-04, DOI:10.1088/1748-0221/18/12/T12005
- 11) Simultaneous imaging of prompt gamma photons and prompt X-rays during irradiation of proton beams to human torso phantom at clinical dose level, Yamamoto Seiichi (Waseda Univ.), Yamashita Tomohiro (Kobe Proton Center), Kobashi Yusuke (Kobe Proton Center), Yabe Takuya, Akagi Takashi (Hyogo Ion Beam Medical Center), Yamaguchi Mitsutaka, Kawachi Naoki, Kamada Kei (Tohoku Univ.), Yoshikawa Akira (Tohoku Univ.), Yokokawa Hiromu (Waseda Univ.), Sagisaka Mayu (Waseda Univ.), Kataoka Jun (Waseda Univ.), *Journal of Instrumentation (JINST)*, 18, P07046, 2023-07, DOI:10.1088/1748-0221/18/07/P07046
- 12) Simultaneous imaging of luminescence and prompt X-rays during irradiation with spot-scanning proton beams at clinical dose level, Yamamoto Seiichi (Waseda Univ.), Yamashita Tomohiro (Kobe Proton Center), Kobashi Yusuke (Kobe Proton Center), Yabe Takuya, Takashi Akagi (Hyogo Ion Beam Medical Center), Yamaguchi Mitsutaka, Kawachi Naoki, Kamada Kei (Tohoku Univ.), Kataoka Jun (Waseda Univ.), *Biomedical Physics & Engineering Express*, 2023-06, DOI:doi.org/10.1088/2057-1976/acdf61
- 13) Hybrid imaging of prompt x-rays and induced positrons using a pinhole gamma camera during and after irradiation of protons, Yamamoto Seiichi (Waseda Univ.), Watabe Hiroshi, Nakanishi Kohei (Nagoya Univ.), Yabe Takuya, Yamaguchi Mitsutaka, Kawachi Naoki, Kamada Kei (Tohoku Univ.), Yoshikawa Akira (Tohoku Univ.), Islam Md Rafiqul (Tohoku Univ.), Miyake Masayasu (Tohoku Univ.), S Kazuo Tanaka (Waseda Univ.), Kataoka Jun (Waseda Univ.), *Physics in Medicine & Biology*, 68(11), 115015, 2023-05, DOI:10.1088/1361-6560/acd2a2
- 14) Prompt X-ray imaging during irradiation with spread-out Bragg peak (SOBP) beams of carbon ions, Yamamoto Seiichi (Waseda Univ.), Yabe Takuya, Akagi Takashi (Hyogo Ion Beam Medical Center), Yamaguchi Mitsutaka, Kawachi Naoki, Kamada Kei (Tohoku Univ.), Yoshikawa Akira (Tohoku Univ.), Kataoka Jun (Waseda Univ.), *Physica Medica*, 109, 102592, 2023-04, DOI:10.1016/j.ejmp.2023.102592

- 15) Development of a list-mode data acquisition system for prompt X-ray imaging during irradiation with carbon-ions, Yamamoto Seiichi (Waseda Univ.), Yabe Takuya, Akagi Takashi (Hyogo Ion Beam Medical Center), Yamaguchi Mitsutaka, Kawachi Naoki, Kamada Kei (Tohoku Univ.), Yoshikawa Akira (Tohoku Univ.), Kataoka Jun (Waseda Univ.), *Journal of Instrumentation (JINST)*, 18, P04025, 2023-04, DOI:10.1088/1748-0221/18/04/P04025
  
- 16) Non-invasive range-shift measurement for therapeutic carbon-ion beams by detecting SEB with a CdTe imager, Tsuda Michiko, Yamaguchi Mitsutaka, Toyokawa Hidenori, Yabe Takuya, Nagao Yuuto, Kawachi Naoki, Satori Ryota (Gunma Univ.), Sakai Makoto (Gunma Univ.), Kada Wataru (Gunma Univ.), Kamiya Tomihiro (Gunma Univ.), *Journal of Instrumentation (JINST)*, 18, C04008, 2023-04, DOI:10.1088/1748-0221/18/04/C04008



## 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の高精度化

畑 昌育

関西光量子科学研究所

量子応用光学研究部 レーザー駆動イオン加速開発プロジェクト

### (1) 利用目的:

平成 28 年 12 月に平野理事長（当時）の下、国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構（量研）が中心になって株式会社東芝、株式会社日立製作所、住友重機械工業株式会社、三菱電機株式会社（現在は撤退）の 5 者間で包括協定を結び、第 5 世代重粒子線がん治療器（平野前理事長から「量子メス」と命名された）の開発が始まった。10 年間で、超電導技術とレーザー加速技術を利用して現在の重粒子線がん治療装置を飛躍的に小型化、低価格化することで「がん死ゼロ社会」の実現に貢献することが目標になっている。

この包括協定発足にも関連し、平成 29 年度には、文部科学省の未来社会創造事業大規模プロジェクト型として「レーザー駆動による量子ビーム加速器の開発と実証」が採択された。本プロジェクトはレーザーによる荷電粒子加速器の実用化を目指すもので、パワーレーザーの開発やレーザー電子加速器の開発に加え、出口として量子メスの入射器開発を想定したレーザー駆動イオン加速器開発を含んでいる。レーザー駆動イオン加速器の開発は量研・放射線医学研究所（放医研）（現在は量子医科学研究所）の物理工学部と量研・関西光科学研究所（関西研）（現在は関西光量子科学研究所）・木津のチームが連携し、明確な目標を設定し概念実証を目指している。目標スペックは放医研（当時）との議論により明確化されており、2 秒間に 4 MeV/u の炭素イオンが 1 %バンド幅で  $10^9$  個、後段に設置予定の超伝導シンクロトロン加速器に入射できることである。既に関西研・木津の J-KAREN-P レーザーを用いて  $10^6$  個/msr の炭素線の発生を確認したものの、これまでに行ってきた実験的研究は最大加速エネルギーを引き上げることに主眼を置いたものであった。今後は、むしろ、これまで得られた知見をフルに活用し、如何に多くの炭素線をより狭い立体角に、しかもより少ない励起レーザーエネルギーで実現するかを、可及的速やかに明確にすることが主眼となる。

この研究開発を実験だけで行うことは、時間的及び労力的に困難であり、コンピュータシミュレーションにより、適切な条件を事前に得ておくことが非常に重要である。本研究開発では、決められた目標スペックを現実的なレーザー装置で実現しなければいけないため、ある程度コンピュータシミュレーションで予測し、実験でその可能性を確かめた上で、概念実証のための実験装置を相補的に構築していくことが求められる。これにより量子メス開発プロジェクトの推進を大幅に加速できる。

本研究に関連する研究課題は平成 30 年 10 月より開始され、令和 3 年度まで実施された。ここまでの研究で、求められる性能を満たすイオン生成は可能であることと、それに必要なレーザーのエネルギーをシミュレーションで示した。また、使用レーザーの条件である、集光径とパルス幅の違いによる生成イオン特性の違いと、レーザー入射角度の違いの検討結果を示した。

令和 4 年度からは、本研究課題代表者（畑昌育）を主担当者として新しく研究課題を設定し

直し、関連研究において考慮されていなかった衝突・電離過程を含んだシミュレーションを行い、シミュレーション予測の高精度化を図っている。これまでのシミュレーションでは、十分に高強度のレーザーを想定していたために、ターゲットとしては完全電離の炭素イオンを仮定していた。また、十分に薄い炭素ターゲットを採用していたことから、無衝突プラズマを仮定していた。しかし、レーザー加速器の実機作成においては、取り扱い易さ、連続運用での安定性等の理由から比較的厚い薄膜ターゲットを用いることも考えられている。さらに、炭素薄膜だけでなく、金属に炭素を付着させたターゲットの検討も予定されている。このような背景から、

- ・サブミクロンから十数ミクロンまでの厚みの炭素ターゲット
- ・金属に炭素を付着させたミクロンオーダーのターゲット

といった、衝突過程が影響を与える可能性のある厚いターゲット、完全電離しない金属を含むターゲットについて加速イオンの予測を行い、レーザー条件の検討を行う必要がある。そこで、これらのターゲットを想定して、衝突・電離過程を含んだシミュレーションを実施する。

## (2) 利用内容・結果:

令和5年度は、炭素ターゲットを想定して三次元相対論的電磁粒子シミュレーションを行い、加速炭素イオンの定量評価を行った。その際、計算コストの問題から、固体密度ではなく一桁程度低い密度を最大密度としてシミュレーションを行った。また、1ミクロンという比較的薄いターゲットを採用したことから衝突過程を無視した。さらに、令和4年度に行った電離・衝突込みの二次元計算の結果を元にターゲットが集光点付近で六価まで電離するレーザー強度に設定することで、三次元計算では最初からターゲットを六価炭素イオンとしておくこととした。このようにして計算量を大幅に低減することで、加速炭素イオン特性の定量評価を行うことができた。レーザーは、波長1 $\mu\text{m}$ 、エネルギー742 mJ、ピーク強度 $1.368 \times 10^{20} \text{ W/cm}^2$ 、スポット径(半値全幅)3.0 $\mu\text{m}$ 、パルス幅(半値全幅)50 fsで、時間的にも空間的にもガウシアン強度分布を持つものとした。ターゲットは厚み1 $\mu\text{m}$ の六価炭素プラズマである。以上の条件で、レーザーをターゲットに垂直入射させ、加速炭素イオンのスペクトルを計測した結果を図1に示す。

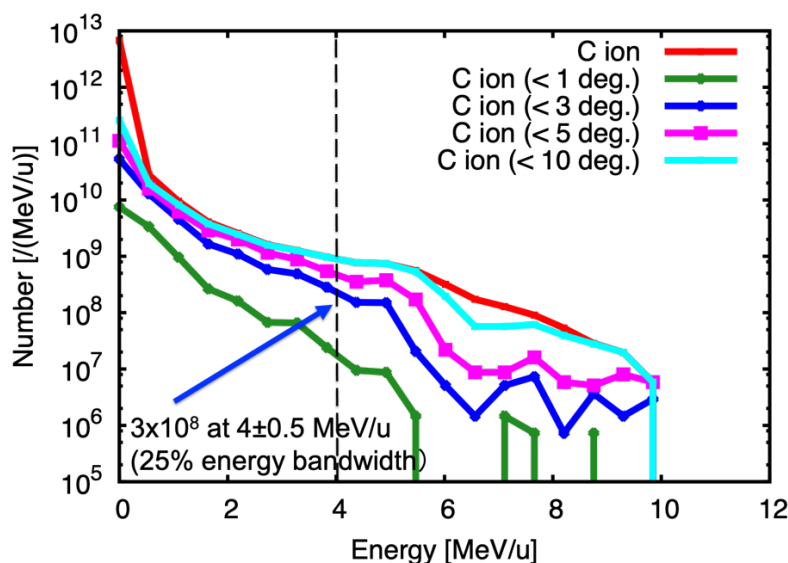


図1. 加速炭素イオンのスペクトル。赤線はすべての炭素イオン、緑、青、紫、水色はそれぞれ捕集角1、3、5、10度とした場合のスペクトルを示す。黒点線は量子メスに必要な4 MeV/uのエネルギーを示している。

赤線は、すべてのスペクトルを、緑、青、紫、水色は、それぞれ捕集角を1、3、5、10度とした場合のスペクトルを示す。ここで、捕集角はターゲットの裏面垂直方向とのなす角である。量子メスのレーザー駆動イオン入射器では、1 shot あたり  $10^8$  個 (10 Hz 運転で1秒で  $10^9$  個に相当) の4 MeV/u の六価炭素イオンが要求されているが、位相回転空洞でエネルギーバンド幅を圧縮するため、生成時点では10%のエネルギーバンド幅で良い。したがって、捕集角3度であれば、25%エネルギーバンド幅で  $3 \times 10^8$  個、つまり、10%エネルギーバンド幅で  $1.2 \times 10^8$  個が得られ、量子メス用イオン入射器の要求を満たしていることがわかる。しかしながら、この結果は、比較的薄い純粋な炭素ターゲットを前提としている上、固体密度よりも低い密度で計算したものであるため、より正確なシミュレーションによる検証・追試が必要である。

### (3) 今後の利用予定:

これまでの研究によって、4 MeV/u の六価炭素イオンを十分な量生成するためのレーザーおよびターゲットの条件を求めることができた。今後は、計算量低減のために無視していた、衝突・電離過程の影響について調べるとともに、ターゲット密度を実際の密度、すなわち固体密度として計算した場合の影響についても調べる。また、炭素蒸着金属ターゲットの場合に、加速炭素イオンの特性がどう変わるかについても調べる予定である。これらの計算はどれも計算量の多い計算であるため、大量の計算資源が必要となる見込みである。

### (4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 学会発表

- 1) 量子メスプロジェクトのためのレーザーイオン入射器のレーザーパラメータの見積もり, 畑昌育, 第40回プラズマ・核融合学会年会, 岩手, 2023年11月 (Oral)
- 2) 量子メスプロジェクトに向けたレーザーイオン入射器シミュレーションの進展, 畑昌育, 第20回日本加速器学会年会, 千葉県, Aug-23 (Poster)
- 3) Estimation of laser parameters for generating enough number of energetic heavy ions for applying as the injector of the next generation heavy ion synchrotron accelerator, 畑昌育, AAPPs-DPP2023, Nagoya, Japan, Nov-23 (Oral)
- 4) Numerical simulation of laser ion injector for quantum scalpel project, 畑昌育, Q-BASIS 2023, Suita, Japan, Apr-23 (Poster)

# 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、山田俊介、Venkat Prachi

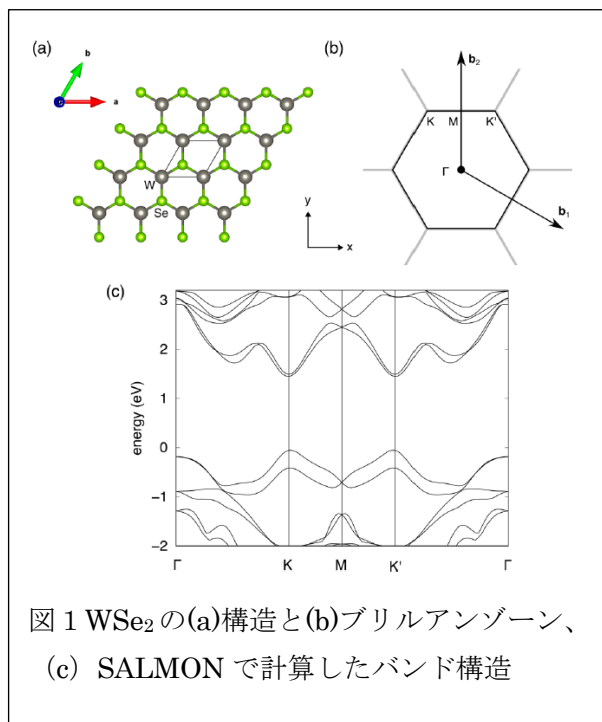
関西光量子科学研究所

量子応用光学研究部 超高速電子ダイナミクス研究プロジェクト

## (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。また、近年ではフェムト秒レーザーによる高精度非熱加工が注目を浴びており物質と光の非線形な相互作用の重要性は増している。本課題では第一原理計算の手法を用いて薄膜材料の非線形相互作用を解析し、光・電子・スピンド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:



単層物質は様々な新奇物性を持つものが多く盛んに研究がされている。特に最近では単層遷移金属ダイカルコゲナイト (TMDC) が注目されている。単層 TMDC はエネルギー的に等価な二つのバレー、K と K' バレー、を持つ (図 1 (c))。この二つのバレーは結晶の対称性の破れからスピン分裂がそれぞれ逆転しており、かつバレー位相も左右逆方向に回転しているという特性を持つ。このため左右円偏光を用いて K または K' バレーを選択的に励起して運動量の違うスピン流を作ることができる。このスピン流は逆方向のバレー位相を持つため異常ホール効果により区別ができる。このことからエレクトロニクス、スピントロニクスに続く第 3 の技術「バレート

ロニクス」を可能とする材料になると期待されている。

今回我々は単層 WSe<sub>2</sub> (図 1 (a) (b)) をターゲットとしてバレー選択励起の励起効率を光の波長より早く操作することができないか数値実験での実証を行うことを目的として計算を行った。これまでの超高速現象に関する研究からレーザー照射中の固体電子状態は光子をまとったドレスト状態になり、その状態間の干渉により光の電場周期より早い物性変化が起きていることが分かっている [T. Ohtobe, et. al., Phys. Rev. B 93, 045124 (2016) など]。これは時間分解動的 Franz-

Keldysh 効果(Tr-DFKE)と言われる現象であり一般には直線偏光 pump と pump 光の電場周期より短いパルス幅の直線偏光 probe レーザーにより観測される。本研究では、KK' バレーでの Tr-DFKE を probe レーザーを円偏光とすることで観測可能である事と、超高速でのバレー励起操作が可能であることを示すことを目的としている。

図 2 は左右円偏光 probe による Tr-DFKE 信号を光学伝導率変化の probe 時刻依存性という形で計算したものである。光の吸収は伝導率の実部に現れる。まず図 2 (a) (b)はそれぞれ右左円偏光の吸収効率を横軸時刻、縦軸光子エネルギーで示したものである。バンドギャップは 1.5eV である。振動周期と電場周期が比較しやすいように図 2 (d)に光電場を描いた。バンドギャップ以上では電場と同じ周期で吸収効率が変化している事が分かる。さらに右及び左円偏光では振動の位相が反転している。これは K と K' バレーの光励起効率が位相反転して振動をしていることを示している。図 2 (c)は(a)と(b)の差を取ったものであり、振動の位相差がよく分かる。

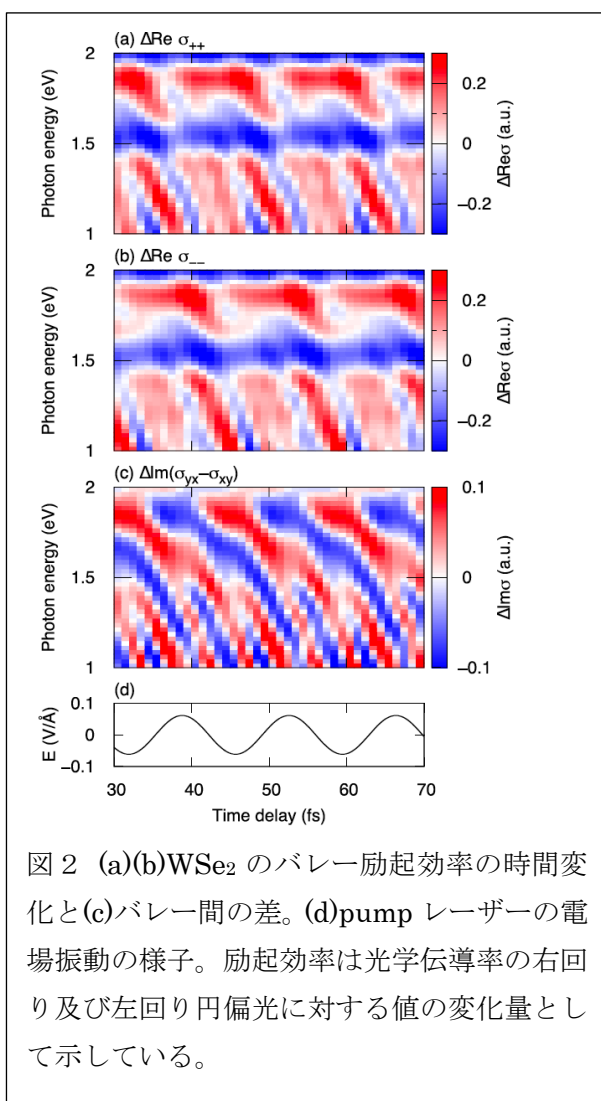


図 2 (a)(b)WSe<sub>2</sub> のバレー励起効率の時間変化と(c)バレー間の差。(d)pump レーザーの電場振動の様子。励起効率は光学伝導率の右回り及び左回り円偏光に対する値の変化量として示している。

光吸収に差ができるのは分かった。しかし実際の実験の多くは異常ホール電流を計測することでバレー偏極を観測している。probe 光もまた励起光とみなした時、全ての光が通過した後のキャリア数の KK' バレー間には差ができており、異常ホール電流での検出が可能であるはずである。それを示したのが図 3 である。図 3 (a)には Pump のみの場合と左右円偏光をさらに照射した時の KK' バレー間のキャリア数差を示した。バレー選択励起が起きている事と、さらにそれが電場振動の周期で変化している事が分かる。もう少し分かりやすいように平均値からの変化量にしたのが図 3 (b)である。K と K' バレーのキャリア数が完全に逆位相で振動している事が分かる。以上のことからバレー選択的な Tr-DFKE を用いることでバレー励起確率を超高速に変化させる事が可能な上、K と K' バレーで位相反転した振動を作り出す事が可能であることを示す事ができた。これら成果は Physical Review B に掲載された [S. Yamada, K. Yabana, and T. Otake, Phys. Rev. B 108, 035404 (2023)]。

本報告では触れないがこの他にシリコン薄膜など微小材料のレーザー加工におけるレーザー光の干渉効果についても解析し論文として発表している。[P. Venkat and T. Otake, JLMN 18, 196

(2023)]

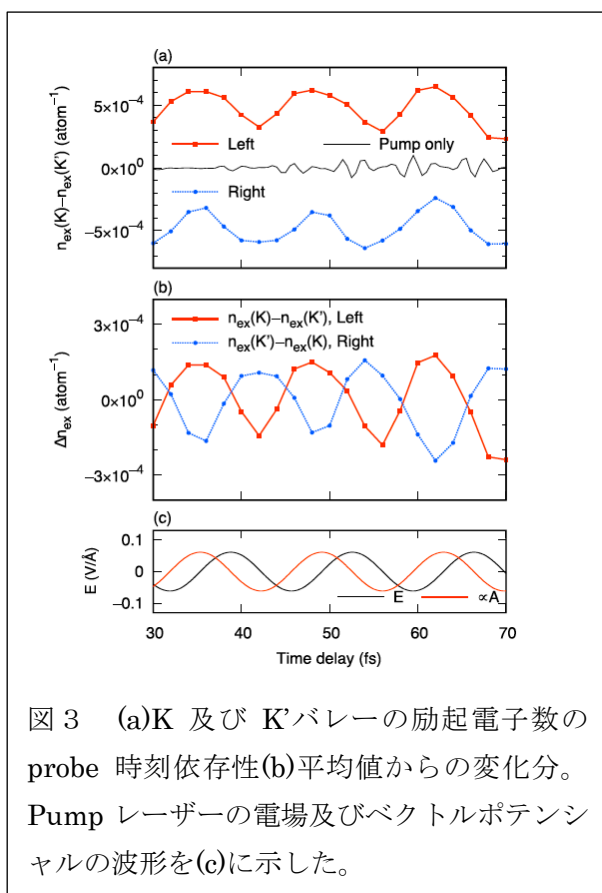


図3 (a)K 及び K'バレーの励起電子数の probe 時刻依存性(b)平均値からの変化分。Pump レーザーの電場及びベクトルポテンシャルの波形を(c)に示した。

### (3) 今後の利用予定:

これからは更に2次元物質のヘテロ構造や遷移金属の励起過程、10万原子に及ぶ大規模系の計算手法開発などを行なっていく。計算規模が現在の数倍から10倍以上となるためSGI8600では実行が難しくなってきた。このため主な計算は富岳へと移行し、後処理など補助的解析に利用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

(口頭発表)

- 1) Si 表面におけるレーザー加工効率の電子温度依存性に関する第一原理計算, 山田 俊介, 乙部 智仁, 応用物理学会春季学術講演会, 応用物理学会, 2024-03-25
- 2) Q-LEAP 領域会議での講演, 乙部 智仁, Q-LEAP 次世代レーザー領域第 10 回領域会議, Q-LEAP 次世代レーザーHQ, 2023-12-14
- 3) WSe<sub>2</sub> 単層膜における動的 Franz-Keldysh 効果を用いたバレー偏極励起のサブフェムト秒制御に関する第一原理計算, 山田 俊介, 矢花 一浩, 乙部 智仁, 応用物理学会秋季学術講演会, 応用物理学会, 2023-09-19
- 4) Study of laser excitation and damage threshold in silicon using three-temperature model, Prachi Venkat, Otobe Tomohito, The 24th International Symposium on Laser Precision Microfabrication, Japan Laser Processing Society (JLPS), 2023-06-13

- 5) Three-Temperature Modeling of Laser Excitation in Silicon and Parametric Dependence of Damage Threshold, Prachi Venkat, Otobe Tomohito, CLEO-Europe, 2023, OPTICA, 2023-06-26
- 6) Effect of laser and target parameters on excitation dynamics and damage in silicon, Prachi Venkat, Otobe Tomohito, Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO), OPTICA, 2023-05-07

(ポスター発表)

- 7) First-principles calculations for electron dynamics in transition metal dichalcogenides, Yamada Shunsuke, Yabana Kazuhiro, Otobe Tomohito, 第15回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム, 筑波大学 計算科学研究センター, 2023-10-03
- 8) First-principles TDDFT software SALMON and its applications: Numerical experiments for high-order harmonic generation in solids, Yamada Shunsuke, Yabana Kazuhiro, Otobe Tomohito, CCP2023, 国際純粋・応用物理学連合, 2023-08-05
- 9) Ab initio calculations for valley-selective dynamical Franz-Keldysh effect in monolayer WSe<sub>2</sub>, Yamada Shunsuke, Yabana Kazuhiro, Otobe Tomohito, The 2023 CLEO/Europe-EQEC conferences, CLEO/Europe Steering Committee, 2023-06-28
- 10) Numerical experiments for exploring propagation effects in high-harmonic generation from dielectric thin films, Yamada Shunsuke, Otobe Tomohito, David Freeman, Anatoli Kheifets, Kazuhiro Yabana, The 2023 CLEO Conference, American Physical Society, IEEE Photonics Society, Optical Society, 2023-05-10

(招待発表)

- 11) Laser-Matter interaction simulation by SALMON, Otobe Tomohito, CMD ワークショップ, CMD 事務局, 2024-02-23
- 12) Si 表面におけるレーザー加工効率の電子温度依存性に関する第一原理計算, 山田 俊介, 乙部 智仁, 第7回 RIKEN-RAP and QST-KPSI Joint Seminar, 理化学研究所、量子科学技術研究開発機構, 2024-01-23
- 13) 3 温度モデル計算を用いたパルスレーザー加工現象の解明, 乙部 智仁, 第100回レーザー加工学会, レーザ加工学会, 2024-03-19

- 14) ミクロ及びマクロシミュレーションから探る半導体材料レーザー加工の学理, 乙部 智仁, 第1回多元技術融合光プロセス研究会, 一般財団法人 光産業技術振興協会, 2023-07-24
- 15) First-principles calculations for ultrafast and nonlinear dynamics of light pulses and electrons, Yamada Shunsuke, Otake Tomohito, AAPPS-DPP2023, Association of Asia Pacific Physical Societies, 2023-11-16
- 16) WSe<sub>2</sub>単層膜における動的 Franz-Keldysh 効果を用いたバレー偏極励起の超高速制御, 山田 俊介, 矢花 一浩, 乙部 智仁, OPTO2023, QST 関西光量子科学研究所、大阪大学レーザー科学研究所, 2023-06-14
- 17) Quantum and semiclassical simulations of laser excitation processes, Otake Tomohito, 11th International Workshop on Warm Dense Matter (WDM2023), 大阪大学, 2023-06-29

#### 学術論文

- 18) Three-temperature model for silicon damage process, Prachi Venkat, Otake Tomohito, Journal of the Society of Laser Processing, 1(31), 26 - 32, 2024-02
- 19) ミクロ-マクロシミュレーションから迫るレーザー加工, 乙部 智仁, 表面と真空, 66(10), 587 - 592, 2023-10, DOI:<https://doi.org/10.1380/vss.66.587>
- 20) Thickness dependence of laser damage in silicon thin films, Prachi Venkat, Otake Tomohito, Journal of Laser Micro/Nanoengineering, 18(3), 2023-11, DOI:10.2961/jlmm.2023.03.2013
- 21) Subcycle control of valley-selective excitation via dynamical Franz-Keldysh effect in a WSe<sub>2</sub> monolayer, Yamada Shunsuke, Yabana Kazuhiro, Otake Tomohito, Physical Review B, 108(3), 035404, 2023-07, DOI:10.1103/PhysRevB.108.035404
- 22) Enhancement of valley selective excitation by a linearly polarized two-color laser pulse, Arqum Hashmi, Otake Tomohito, Yamada Shunsuke, Yabana Kazuhiro, Physical Review B, 107(23), 235403-1 - 235403-9, 2023-06, DOI:10.1103/PhysRevB.107.235403



- 23) Orientation-angle-resolved photoelectron angular distribution in dissociative ionization of methanol induced by an intense ultraviolet laser pulse, Shinichi Fukahori, Tomohito Otobe, Hiroshi Akagi, Kaoru Yamanouchi, Ryuji Itakura, Physical Review A, 107, 053118, 2023-05, DOI:10.1103/PhysRevA.107.053118

外部資金獲得

- 24) 2023 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」, 板倉 隆二, 石井 順久, 永島 圭介, 坪内 雅明, 圓山 桃子, 遠藤 友随, 乙部 智仁, 山田 俊介
- 25) Q-LEAP フラッグシッププロジェクト 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, タンフン ギン, 山田 俊介, Venkat Prachi, 米谷 佳晃, 長谷川 登

## H<sub>2</sub>O 円盤ターゲットを用いたレーザーイオン加速シミュレーション

守田 利昌

関西光量子科学研究所

光量子ビーム科学研究部 高強度場科学研究グループ

### (1) 利用目的:

レーザー加速で、より高エネルギーなイオンを得るには、主に2つの方法がある。1つはレーザーの性能を上げることであり、他の1つはターゲットを工夫することである。ここでは、ターゲットの材質と形状を工夫することで、高エネルギーイオンの生成を目指した研究の結果を示す。量研関西光量子科学研究所のレーザーシステムである J-KAREN-P を、H<sub>2</sub>O (水) 円盤のターゲットに照射した。計算は PIC 法を用い、現象をより正確に示すことができる 3次元 (3D) 計算を実施した。適切な材質と形状のターゲットを用いることで、実応用において十分に高エネルギー (~200 MeV/u) な陽子 (水素イオン) が、J-KAREN-P で得られることを示す。

### (2) 利用内容・結果:

高エネルギー陽子を得るには、ターゲットに CH<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O 等の水素を多く含む物質を用いる方が有利であること、また、薄膜より円盤を用いる方が有利であることを、昨年度までの研究で示した。そこで、より高エネルギーな陽子生成を目指し、ターゲットに H<sub>2</sub>O の円盤を用いた場合の検討を実施した。レーザーには J-KAREN-P (出力 = 783 TW、強度 =  $1 \times 10^{22}$  W/cm<sup>2</sup>、エネルギー = 25 J) を用い、レーザーは垂直入射とした。ターゲットの形状は円盤とし、その直径は 3.0  $\mu$ m、厚は 0.2  $\mu$ m である。計算における空間分割は  $5300 \times 3456 \times 3456$  であり、用いた粒子数は  $8 \times 10^7$  個である。計算結果を図 1 に示す。示されている時刻はレーザーパルスの中心が  $x = 0$  の位置に到達する時刻を 0 としている。初期状態が  $t = -53$  fs に示されており、計算終了時刻は 213 fs である。レーザーは、その断面を表示するため  $z = 0$  の面で半分 ( $z > 0$  の領域) を切り取った状態で表示されている。粒子分布は全体が表示されており、陽子と酸素イオンの空間分布を示している。陽子はそのエネルギー値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。酸素イオンは青色で示されている。得られた陽子の最大エネルギー = 240 MeV、酸素イオンの最大エネルギー = 60 MeV/u である。

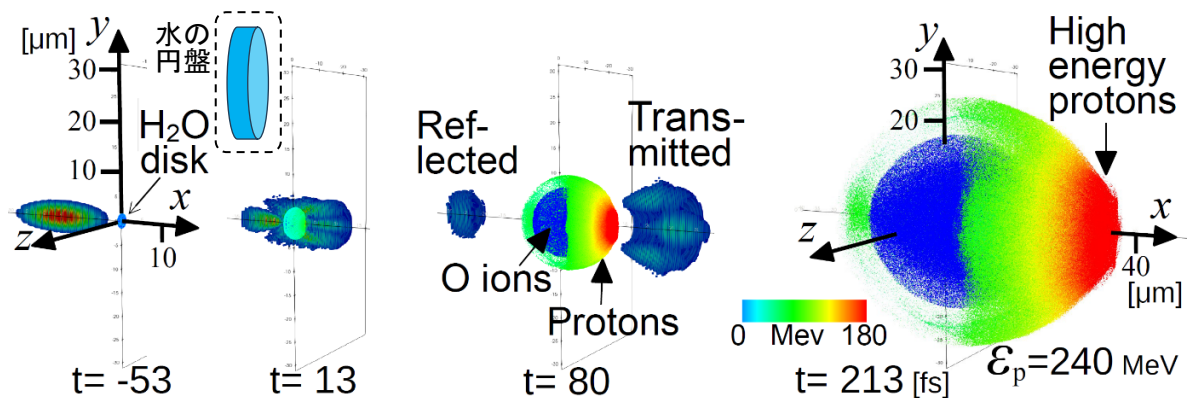


図 1 各時刻におけるイオンの空間分布とレーザーパルス (3D 表示)

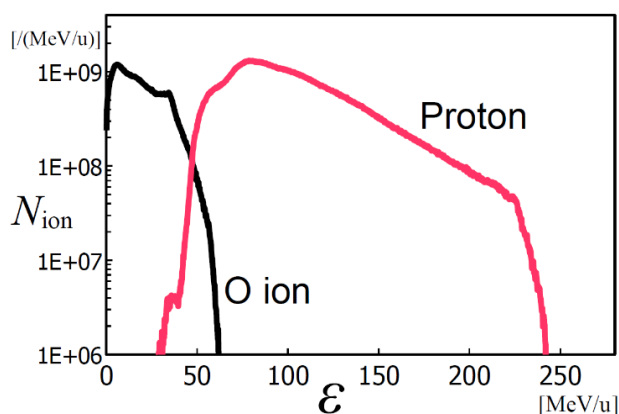


図2 エネルギースペクトル図

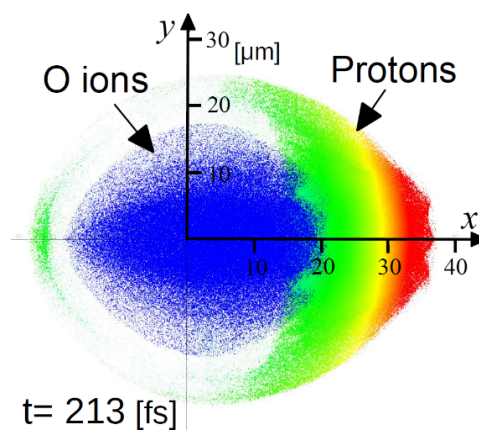


図3 イオンの空間分布 (2D 表示)

図2は最終時刻 ( $t = 213$  fs) における生成イオンのエネルギースペクトル図である。ここでは、 $+x$  方向に加速されたイオンのみの結果を示している。陽子は酸素イオンに比べ高エネルギーとなっており、また、高エネルギー領域 ( $\sim 200$  MeV) においても十分な個数が生成されている。図3は、最終時刻のイオン分布の  $z = 0$  の面を2Dで表示している。酸素イオンが中心付近に楕円体状に分布し、その周りを囲むよう (主に $+x$ 側) に陽子が分布している。陽子は、そのエネルギー値ごとに層状に分布し  $+x$  側に行くに従いエネルギーは高くなり、高エネルギー陽子が最も $+x$ 側に分布している。

本研究では、 $\text{H}_2\text{O}$  (水) の円盤ターゲットを用いることで、J-KAREN-Pで実応用に十分となる200 MeV級エネルギーの陽子生成が可能であることを示した。

### (3) 今後の利用予定:

これまでの成果を生かし、より高エネルギーかつ高品質なイオンビーム生成条件の研究を進める。PICシミュレーションにおいて、現象をより正確に解明し、生成イオンのエネルギーを正しく評価するには、3D計算が必要である。2D計算に比べ、3D計算では次元が増えることにより、空間領域と用いる粒子数が著しく増加する。それにともない、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、加速機構やターゲットの材質によっては、生成イオンが広い空間領域に分布するため、大きな計算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。

### (4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 学会発表

- 1) レーザーイオン加速における薄膜と円盤ターゲットの評価, 守田 利昌, 第9回 光・量子ビーム科学合同シンポジウム, 京都, 2024年6月5日 (Poster)

# Polarization Effects in Ultra-high intensity laser thin target interactions

Koga James、西内 満美子

関西光量子科学研究所

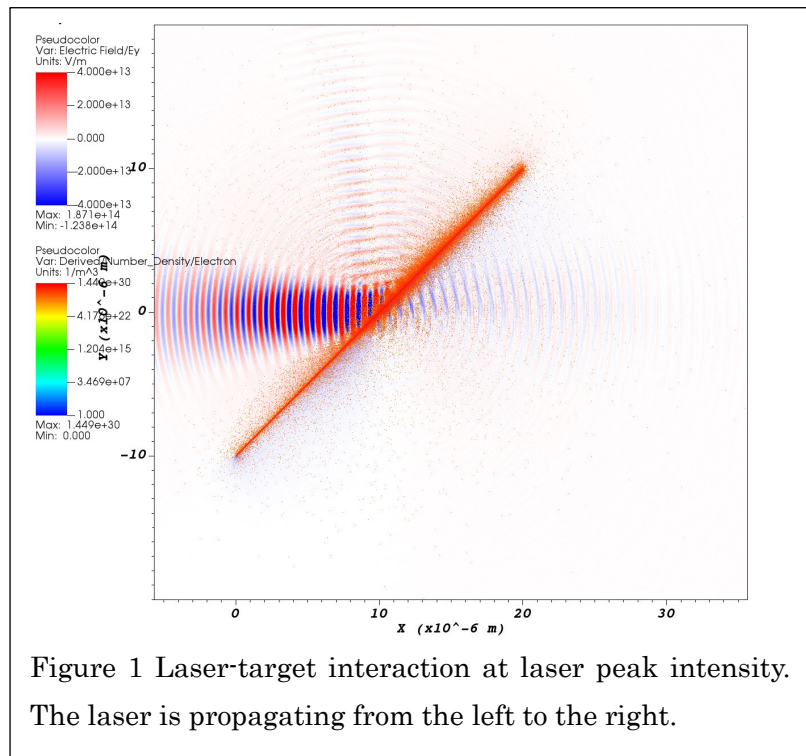
光量子ビーム科学研究部 高強度場科学研究グループ

## (1) 利用目的:

The goal of this research is to determine the mechanisms by which the polarization of ultra-high intensity lasers interacting with ultrathin solid targets is modified. Experiments have shown that this occurs, however, the processes by which this occurs is not clear. We will perform 2D and 3D particle-in-cell (PIC) simulations of the interaction to determine the cause of the polarization change seen in experiments.

## (2) 利用内容・結果:

We performed 2D PIC simulations using the code EPOCH [1,2] of the interaction of an ultra-high intensity laser pulse with parameters comparable to the J-KAREN-P laser. During our investigation we have found that the ionization process of the heavy atoms of the target is an important process towards determining the laser-target interaction. Due to the computationally intensive nature of the ionization processes we have run 2D PIC simulations including both field ionization and electron impact ionization. Figure 1 shows the electric field and electron density of a gold target of thickness 25 nm tilted 45 degrees with respect to the laser propagation direction at the time of the laser peak intensity in vacuum of  $2.5 \times 10^{21}$  W/cm<sup>2</sup> where the laser wavelength is 800 nm, the focal spot size is 1.5 microns (FWHM), the pulse width is 45 fs (FWHM). The target is ionized and parts of the laser pulse have been reflected from and propagated through the target.



### (3) 今後の利用予定:

In the next steps we will confirm the validity of the ionization models used in the simulation and perform 3D simulations of the target interaction to compare with the experimental results.

#### 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>

## 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

関西光量子科学研究所

放射光科学研究センター 水素材料科学研究グループ

### (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に基づいた第一原理分子動力学法を用いた材料シミュレーション技術の開発・高度化を行う。開発した手法を駆使して量子材料・物質科学の基礎研究を推進するとともに、環境に優しい次世代エネルギー材料等の創製に貢献することを目指す。令和5年度は、研究対象を液体水素化物に拡張するため計算コードおよび関連ツールの改良を行った。常温常圧下の水に適用することにより改良したコードの性能評価を実施した。

### (2) 利用内容・結果:

研究対象を液体水素化物に拡張するため、最局在 Wannier 関数に基づく第一原理 van der Waals (vdW) 補正 (vdW-WF および vdW-WF2) の定式化にスケール因子  $\gamma_s$  を導入することにより計算手法の改良を行った。定温定圧第一原理分子動力学 (MD) シミュレーションを実行することにより求めた常温常圧下の水の密度  $\rho$  の  $\gamma_s$  依存性を図1に示す。vdW-WF と vdW-WF2 のどちらも水の密度は  $\gamma_s$  に対して線形に依存しており、 $\gamma_s$  を調整することにより常温常圧下の水の密度  $0.997 \text{ g/cm}^3$  を再現可能であることがわかる。定温定圧第一原理 MD および第一原理経路積分リングポリマー分子動力学 (RPMD) により求めた動径分布関数  $g(r)$  の実験結果からの平均絶対誤差  $\text{MAE}(\{g\})$  と拡散係数  $D$  の  $\rho$  依存性を図2に示す。図に示した範囲では密度を実験値から下げていくと  $\text{MAE}(\{g\})$

と  $D$  は実験結果に近づく傾向を示すことがわかる。さらに、図2(b)に青線で示した vdW 補正を考慮せずに求めた  $D$  の計算結果と比較すると、密度を  $0.98 \text{ g/cm}^3$  よりも下げることで  $D$  の計算結果が改善されることがわかる。これらの結果は、改良した vdW 補正を考慮することにより水の構造と動

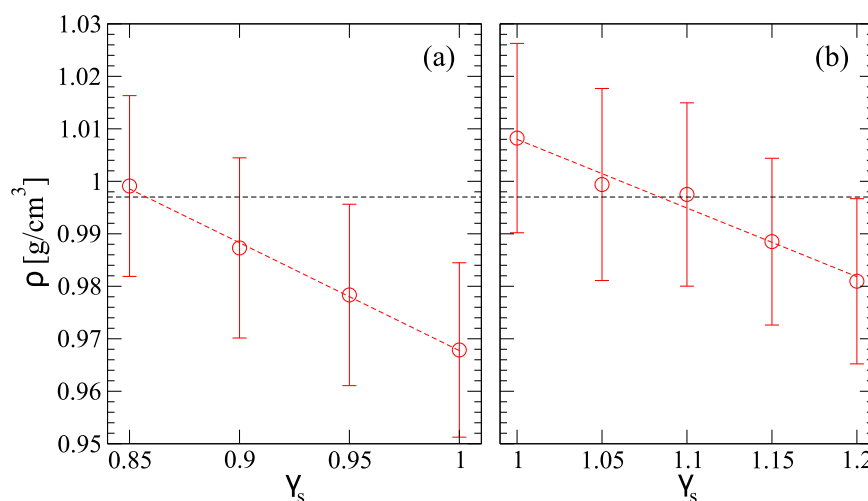


図1 (a) vdW-WF および (b) vdW-WF2 を用いた場合の常温常圧水の密度  $\rho$  のスケール因子 ( $\gamma_s$ ) 依存性

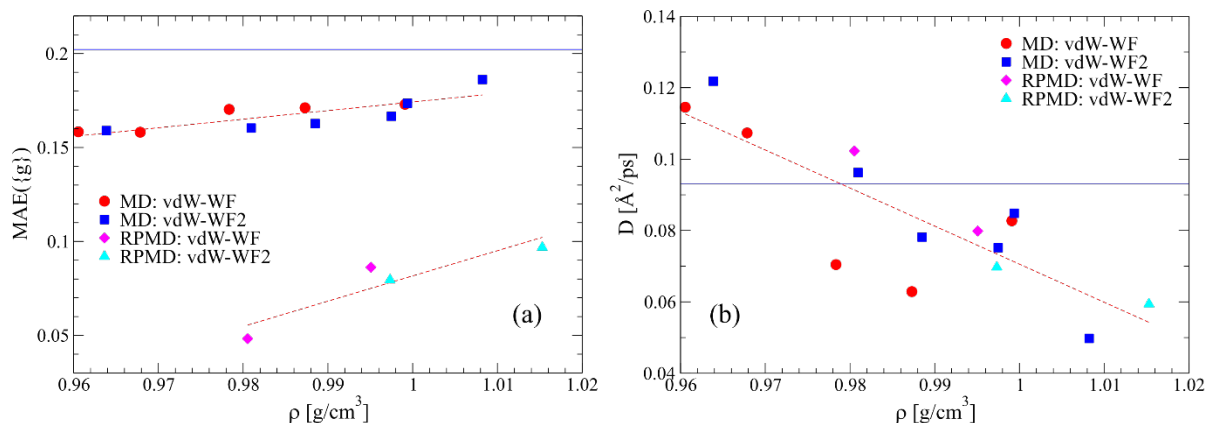


図 2 シミュレーションから求めた水の動径分布関数  $g(r)$  の平均絶対誤差  $MAE(\{g\})$  (a) と拡散係数  $D$  (b) の  $\rho$  依存性。図中の青線は vdW 補正を用いないシミュレーションから求めた  $MAE(\{g\})$  と  $D$  の計算値を示す。

的性質のどちらの記述も改善可能であることを示している。

### (3) 今後の利用予定:

第一原理 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) 最局在ワニエ関数に基づいた第一原理ファンデルワールス補正の再考, 池田 隆司, 日本物理学会 第 78 回年次大会 (2023 年), 仙台, 2023.9 (Oral)
- 2) Ar 照射グラファイトにおける欠陥形成過程の第一原理分子動力学シミュレーション II, 池田 隆司, 日本物理学会 2024 年春季大会, オンライン, 2024.3 (Poster)
- 3) 地球惑星深部物質の構造と物性, 飯高 敏晃, 池田 隆司, 第 10 回「富岳」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会, 東京/オンライン, 2023.10 (Poster)

#### 学術論文

- 4) Revisiting first principles van der Waals corrections based on maximally localized Wannier functions, T. Ikeda, Chemical Physics Letters, vol.839, 141134, 2024.3
- 5) Weakened Oxygen Adsorbing the Pt–O Bond of the Pt Catalyst Induced by Vacancy Introduction into Carbon Support, H. Okazaki, A. Idesaki, H. Koshikawa, D. Matsumura, T. Ikeda, S. Yamamoto, and T. Yamaki, The Journal of Physical Chemistry C, vol.127, no.49, 23628-23633, 2023.12

量子エネルギー部門



## 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

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、(1)JT-60SA 及び ITER プラズマ予測計算、(2) 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。(1)(2)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:

JT-60SA 計算では、Ar 入射時に達成目標であるセパトリ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、さらに炉心プラズマ輸送コードとの連携計算に必要な炉心端での各価数の不純物密度を評価することができた。また、欧州コード SOLPS-ITER と SONIC の JT-60SA 磁場配位での結果比較を実施した。ダイバータプラズマが部分非接触となる条件での SOLPS-ITER と SONIC それぞれで得られたイオンと電子の静圧の和の外側ダイバータ板に沿った分布を図 1 に示す。SOL では両コードほとんど一致することが確認でき、モデルの妥当性が確認できた。原型炉計算では、日本及び欧州のそれぞれの配位における He 排気シミュレーションを実施した。

以上の成果から、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。

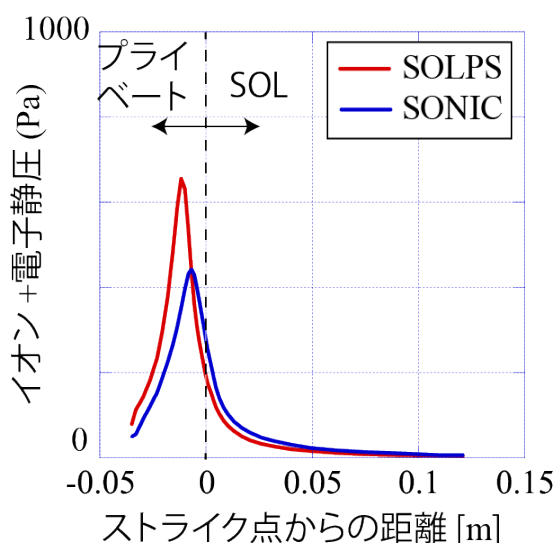


図 1 ダイバータプラズマが部分非接触となる条件での SOLPS-ITER と SONIC それぞれで得られたイオンと電子の静圧の和の外側ダイバータ板に沿った分布。

### (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①N<sub>2</sub> 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。

原型炉シミュレーションにおいては、He 灰排出シミュレーションや、SOL ダイバータ熱排出に適した不純物種検討、及び低衝突度環境の SOL プラズマで発生する熱伝導運動論効果の研究を行う。原型炉ではこれまで Ar 以外の希ガスを用いた熱放射・排出シナリオが十分検討されてこなかったため、Ne/Kr/Xe の放射シナリオ検討を行い、各不純物種の単体使用時に予想される SOL ダイバータプラズマ運転可能領域を評価する。また、ITER や原型炉 SOL では既存装置より衝突度が低下するため、適切な運動論効果補正をプラズマ流体モデルに施す必要がある。本課題ではイオン熱伝導効果の感度解析計算を行い、熱伝導運動論効果が原型炉クラスの SOL プラズマ形成に果たす役割と影響を明らかにすることを目指す。

### (4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 学会発表

- 1) BA 原型炉設計活動における SONIC コードによる欧州原型炉ダイバータでの熱・粒子排出シミュレーションの進展, 朝倉 伸幸, 星野 一生, SUBBA Fabio, WIESEN Sven, 山本 龍人, 本間 裕貴, 坂本 宜照, 原型炉設計合同特別チーム, 第 40 回プラズマ・核融合学会年会, 盛岡, 2023,11 (Oral) ,
- 2) Simulation studies of power and Helium exhaust for Japanese and European DEMO divertors by SONIC divertor code, N. Asakura, K. Hoshino, Y. Homma, F. Subba, S. Wiesen, Y. Sakamoto, and Joint Special Design Team for Fusion DEMO, 29th IAEA Fusion Energy Conference (FEC2023), London, GreatBritain, 2023,10 (Poster)

學術論文

- 3) Recent progress of plasma exhaust concepts and divertor designs for tokamak DEMO reactors, N. Asakura, K. Hoshino, S. Kakudate, F. Subba, J.-H. You, S. Wiesen, T.D. Rognien, R. Ding, S. Kwon,, Nuclear Materials and Energy, vol. 35, 101446, 2023.5.11

## R6F2 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

矢木 雅敏

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:

核融合炉において燃料粒子補給法の確立は、核燃焼制御のための重要課題である。しかし原型炉クラスの高温プラズマでは、ペレットで燃料供給しても炉心外側(最外殻磁気面で規格化したプラズマ小半径の 80-90%程度)までしか到達せず、中心密度のピーキングは自発的な粒子ピンチに依存するため、信頼性のある予測が困難となっている。近年ジャイロ運動論による粒子輸送研究が行われるようになってきたが、大局的モデルによる解析は、膨大な計算資源を必要とするため、パラメータ探査を行うことには限界がある。本研究では流体モデルを用いた大局的シミュレーションによりプラズマ乱流と MHD モードの相互作用を考慮し、粒子輸送の特性を明らかにする。

### (2) 利用内容・結果:

本研究では、これまで用いていた 1 次元領域分割版 R6F コードを拡張し、2 次元領域分割版 R6F2 コードを開発した。これにより、流体モデルで ITG 乱流を効率よく取り扱うことが可能となった。昨年度の報告では R6F を用いて、テスト計算を行い、その結果を報告した。R6F コードにおいては非線形項を評価するために 2 次元 FFT を導入しており、de-aliasing 処理機能の実装は比較的容易であった。一方 2 次元領域版では 1 次元 FFT、行列の転置、1 次元 FFT となるので以下に示すようなフローとし、de-aliasing のためのフィルタルーチンを新たに導入した。

CALL VECT

CALL TMRHS ! 擬スペクトル法により非線形項を計算

CALL CLEARNON ! 非線形項に対しローパスフィルターを適用

CALL TMPUS ! 新しい時刻における場の量を計算

CALL CLEARM ! 場の量に対しローパスフィルターを適用

CALL GATHER

R6F の TMRHS サブルーチンにおいてはスペクトル空間から実空間への FFT において de-aliasing を考慮するために 2 次元 FFT 用の配列を 1.5 倍 x 1.5 倍のサイズにとり 2/3 以上の領域はゼロとおくことで de-aliasing を行っていた。一方、2 次元領域分割版では 3 次元配列において y 方向と z 方向の転置が発生するため、インプットで与える配列サイズをあらかじめ 1.5 倍サイズで与えて計算し、出力用の変数を 2/3 倍のサイズで定義し、ゼロ部分を除いて出力するようコードの修正を行った。冗長計算を行っているため、コードの最適化は今後の課題である。図 1 に、渦度方程式の運動エネルギースペクトル分布を de-aliasing 処理の有無によって比較したものである。上図が de-aliasing 処理機能の無い従来版コードで計算した結果であり、下図が新しいコードでこの処理を有効にした計算の結果である。従来のコードでスペクトルに含まれていた不安

定モード以外のノイズ成分は、de-aliasing 処理を施した新コードにおいて大幅に抑制されることが確認された。

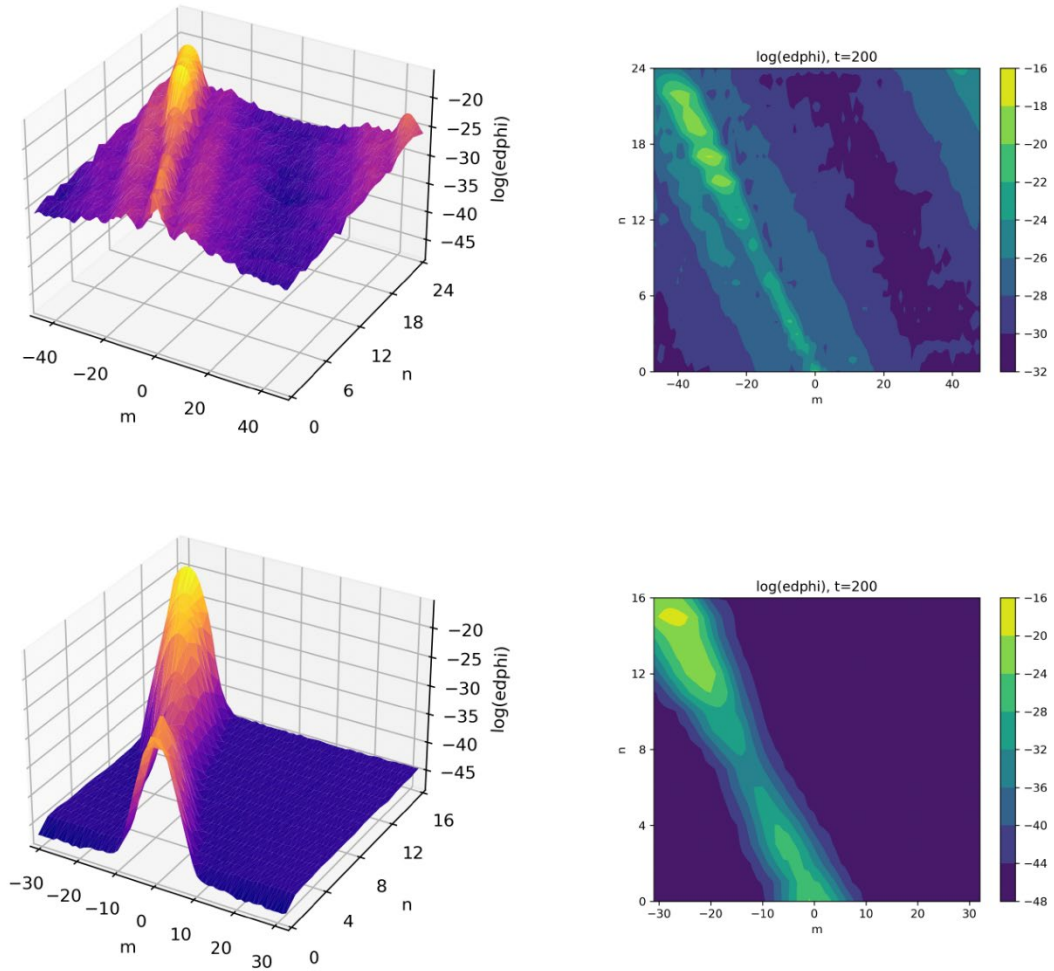


図 1: de-aliasing によるノイズの低減。上図 : de-aliasing 処理無し。下図 : de-aliasing 処理あり。

R6F2 にガウス型の密度ソース及び温度ソースを実装した。 $S(r) = S_0 e^{-\frac{(r-r_0)^2}{\sigma^2}}$ を仮定した。ソースパラメータとして $S_T = 2 \times 10^{-6}$ ,  $r_T = 0.2$ ,  $\sigma_T = 0.1$ ,  $S_n = 4 \times 10^{-6}$ ,  $r_n = 0.8$ ,  $\sigma_n = 0.1$ とした。時刻  $t=4000$  で温度ソースを印可し、その後、 $t=10000$  で密度ソースを印可した。分布の時間発展を図 2 に示す。 $r=0.6$  に  $q=2$  の有利面が存在し、 $2/1$  の磁気島が形成され、境界条件の働きをしていることがわかる。このシミュレーションでは密度分布のピーキングは得られておらず、トロイダル回転のような別の機構を導入する必要があることが判明した。

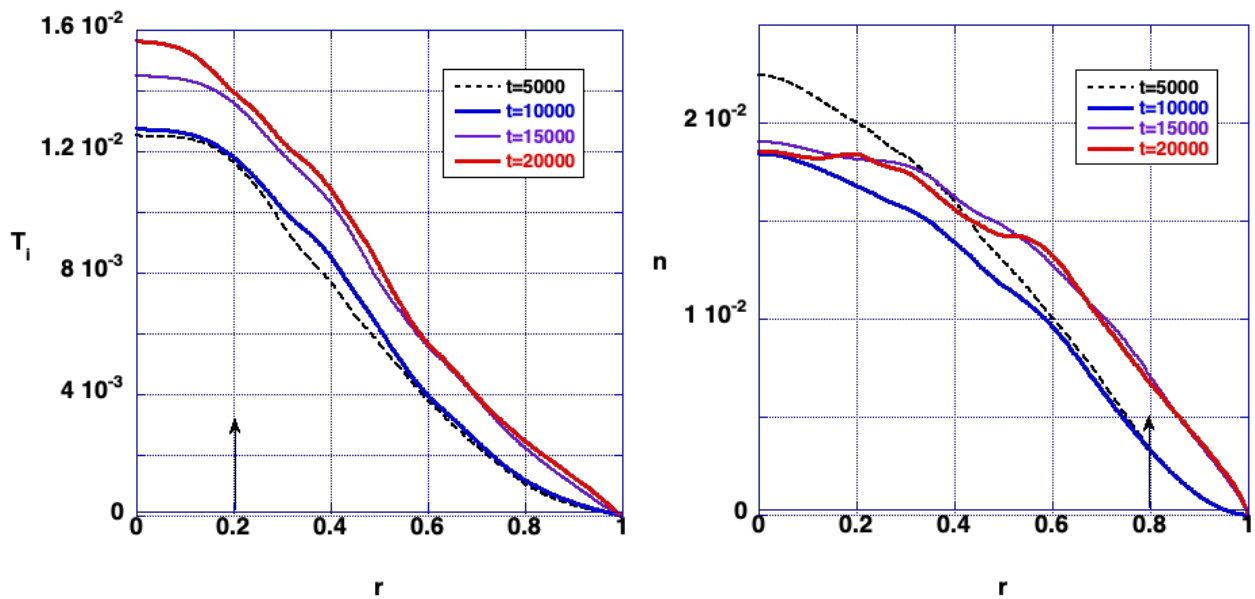


図2:イオン温度分布、電子密度分布の時間発展。温度ソースを  $t=4000$  で印可した後、 $t=10000$  で密度ソースを印可。 $r=0.6$  に  $q=2$  の有利面が存在し、 $2/1$  の磁気島が形成されている。

### (3) 今後の利用予定:

本研究では、密度ソース、温度ソースの位置を固定し、シミュレーションを行ったが、密度分布のピーキング度に対するソース位置依存性を調べる必要がある。また、安全係数分布に対しても、本研究では標準的な分布を用いたが、フラットな  $q$  分布や反転磁気シア配位に対してピーキング度の傾向を調べる必要がある。さらにはトロイダル回転のような新しいノブを導入し、ピーキング度の制御が可能かどうか今後検討する必要がある。

### (4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 学会発表

- 1) GPU acceleration of RMHD model and application to particle transport in plasma peripheral, Yagi Masatoshi, Todoroki Haruhiko, Kasuya Naohiro, Plasma Edge Theory Workshop (PET-19), ASIPP(Hefei, China), 2023.9 (Oral)
- 2) GPU acceleration of RMHD model and application to particle transport in plasma peripheral, Yagi Masatoshi, Todoroki Haruhiko, Kasuya Naohiro, 第21回核燃焼プラズマ統合コード研究会, 九大応力研(春日市), 2023.12 (Oral)

- 3) トーラス内向き乱流粒子流束生成における非線形機構の評価, 宮本 琉耶, 糟谷 直宏, 矢木 雅敏, プラズマ・核融合学会九州・沖縄・山口支部第 27 回支部大会, KDDI 維新ホール, 山口市, 2023.12 (Oral)
- 4) Evaluation of nonlinear mechanism to induce inward turbulent particle fluxes in tokamaks, 宮本 琉耶, 糟谷 直宏, 矢木 雅敏, 第 21 回核燃焼プラズマ統合コード研究会, 九大応力研 (春日市), 2023.12 (Oral)
- 5) Sensitivity of Broad Spectrum of Low-Frequency Energetic-Particle-Driven Magnetohydrodynamics Modes in Low Magnetic Shear Plasma, Adulsiriswad Panith, Andreas Bierwage, Yagi Masatoshi, 13th Asia Plasmas and Fusion Association Conference, Jungpyo Lee (韓国), 2023.12 (Oral)

#### 学術論文

- 6) Analysis of Turbulent Particle Fluxes in Reduced MHD Simulation, H. Todoroki, N. Kasuya, and M. Yagi, Plasma and Fusion Research, 18, pp.1203052-1-3, 2023.5

## 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

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  $100\text{MW}$  程度、日本の原型炉設計 (JA-DEMO) では  $250\text{MW}$  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:

令和 4 年度までに開発した、トーラス大円全周を計算領域として、トーラス大円に対称な流れ、長波長成分の流れ (MHD 不安定性)、短波長成分の流れ (乱流) を整合良く解くための機能拡張を行なった BOUT++コードを用いて、短波長の抵抗性ドリフトバルーニングモード (RDBM) 不安定性から駆動される周辺局在化モード (ELM) による熱の放出機構に関する非線形数値シミュレーションを実施し、ELM トリガー機構における乱流と MHD の相互作用に関する原著論文の出版 1 編と学会発表 1 件を行なった。なお、本計算は時間・空間ともにマルチスケールの高解像度数値計算であり、計算条件を決定するための線形シミュレーションによる予備計算等を含めると計算結果は数百 TB 程度となる。SGI8600 計算機上では数百 TB の計算データを保存及び解析することができないため、SGI8600 計算機の利用はコード開発のみに限定して、数値シミュレーションは計算データ保存用ストレージ領域が十分に確保されている別の大型計算機にて実施した。

数値シミュレーションによって得られた ELM 発現機構の詳細は以下の通りである。ELM 崩壊の初期非線形フェーズでは、小さな 1 段階目の崩壊が線形不安定な RDBM 不安定性によって引き起こされ、 $m/n=2/1$  の磁気島が RDBM の非線形結合とその高次高調波によって非線形励起される  $t=0$  tA)。ここで、 $m$  はポロイダルモード数、 $n$  はトロイダルモード数、 $q=2$  の有理面は圧力勾配のピーク付近に存在し、 $q$  は安全係数である。同時に、中短波長の RDBM 乱流が発生するが、乱流は磁気島の X 点近傍に局在するため、乱流熱輸送による ELM 熱放出は抑制される。一方、非線形フェーズが進行すると、 $m/n=2/1$  磁気島の高次高調波が非線形結合を介して  $q=2$  磁気



面上で成長することによって、磁気島の重畳による磁力線構造のカオス化が起こる( $t=60t_A$ )。

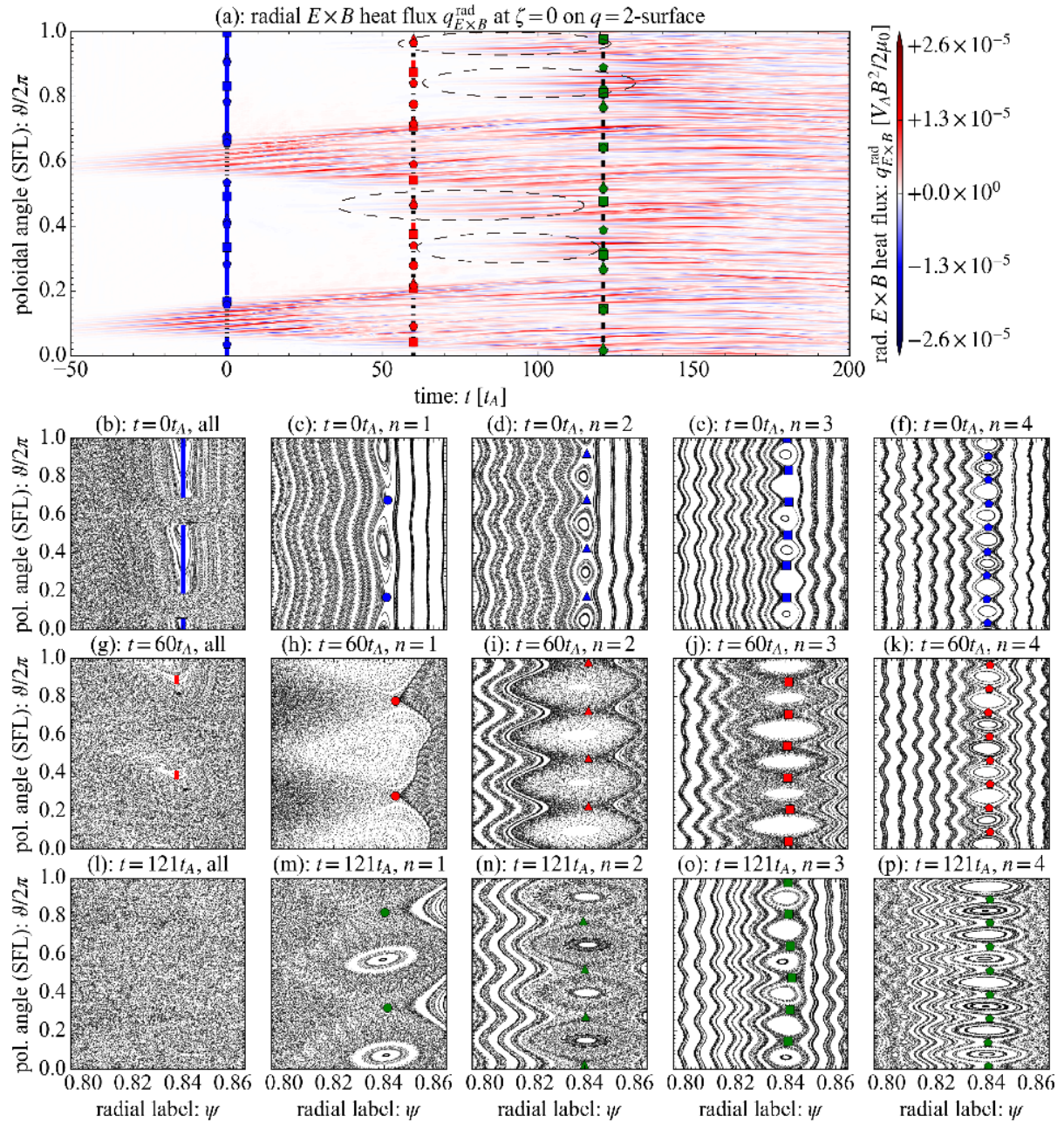


図 1 : (a) ELM が発生する  $q=2$  磁気面における乱流径方向熱流束の時空間構造、1 段階目の ELM 崩壊が発生する時刻 ( $t=0t_A$ ) における (b) 全揺動、(c)  $n=1$  揺動成分、(d)  $n=2$  揺動成分、(e)  $n=3$  揺動成分、(f)  $n=4$  揺動成分の磁力線構造、非線形フェーズ進行中 ( $t=60t_A$ ) における (g) 全磁場、(h)  $n=1$  揺動成分、(i)  $n=2$  揺動成分、(j)  $n=3$  揺動成分、(k)  $n=4$  揺動成分の磁力線構造、及び、2 段階目の ELM 崩壊が発生する時刻 ( $t=103t_A$ ) における (l) 全揺動、(m)  $n=1$  揺動成分、(n)  $n=2$  揺動成分、(o)  $n=3$  揺動成分、(p)  $n=4$  揺動成分の磁力線構造。ここで、実線は磁気島が存在するトーラス小円方向の範囲、各シンボルは各磁気島の X 点が存在するトーラス小円方向の位置、図 (a) における楕円の破線は高調波成分の磁気島の X 点からの乱流径方向熱流束の吹き出しを表している。

このとき、乱流熱輸送は高調波( $m/n=8/4$ )の磁気島の X 点からも発達するようになり、その結果、乱流はトーラス小円方向に伝播する。乱流がトーラス小円方向の領域全体を覆ったときに2段階目の大きな第2クラッシュが発生する。そのため、磁気島の発生と磁力線構造のカオス化は ELM 崩壊の前駆体と解釈できる。

JT-60U の圧力勾配駆動 ELM においても前駆体としての磁気島の発現と磁力線のカオス化が報告されている。そのため、今後は BOUT++コードを JT-60U の実験解析に適用し、本成果で得られた ELM 発現機構によって JT-60U の磁気島を伴う ELM のダイナミクスが説明できるかを検証する予定である。

### (3) 今後の利用予定:

数値シミュレーション及び実験解析に必要なストレージ容量が SGI8600 計算機で利用できる容量を大幅に超過するため、令和5年度以降の利用予定はありません。

### (4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 学会発表

- 1) SIMULATION OF RESISTIVE DRIFT-BALLOONING MODE DRIVEN ELM CRASH IN FULL ANNULAR TOKAMAK, H. Seto, X.Q. Xu, B.D. Dudson, M. Yagi, 29th IAEA Fusion Energy Conference, London, UK, 2023.1 (Poster)
- 2) 抵抗性ドリフトバルーニングモード駆動 ELM における二段階崩壊プロセス, 瀬戸 春樹, X.Q.Xu, B.D. Dudson, 矢木 雅敏, 第40回プラズマ核融合学会年会, 盛岡市, 2023.11 (Oral)

#### 学術論文

- 3) Two-stage crash process in resistive drift ballooning mode driven ELM crash, H. Seto, X.Q. Xu, B.D. Dudson, M. Yagi, Physics of Plasmas, vol. 31 032513, 2024.03

## Exploratory study of laser-assisted regulation of tokamak plasmas

ビアワーゲ アンドレアス

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

報告書内容は論文出版の都合上、次回発行の成果報告集掲載とする。

# Sensitivity Analysis of Broad Spectrum of Low-Frequency Energetic Particle Driven Magnetohydrodynamics Instabilities Observed in the Low Magnetic Shear $q \sim 1$ Tokamak Plasmas.

Adulsiriswad Panith

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:

This study investigates the stability of energetic particle-(EP)-driven MHD modes observed in low magnetic shear  $q \approx 1$  plasmas. Such configurations are observed in hybrid scenarios ( $q_0 \gtrsim 1$ ) and low magnetic shear baseline scenarios ( $q_0 \lesssim 1$ ), offering potential benefits to tokamak plasma operations. In the hybrid scenario, high plasma beta ( $\beta$ ), good confinement, nearly stationary current density profiles, and soft MHD activity (sawtooth-free) plasmas have been experimentally demonstrated[1]. In contrast to the soft MHD activities observed in the hybrid scenario, a periodic plasma relaxation caused by magnetic reconnection at  $q=1$  surface known as sawtooth instabilities can increase energy and particle transports for the baseline scenario. However, at the benign level, it can be useful for removing an impurity accumulated in the core region. The numerical study reveals that the sawtooth relaxation can weakly affect the high-energy particle confinement in the core region when the on-axis safety factor ( $q_0$ ) is slightly below 1[2]. However, in both baseline and hybrid scenarios, when the safety factor of the low magnetic shear region approaches unity ( $|q - 1| \approx 0$ ), new classes of low-frequency MHD modes can become unstable. Examples include a long-lived mode [3] and their EP-driven counterparts, long-lasting energetic particle mode (EPM)[4], and low-frequency Alfvén eigenmodes (AEs)[5]. Unlike internal kink and fishbone modes, these modes often exhibit higher  $m=n$  harmonics. Experimental observations report that these modes can enhance energetic particle loss and flatten plasma toroidal rotation.

Such a low magnetic shear  $q \sim 1$  configuration has also been reported in the JT-60SA baseline scenario[6]. The main actuator for the non-inductive current and rotation controls in the JT-60SA is the negative-ion source-based neutral beam (N-NB) system. These N-NBs can generate enough high-energy particles that can destabilize MHD modes. Previously, the stability of AEs in the inductive scenario of JT-60SA has been investigated using CASTOR-K. It is shown that the damping mechanisms (bulk ion Landau damping) are sufficient to stabilize AEs in JT-60SA[7]; however, CASTOR-K does not include energetic-particles mode (EPM) like fishbone modes and long-lasting EPs. In this study, these EPs are addressed as low-frequency EPs (LFEPs). Since the beneficial operation ranges of both the hybrid scenario and the low magnetic shear baseline scenario are localized within the proximity of the  $q=1$

surface, the understanding of the properties of these LFEPMs and their consequences on the plasma performance is indispensable for controlling the high-performance fusion plasmas. The focus of this study will be on the sensitivity of these LFEPMs on the  $q$  profile in the proximity of the  $q=1$  surface.

## (2) 利用内容・結果:

To study the sensitivity of these LFEPMs in JT-60SA-like plasma, we employ MEGA, a nonlinear MHD-EP hybrid code. This code will be used to investigate the sensitivity of the  $q$  profile in terms of both linear and nonlinear dynamics. Five low magnetic shear MHD equilibria are prepared with  $q_0=0.972, 0.992, 1.00, 1.006, \text{ and } 1.016$  (Figure 1a). Only off-axis co-N-NB is available in JT-60SA; therefore, only off-axis EP pressure profile and co-passing EPs are considered in our simulation.

For the linear simulation results, the  $n \leq 7$  LFEPMs are linearly unstable with a comparable linear growth rate when the low magnetic shear region is sufficiently close to 1. The  $n \leq 7$  linear growth rates for the  $q_0 = 1$  equilibrium are shown in Figure 1b as a black solid line. In the same equilibrium, the real frequency scales approximately linearly with toroidal mode number up for the  $n \leq 6$  modes (Figure 1c). This linear scaling can be understood from the passing EP resonance condition ( $f = n f_\phi - L f_\theta$ ). When  $q \approx 1$ , toroidal and poloidal orbit frequencies are approximately equal; therefore, the resonance condition is reduced to  $f \approx n |f_\phi - f_\theta|$  (Red, yellow, cyan, and blue solid lines shown in Figure 1b). A slight deviation from the  $q=1$  surface leads to a significant suppression of the high- $n$  spectrum of LFEPMs. The stronger sensitivity of the high- $n$  mode on the  $q$  profile is explained in terms of the linear resonance width and resonance detuning. Deviation from the  $q=1$  surface leads to resonance detuning of the  $m=n$  modes but the linear resonance width decreases with toroidal mode number ( $n$ ). The suppression of high- $n$  mode is stronger for the  $q_0 < 1$  equilibria. This asymmetry can be explained by the EP drift orbit. If co-passing EPs are replaced by counter-passing EPs, the suppression of high- $n$  mode is stronger for  $q_0 > 1$  equilibria.

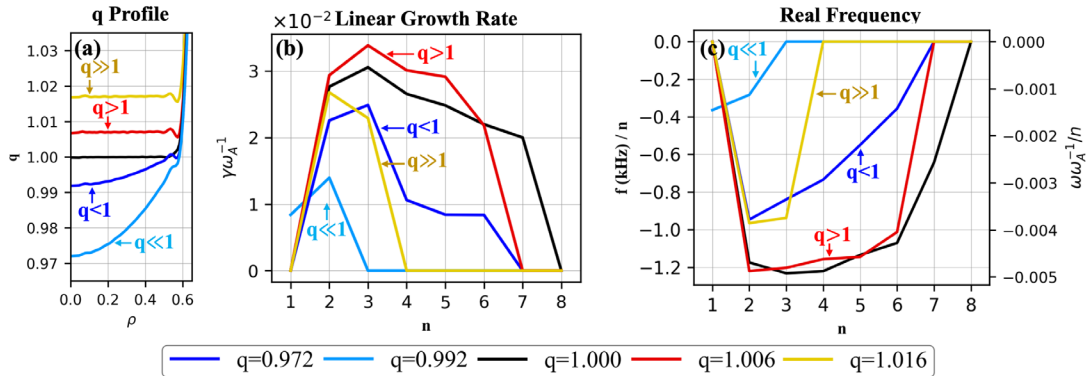


Figure 1: Sensitivity analysis of the broad spectrum of the linearly unstable low-frequency EPs driven by co-passing EPs on  $q$  profile: (a) scanned low magnetic shear  $q$  profile, (b) spectrum of linear growth rate, and (c) normalized real frequency.

During the nonlinear phase, we observe the transition from the  $n > 1$  LFEPMs to the core-localized  $m/n=1/1$  mode (Figure 2). The spatial profile of this  $m/n=1/1$  mode resembles a quasi-interchange mode. There are two candidates for the transition mechanism: (1) MHD nonlinearity and (2) quasi-linear profile modification of EP. Firstly, we compare the

simulation results from the nonlinear and linearized MHD equations. The EP nonlinearity is retained in both cases. The transition from the  $n > 1$  LFEPs to the  $m/n=1/1$  mode can be observed only in the nonlinear MHD model. Secondly, we reinitiate the simulation using the redistributed bulk plasma pressure profile, density profile, and EP distribution. The growth rate of the  $m/n=1/1$  mode is enhanced but still lower than the  $n > 1$  LFEPs. These two results collectively suggest that both quasilinear profile modification and MHD nonlinearity are responsible for the excitation of the  $m/n=1/1$  mode. For the  $n > 1$  LFEPs, MHD nonlinearity channels energy away from the  $n > 1$  LFEPs to the  $n=0$  and 1 modes.

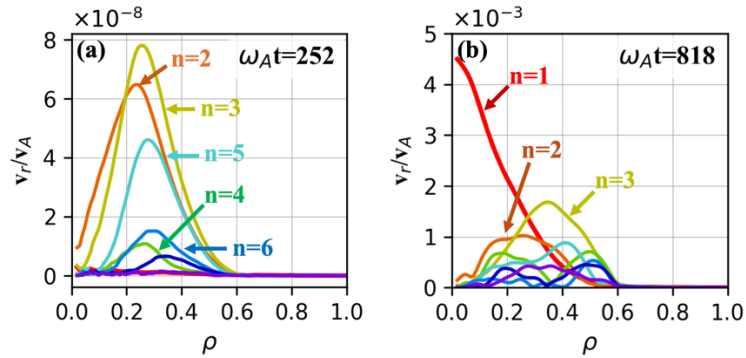


Figure 2: Radial MHD velocity profile of  $n \leq 8$  LFEPs during (a) linear and (b) nonlinear phases.

### (3) 今後の利用予定:

Our study focuses on the excitation mechanism of a broad spectrum of LFEPs and the nonlinear excitation of the  $m/n=1/1$  mode, rather than their consequences. Potential outcomes include the redistribution of EPs and the formation of a persistent  $m/n=1/1$  core deformation. We plan to concentrate on the latter, specifically the nonlinear excitation of the  $m/n=1/1$  mode in a low magnetic shear equilibrium ( $q \approx 1$ ), which resembles the helical core observed experimentally in hybrid scenarios. Experimental and numerical studies suggest that a helical core is a three-dimensional equilibrium state that can be induced by pellet injection, external magnetic perturbations, or the ideally unstable  $m/n=1/1$  mode. Especially for the helical core formed from the ideally unstable  $m/n=1/1$  mode, our findings indicate that the helical core might also be nonlinearly excited by  $n > 1$  LFEPs.

### References:

- [1] Petty, C.C., et al. Nuclear Fusion 56 (2016): 016016
- [2] Bierwage, A., et al Nature Commun.13.1 (2022): 3941
- [3] Chapman, I. T., et al. Nuclear Fusion 50.4 (2010): 045007
- [4] Zhang, R.B., et al. Plasma Phys. And Cntrl. Fusion 56.9 (2014):095007
- [5] Curran, D., et al. Plasma Phys. Control. Fusion 54 (2012): 055001
- [6] Adulsiriswad, P., et al. Nuclear Fusion 63.12 (2023): 126030.
- [7] Coelho, R., et al. *Frontiers in Physics* 11 (2023): 1267696.

**(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

学会発表

- 1) Sensitivity of Broad Spectrum of Low-Frequency Energetic-Particle- Driven Magnetohydrodynamics Modes in Low Magnetic Shear Plasma, Adulsiriswad Panith, Bierwage Andreas, Yagi Masatoshi, 13th Asia Plasma and Fusion Association Conference, Seoul, South Korea, 2023.12(Oral)
  
- 2) Low-Frequency Energetic-Particle- Driven Magnetohydrodynamics Modes in Low Magnetic Shear  $q=1$  Tokamak Plasmas, Adulsiriswad Panith, Bierwage Andreas, Yagi Masatoshi, 2024 US-Japan MHD Workshop/ITPA MHD Disruption and Control Topical Group Meeting, Gifu, 2024.04 (Oral)

コード高速化・最適化研究成果



# Laser Induced Breakdown of Air with Ultrashort Laser Pulses

Koga James

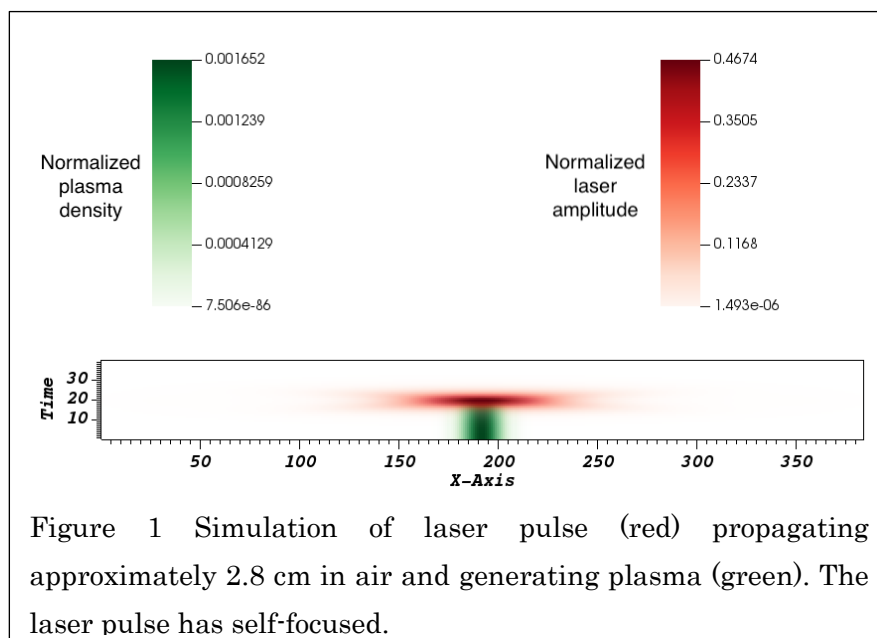
関西光量子科学研究所 光量子ビーム科学研究部 高強度場科学研究グループ

## (1) 利用目的:

When ultrashort laser pulses of sufficient power propagate in air, they can produce plasma filaments. These filaments can be used to detect a variety of elements in the air from their spectral signature. We perform numerical simulations of these types of pulses to determine the temperature and density of such filaments.

## (2) 利用内容・結果:

To simulate the propagation of ultrashort pulses in air we use our previously developed code to study air breakdown [1]. This code solves the non-linear Schrödinger equation which describes the propagation of the laser pulse including the nonlinear index of refraction, group velocity dispersion, optical field and collisional ionization [1]. Absorbing boundary conditions are implemented in the code [2]. The resulting tridiagonal matrices from the finite differencing of the equations are solved using the package PaScal\_TDMA [3,4]. The routines have been modified for complex arguments. The whole code has been modified for the use of GPU's. Figure 1 shows a 2D slice of a preliminary simulation after the laser pulse has propagated about 2.8 cm in air consisting of 80% Nitrogen and 20% Oxygen where the laser pulse has a power of  $\sim 27$  GW which is approximately 10 times higher than the power for self-focusing. It can be seen that the laser pulse (green) has self-focused [5] and generated plasma (green).



## (3) 今後の利用予定:

Improvements in the simulation boundary conditions and longer propagation of the laser pulse will be performed. From the temperature and density of the plasma we will attempt to

simulate the spectra that would be generated.

## References

- [1] J. K. Koga et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.* 43, 025204 (2010)
- [2] C. Zheng, *J. Comp. Phys.* 227, 537 (2007)
- [3] K.-H. Kim, et al., *Comp. Phys. Comm.* 260, 107722 (2021)
- [4] M. Yang, et al., *Comp. Phys. Comm.* 290,108785 (2023)
- [5] R. W. Boyd, *Nonlinear Optics*, Academic Press (1992)

# 画像認識学習プログラムの GPU 並列化の検討

岩岡 和輝

放射線医学研究所 放射線規制科学研究部

## (1) 利用目的:

人工知能技術を用いて画像を認識する仕組み（以降、画像認識学習プログラムと呼ぶ）は、あらゆる科学研究分野において活用が進められている。その活用促進の一つとして、画像認識学習プログラムの GPU 並列化を検討することは重要な課題と言える。本研究は、GPU 並列化の記述になっていない画像認識学習プログラムを複数ノード複数 GPU で並列化されたものに改良することを目的として実施された。

## (2) 利用内容・結果:

過去の講習会で提供された MNIST データセットをベースとした TensorFlow の MirroredStrategy による学習用プログラム、すなわち、単一ノード複数 GPU 画像認識学習プログラム（学習用実行シェルを含む）を修正して、複数ノード複数 GPU 画像認識学習プログラムの作成を実施した。実施した手順を下記に示す。

- ・SGI8600 の GPGPU 演算部を使用
- ・単一ノード複数 GPU 画像認識学習プログラムの解析
- ・単一ノード複数 GPU 画像認識学習プログラムの修正  
（=複数ノード複数 GPU 画像認識学習プログラムの作成）

また、修正内容を表 1、図 1 に示す。

次に、作成した複数ノード複数 GPU 画像認識学習プログラムを使用して学習・推論を実行した。その結果、学習時の正確さ（accuracy）は 0.99 であり正常に学習が実行され、推論についても適切に実行された。

表 1. 単一ノード複数 GPU 画像認識学習プログラムに行った修正内容

ファイル名	修正内容
mnist-train-mg.py (学習用プログラム)	MirroredStrategy を MultiWorkerMirroredStrategy に変更
	複数ノード用にバッチサイズを変更
	MultiWorkerMirroredStrategy を使用するにあたってワーカーごとの学習モデル保存先の変更
	学習後は不要なチーフワーカー以外のワーカーの学習モデル保存先の削除
run_job.sh (学習用実行シェル)	MultiWorkerMirroredStrategy 対応

修正前	<pre>import tensorflow as tf (中略) strategy = tf.distribute.MirroredStrategy()  BUFFER_SIZE = 60000 BATCH_SIZE_PER_REPLICA = 64 BATCH_SIZE = BATCH_SIZE_PER_REPLICA * strategy.num_replicas_in_sync EPOCHS = 12 (中略)</pre>
修正後	<pre>import tensorflow as tf (中略) strategy = tf.distribute.MultiWorkerMirroredStrategy() BUFFER_SIZE = 60000 per_worker_batch_size = 64 tf_config = json.loads(os.environ['TF_CONFIG']) num_workers = len(tf_config['cluster']['worker']) BATCH_SIZE = per_worker_batch_size * num_workers EPOCHS = 12 (中略)</pre>

図 1. 単一ノード複数 GPU 画像認識学習プログラムに行った修正内容 (一部)

次に、バッチサイズによる処理速度の違いを調べるため、複数ノード複数 GPU 画像認識学習プログラムのバッチサイズを 64、128、256、512、1024、2048 に指定し、2 ノード 4GPU における学習時間を測定した。その結果、ワーカー当たりのバッチサイズが大きいほど学習時間が短縮された (図 2)。これは、バッチサイズを大きくしたことで 1GPU が担当する演算量が増え、GPU が得意な高並列での演算が効果的に実施されたことによるものと考えられる。

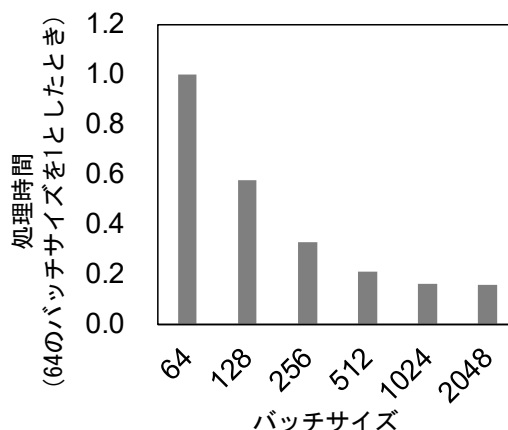


図 2. バッチサイズ別の処理速度

### (3) 今後の利用予定:

複数ノード複数 GPU によって並列化された画像認識学習プログラムを作成した。本成果はサンプルプログラムの一例として、放射線科学研究分野における画像解析の GPU 並列化 (例えば、スパコンを活用した高速化) のために役立つものである。一方、実行環境の条件設定などの事前作業に時間を要し、総合的に見て有意に時間が短縮されない場合もあるため、ユーザーの目的や能力に応じてスパコン等に依らない環境で実施することも合理的な選択であるかもしれない。

## 一般利用者研究成果一覽

1. 量子生命・医学部門

学術論文

- 1) Expectation for utilizing supercomputers in natural radiation research, K. Iwaoka et al., Radiation Environment and Medicine, vol.12, 107-110, 2023.9

2. 量子技術基盤研究部門

学会発表

- 1) Theoretical study of magnetic excitations in a photoexcited Mott insulator on a square lattice, Tsutsui Kenji, Kazuya Shinjo, Shigetoshi Sota, Takami Tohyama, RIXS/REXS workshop 2023, Sendai, Japan, 2023/8/2 (Oral)
- 2) Theoretical study of magnetic excitations in a photoexcited two-dimensional Mott insulator, Kenji Tsutsui, Kazuya Shinjo, Shigetoshi Sota, Takami Tohyama, SCES 2023, Incheon, Korea, 2023/7/5 (Oral)
- 3) 量子ビームと計算物質科学, 坂井 徹, 遠山 貴巳, 筒井 健二, 中野 博生, SPring-8 シンポジウム 2023, 大阪, 2023/9/26 (Poster)
- 4) 隣接引力相互作用のある 1 次元ハバード模型の励起スペクトル, 筒井 健二, 遠山 貴巳, 日本物理学会第 78 回年次大会, 仙台, 2023/9/18 (Poster)
- 5) Exciton quantum dynamics in the molecular logic gates for quantum computing, Y. Yonetani, 第 7 回 QST 国際シンポジウム, 群馬県、高崎市, 2024/7/24 (Poster)
- 6) カットオフで生じる水の層状構造：周期境界条件なしの場合, 米谷 佳晃, 第 26 回理論化学討論会, 茨城減、つくば市, 2024/5/23 (Poster)

学術論文

- 7) Theoretical Study of the Time-Resolved Spin Excitation Spectrum in the Photoexcited Mott Insulator, Kenji TSUTSUI, Kazuya SHINJO, Takami TOHYAMA, JPS Conference Proceedings, vo.38,011159, 2023.6
- 8) Unsolved problem of long-range interactions: dipolar spin-ice study, Y. Yonetani, Journal of Physics: Condensed Matter, vol 36, no. 175401, 2024

### 3. 量子エネルギー部門

#### 学会発表

- 1) Simulation study on global migration of locally generated impurity in JT-60U, Ryuichi Sano, The 26th International Conference on Plasma Surface Interaction in Controlled Fusion Devices (PSI-26), Marseille, France, 2024/5/15 (Poster)
- 2) BA 原型炉設計活動における SONIC コードによる欧州原型炉ダイバータでの熱・粒子排出シミュレーションの進展, 朝倉 伸幸, 星野 一生, SUBBA Fabio, WIESEN Sven, 山本 龍人, 本間 裕貴, 坂本 宜照, 原型炉設計合同特別チーム, 第 40 回プラズマ・核融合学会年会, 盛岡, 2023/11/1 (Oral)
- 3) Simulation studies of power and Helium exhaust in detach divertor and impurity transport for JA-DEMO divertor, N. Asakura, K. Hoshino, Y. Homma, T. Yamamoto, Y. Sakamoto, 26th Int. Conference on Plasma Surface Interaction in Controlled Fusion Devices (PSI-26), Marseille, France, 2024, 5 (Poster)
- 4) Simulation studies of power and Helium exhaust for Japanese and European DEMO divertors by SONIC divertor code, N. Asakura, K. Hoshino, Y. Homma, F. Subba, S. Wiesen, Y. Sakamoto, and Joint Special Design Team for Fusion DEMO, 29th IAEA Fusion Energy Conference (FEC2023), London, Great Britain, 2023, 10 (Poster)
- 5) 原型炉ダイバータにおけるタングステンモノブロックの損耗と再堆積の評価, 大宅諒, 星野 一生, 朝倉 伸幸, 坂本 宜照, 大野 哲靖, 花田 和明, 第 40 回プラズマ・核融合学会年会, 盛岡, 2023/11/1 (Poster)
- 6) Evaluation of erosion and re-deposition on the W-monoblock of JA DEMO divertor", M. Oya, K. Hoshino, N. Asakura, Y. Sakamoto, N. Ohno, K. Hanada, 26th Int. Conference on Plasma Surface Interaction in Controlled Fusion Devices (PSI-26), Marseille, France, 2024, 5 (Poster)
- 7) Assessment of radiation dose rate in main building area of A-FNS facility, Saerom Kwon et al., 15th International Symposium on Fusion Nuclear Technology (ISFNT-15), Las Palmas de Gran Canaria, Spain, 2023.09 (Poster)
- 8) 結晶粒径を考慮した  $^9\text{Be}$  熱中性子散乱則データの効果 (2) A-FNS 試験モジュール核特性への影響, 権 セロム 他, 日本原子力学会秋の大会, 名古屋, 2023.09 (Oral)

## 学術論文

- 9) Recent progress of plasma exhaust concepts and divertor designs for tokamak DEMO reactors, N. Asakura, K. Hoshino, S. Kakudate, F. Subba, J.-H. You, S. Wiesen, T.D. Rognlien, R. Ding, S. Kwon,, Nuclear Materials and Energy, vol. 35, 101446, 2023.5.11
- 10) Evaluation of local erosion and deposition on the W-monoblock of JA-DEMO divertor, M. Oya, K. Hoshino, N. Asakura, Y. Sakamoto, N. Ohno, K. Hanada, Nuclear Materials and Energy, vol.41,101793, 2024.12,
- 11) Assessment of radiation dose rate in main building area of A-FNS facility, Saerom Kwon et al., Fusion Engineering and Design, vol.201, 114274, 2024.3
- 12) Problems on copper data above 10 MeV in ENDF/B-VIII.0 and JEFF-3.3, Saerom Kwon et al., Annals of Nuclear Energy, vol.202, 110497, 2024.3
- 13) FENDL: A library for fusion research and applications, G. Schnabel et al., Nuclear Data Sheets, vol.193, 1-78, 2024.2



発行年月 2024年12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

情報基盤管理部 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](mailto:super_comp_jimu@qst.go.jp)

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

©2024 国立研究開発法人 量子科学技術研究開発機構