JAEA-Review
2006-025

JAEA-Review

平成17年度大型計算機システム利用による研究成果報告集

Summaries of Research and Development Activities
by Using JAEA Computer System
In FY2005 (April 1, 2005 - March 31, 2006)

情報システム管理室

Information Technology Systems´ Management and Operating Office

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

October 2006

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。
本レポートの入手並びに著作権利用に関するお問い合わせは、下記あてにお問い合わせ下さい。
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ホームページ（http://www.jaea.go.jp/index.shtml）より発信されています。このほか財団法人原子力弘済会資料センター*では実費による複写頒布を行っております。

〒319-1195　茨城県那珂郡東海村白方白根 2 番地 4
日本原子力研究開発機構　研究技術情報部　研究技術情報課
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920

*〒319-1195　茨城県那珂郡東海村白方白根 2 番地 4　日本原子力研究開発機構内

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency
Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to
Intellectual Resources Section, Intellectual Resources Department,
Japan Atomic Energy Agency
2-4 Shirakata Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan
Tel +81-29-282-6387,　Fax +81-29-282-5901

© Japan Atomic Energy Agency, 2006

JAEA-Review　2006-025

平成 17 年度
大型計算機システム利用による研究成果報告集

日本原子力研究開発機構
システム計算科学センター
情報システム管理室

（2006 年　8 月　8 日受理）

日本原子力研究開発機構システム計算科学センターでは、研究活動を支援するためにスーパーコンピュータをはじめとする大型計算機システムを導入し、研究活動に役立たせるとともに、計算機システム及びネットワークシステムの運用管理を行っている。

本報告書は、平成 17 年度における日本原子力研究開発機構の大型計算機における利用実績を集計し、利用ユーザからの利用報告に基づいた研究内容、利用及びその成果についてまとめたものである。

原子力科学研究所　（駐在）：〒319-1195　茨城県那珂郡東海村白方白根２－４

JAEA-Review 2006-025

Summaries of Research and Development Activities by using JAEA Computer System In FY2005 (April 1, 2005 – March 31, 2006)

Information Technology Systems' Management and Operating Office

Center for Computational Science & e-Systems
Japan Atomic Energy Agency
Tokai-mura,Naka-gun,Ibaraki-ken

(Received August 8, 2006)

Center for Promotion of Computational Science and Engineering (CCSE) of Japan Atomic Energy Agency (JAEA) installed large computer systems including super-computers in order to support research and development activities in JAEA.

CCSE operates and manages the computer system and network system. This report presents usage records of the JAERI computer system and the big users' research and development activities by using the computer system in FY2005 (April 1, 2005 – March 31, 2006)

Keywords: JAEA Computer System, Super Computer, Computational Science and Engineering, User's Research and Development

目　　次

まえがき 1

１．概要 2

２．機構大型計算機システム環境 2

３．平成 17 年度における大型計算機の利用実績 5

４．大型計算機利用による研究成果..... 10
4.1　安全性研究センター 10
4.1.1　FLUENT コードによる温度成層化現象の解析 10
4.1.2　過渡臨界実験装置 TRACY を用いた臨界事故模擬実験における線量測定の解析..... 12
4.2　先端基礎センター 13
4.2.1　Co^{x}/C_{60} 複合物の原子レベルの構造に関する理論的研究..... 13
4.3　原子力基礎工学研究部門 16
4.3.1　PHITS を用いた航空機乗務員・宇宙飛行士の被ばく線量評価 16
4.3.2 250,350MeV 陽子入射による厚いターゲットからの 0 度方向における中性子生成エネルギースペクトル計算..... 19
4.3.3 将来型原子炉内気液二相流特性に関する大規模シミュレーション..... 22
4.3.4 選択チャンネル核分裂モデルによる核分裂収率計算法の研究..... 25
4.3.5 レーザー逆コンプトンガンマ線を用いた光核反応実験のデータ解析..... 27
4.3.6 溶融塩の XAFS シミュレーション..... 29
4.3.7 アイリッシュ海における ^{137}Cs の長期間シミュレーション 32
4.3.8 DNA 鎖切断に関する理論的研究..... 34
4.3.9 ボクセルファントムを用いた成人日本人における光子吸収割合評価..... 37
4.3.10 原子力緊急時対応のための長距離大気拡散予測モデルの開発..... 40
4.4　量子ビーム応用研究部門 42
4.4.1 DNA の構造とダイナミクスの配列依存性 42
4.4.2 生体分子シミュレーションシステムによる生体分子機能の解明研究.....45
4.4.3 生体分子シミュレーションシステムによる生体分子機能の解明研究.....46
4.4.4 ポイズン付き非結合型液体水素モデレータの中性子パルス特性の検討 47
4.4.5 物質・生命科学実験施設に関わる遮蔽設計.....50
4.4.6 J-PARC 加速器施設の放射線遮蔽設計….....52
4.4.7 耐放射線性 SiC デバイス用酸化膜の第一原理分子動力学シミュレーション 54

4.4.8 3D particle-in-cell simulation of the electron self-injection for the laser-plasma cathode 57
4.4.9 相対論的高強度レーザーとプラズマとの相互作用シミュレーションならびに光量子実験の理論的支援　－レーザー航跡場電子加速－ 62
4.4.10 相対論的高強度レーザーとプラズマとの相互作用シミュレーション ならびに光量子実験の理論的支援　－レーザー駆動イオン加速－ 64
4.4.11 高強度極短パルスレーザーと中性ガスの相互作用の研究 66
4.4.12 N_2 分子の enhanced ionization の第一原理計算 68
4.4.13 有機分子のトンネルイオン化率の第一原理計算 70
4.4.14 大強度レーザー場中にある透明素材の第一原理計算 73
4.4.15 高強度短パルスレーザーによるプラズマ層からの高エネルギー電子生成の 密度依存性 75
4.4.16 第一原理分子動力学による化学反応のシミュレーション 78
4.5 核融合研究開発部門 80
4.5.1 低アスペクト比トカマク炉におけるアルファ粒子閉じ込めシミュレーション 80
4.5.2 JT-６０U へのフェライト鋼装着後の高エネルギーイオン 閉じ込め評価 81
4.5.3 OFMC コードを用いたα粒子に起因するトロイダル回転の研究 82
4.5.4 先進的粒子コード PARASOL による SOL•ダイバータプラズマのシミュレーション 83
4.5.5 輸送-MHD 統合 ELM シミュレーション 85
4.5.6 JT-60U へのフェライト鋼導入に伴う OFMC コードの変更 88
4.5.7 ジャイロ運動論的ブラゾフ CIP コードの開発 89
4.5.8 トカマクプラズマの磁気流体不安定性の非線形発展に関する 3 次元 full-MHD シミュレーション研究 92
4.5.9 原子・緩和過程が関与するプラズマ構造形成のシミュレーション 94
4.5.10 ジャイロ流体モデルによる多スケール乱流シミュレーション 97
4.5.11 流体モデルによるイオン乱流輸送の研究 100
4.5.12 回転プラズマにおける突発的な磁気島形成と長時間成長 102
4.5.13 JT-60 フェライト鋼設置改造工事のための数値計算 104
4.5.14 ＩＴＥＲ装置の核解析 107
4.6 次世代原子力システム研究開発部門 109
4.6.1 FBR 炉心損傷事故の 3 次元解析 109
4.6.2 高速炉燃料集合体変形解析コードの開発 112
4.6.3 モンテカルロコードを用いた高速炉炉物理解析 114
4.6.4 高サイクル熱疲労評価に向けた T 管合流部の熱流動解析 117
4.6.5 SIMMER-IV コードを用いた EAGLE プロジェクト炉内中規模試験解析 119

4.6.6 高速炉の熱流動現象に関するシミュレーション.....121
4.6.7 ２次元および３次元の電磁場解析法を使った、蒸気発生器伝熱管の渦電流探傷システムの解析と最適化.....124
4.7 地層処分研究開発部門.....127
4.7.1 モンテカルロ法によるベントナイト分散系の屈曲度の計算.....127
4.8 大洗研究開発センター.....130
4.8.1 JMTR を用いた照射試験における中性子束、スペクトル等照射パラメータの評価.....130
4.9 計算科学技術推進センター.....133
4.9.1 大規模分子動力学法による金属中転位のピンニング挙動解析.....133
4.9.2 3 次元仮想振動台構築のための組立構造解析.....135
4.9.3 金属ガラスのせん断変形に関する分子動力学法シミュレーション.....139
4.9.4 大規模分子動力学法による金属中の照射欠陥の挙動解析.....141
4.9.5 隙間腐食における溶液化学の格子ボルツマンシミュレーション.....143
4.9.6 第一原理計算による金属における不純物の粒界偏析と脆化の研究.....145
4.9.7 水素化マグネシウムを基にした水素貯蔵材料のデザイン.....147
4.9.8 Pt と CO の相互作用における合金化・歪みに関する第一原理計算.....149
4.9.9 計算機マテリアルデザイン(CMD)による磁性表面上での水素のオルソ・パラ転換効率の制御.....151
4.9.10 超高強度レーザーの固体照射による高エネルギー電子発生.....154
4.9.11 計算化学による有機化学反応での水素結合の役割の追跡.....157
4.9.12 計算化学によるジシレン化合物へのアルコール付加経路の追跡.....160
4.9.13 Cu(100)及び Cu(110)表面上における水素原子の量子力学的振る舞い.....163
4.9.14 様々な有機分子と表面間の相互作用に関する第一原理計算研究.....165
あとがき.....168
付録　平成 17 年度大型計算機システム利用成果一覧.....169

Contents

Foreword 1

1. Overview 2

2. JAEA Large Computer System 2

3. Computer Usage Records in FY2005 5

4. Research and Development Activity by Using JAEA Computer System 10

4.1 Nuclear Safety Rsearch Center 10
4.1.1 Analysis of thermal stratification phenomena using FLUENT code 10
4.1.2 Analysis of Dose Measurements in Criticality Accident Situation at Transient Experiment Critical Facility, TRACY 12

4.2 Advanced Science Research Center 13
4.2.1 Theoretical Study of Atomic Structure Evolution of the Co_x/C_{60} Composites 13

4.3 Nuclear Science and engineering Direcorate 16
4.3.1 Dose evaluation of aircrews and astronauts by the PHITS code 16
4.3.2 Calculation of Thick Target Neutron Yield at 0 Degree by 250 and 350 Mev Protons 19
4.3.3 A Large-Scale Simulation on Gas-Liquid Two-Phase Flow Characteristics in Advanced Nuclear Reactor Cores 22
4.3.4 Study on calculation method for fission product yield by selective channel scission model 25
4.3.5 Data analysis for the photonuclear experiment with laser-Compton scattering gamma rays 27
4.3.6 XAFS simulation for molten salts 29
4.3.7 Long-term simulation of ^{137}Cs in the Irish Sea 32
4.3.8 Theoretical studies on DNA single strand break 34
4.3.9 Evaluation of photon absorbed fractions for adult Japanese by using voxel phantoms 37
4.3.10 Development of a long-range atmospheric transport model for

nuclear emergency 40

4.4 Quantum Beam Science Direcorate 42
4.4.1 Sequence-Dependence of DNA Conformation and its Dynamics 42
4.4.2 Biomolecular function studied by parallel molecular dynamics simulation 45
4.4.3 Biomolecular function studied by parallel molecular dynamics simulation 46
4.4.4 Neutronic studies of poisoned decoupled liquid-hydrogen moderator 47
4.4.5 Shielding Design on Materials and Life Science Experimental Facility 50
4.4.6 Radiation Shielding Designs of Accelerator Facilities in J-PARC 52
4.4.7 First-Principles Molecular Dynamics Simulation of Oxide Layers for Radiation-Tolerant SiC Devices..... 54
4.4.8 3D particle-in-cell simulation of the electron self-injection for the laser-plasma cathode..... 57
4.4.9 Relativistically strong laser-plasma interaction simulation and theoretical support for experiments at APR center 62
4.4.10 Simulation of the relativistically strong laser interaction with plasma and theoretical support for experiments at APR center 64
4.4.11 High Intensity Ultra-short pulse laser and neutral gas interaction research 66
4.4.12 First-principle calculation for enhanced ionization of N_2 molecule 68
4.4.13 First-principle calculations for tunnel ionization rate of organic molecules..... 70
4.4.14 First-principle calculation for the electron dynamics of transparent material under the intense laser field 73
4.4.15 Density dependence of high energy electron generation from a plasma layer with high-intensity short-pulse laser 75
4.4.16 First Principles Molecular Dynamics Simulations of Chemical Reactions..... 78

4.5 Fusion Research and Development Directorate 80
4.5.1 Simulation of Alpha-Particle Confinementin a Low-Aspect-ration Tokamak Reactor 80
4.5.2 Evaluation of Confinement of energetic ions after ferritic insertion on JT-60U 81
4.5.3 Study of toroidal rotation induced by alpha particles based on

OFMC-code 82
4.5.4 Simulation of SOL-Divertor Plasmas Using Advanced Particle Code PARASOL 83
4.5.5 Integrated ELM simulation based on transport and MHD 85
4.5.6 Modification of OFMC-code for JT-60U with ferritic steel..... 88
4.5.7 Development of gyrokinetic Vlasov CIP code 89
4.5.8 3D full-MHD simulation studies of nonlinear evolution of magnetohydrodynamics instabilities in tokamak plasmas 92
4.5.9 Simulation of structure formation of plasmas dominated by atomic and relation process 94
4.5.10 Multi-scale turbulence simulation based on gyro-fluid simulation 97
4.5.11 Study of ion turbulent transport based on a fluid model..... 100
4.5.12 Rapid onset and long term evolution of the magnetic island formation in rotating plasmas 102
4.5.13 Numerical Calculations for Ferrite Insert of JT-60 104
4.5.14 Nuclear Analysis of the ITER 107

4.6 Advansed Nuclear System Research and Development Directorate 109
4.6.1 Three-Dimensional Analyses of Core Disruptive Accidents in FBR 109
4.6.2 Development of a FBR Fuel Bundle-duct Interaction Analysis Code..... 112
4.6.3 Reactor Physics Analyses on Fast Reactors by Using the Monte-Carlo Code..... 114
4.6.4 Numerical Analysis on Fluid Mixing in Tee Piping for Evaluation of High Cycle Thermal Fatigue 117
4.6.5 SIMMER-IV Calculation of the Middle-Scale In-Pile Test in the EAGLE Project..... 119
4.6.6 Numerical Simulations of Thermal Hydraulic Phenomena in Fast Reactors 121
4.6.7 Analyses and Optimizations of Eddy Current Inspection System of Steam Generator Tubes using 2D and 3D Electromagnetic Analysis 124

4.7 Geological Isolation Research and Development Directorate 127
4.7.1 The tortuosity in disperse system of bentonite by Monte-Carlo simulation 127

4.8 Oarai Research and Development Center 130
4.8.1 Evaluation of Irradiation Parameters such as

Neutron Flux/Spectrum in Irradiation Test of JMTR 130

4.9 Center for Promotion of Computational Science and Engineering 133
4.9.1 A large scale MD simulation for the pinning behavior of a dislocation in metals 133
4.9.2 Assembly structure analysis for the construction of 3D virtual vibration test bed 135
4.9.3 Molecular Dynamics Simulation of Shear Bands in Metallic Glass 139
4.9.4 A large scale MD simulation for the behavior of an irradiation defect in metals 141
4.9.5 Lattice Boltzmann Simulation of Solution Chemistry for Crevice Corrosion 143
4.9.6 First-principles study on the grain boundary embrittlement of metals by impurity segregation 145
4.9.7 Design of MgH_2-based Hydrogen Storage Materials 147
4.9.8 Ab Initio Study of Alloying and Straining Effects on CO Interaction with Pt 149
4.9.9 Control of ortho-para H_2 conversion yield on magnetic surfaces by computational materials design (CMD) 151
4.9.10 High energy electron generation from solid target irradiated by ultra-intense laser pulses 154
4.9.11 Computational study on the rule of hydrogen bonds in organic chemical reactions 157
4.9.12 A computational study on the addition path of alcohols to disilene derivatives 160
4.9.13 Quantum States of Hydrogen (H, D, T) Atoms on Cu(1 0 0) and (1 1 0) Surfaces 163
4.9.14 Density functional studies on the interactions between various metals and organic molecules 165

Postscript 168

Appendix

List of Reports and Presentaions by JAERI Computer System Users 169

まえがき

日本原子力研究開発機構では原子力に関連したさまざまな分野の研究開発が行われており、それらのほとんどの分野で大型計算機が利用されている。

平成 17 年度における計算機利用実績の統計から、大型計算機のユーザ数は 1200 人を超えている状況にある。

特に近年では、原子分子レベルから原子力プラント、大気拡散といった環境、地球レベルまで各分野での大規模シミュレーションによる解析計算が行われている。

それらの中で、平成 17 年度に多くの CPU 時間を利用したユーザに、計算機を利用した研究の概要及び成果の報告をお願いした結果、６６件が集まった。

これらは 1 年間に数万時間から百万時間以上という膨大な CPU 時間を必要とする解析、計算が重要な役割を果している研究である。

原子力機構の計算機システムがどのような研究に利用され、研究成果が得られているかご理解を頂くとともに、機構内、原子力界のみならず他の分野での研究者の方々の参考としていただければ幸いである。

1．概　　要

日本原子力研究開発機構（以下「「機構」）システム計算科学センターでは、スーパーコンピュータをはじめとする大型計算機システムを導入し、計算機システム及びネットワークシステムの運用管理を通して機構の研究活動を支援している。

スーパーコンピュータは今や研究活動にとって欠くことのできないインフラストラクチャとなっており、実験、理論に次ぐ第三の方法としてこれまで実験不可能だった現象の解明などに利用されている。

本報告書は、機構の計算機を利用することにより得られた研究成果について調査を行い、その結果をまとめたものである。

機構における主な研究用計算機システム設置状況は平成 17 年度においては、東海原子力科学研究所 Altix3700Bx2 システム、PC クラスタ A システム、PC クラスタ B システム及び VPP5000 システム、那珂研究所 Prism システム、関西研究所 SC/ES40 システム及び ITBL システム、大洗研究開発センター、東京地区 pSeries 及び SX-6 システムである。

調査した内容は、計算機利用の内容及び利用の結果、計算機を使用して得られた研究成果のレポート、外部発表についての数、タイトル及び今後の利用計画である。

2．機構大型計算機システム環境

機構における平成18年3月末現在の計算機システムの設置状況を表-2.1及び図-2.1に示す。

表-2.1　機構の計算機システムの主な仕様

平成 18 年 3 月 現在

	機　種	タイプ	CPU 数/ノード数	システム性能(GF)	主記憶、総主記憶容量(GB)	ディスク容量(TB)	OS	コンパイラ
東海	並列計算機 Altix3700 Bx2	スカラ	2048/16	13000	共有型 13TB	120	SGI Linux	Fortran, C/C++
	PC クラスタ A Altix350	スカラ	64/32	409.6	分散型 256	2	SGI Linux	Fortran, C/C++
	PC クラスタ ApproHyperBlade	スカラ	64/32	391.6	分散型 128	2	ReadHat (Linux)	Fortran, C/C++
	VPP5000	ベクトル	16PE	153.6	分散型 128	10	UXP/V	Fortran77/VPP, Fortran90/VPP
大洗	科学技術計算機 HPC2500	スカラ	384	2396	共有分散 1536	10	日本語 Solaris8	Fortran, C/C++
	汎用機 GS21-400/10J	スカラ	1	－	0.512	0.2	MSP/EX	FORT77EX
那珂	大規模可視化サーバ Prism	スカラ	128	768	1TB	－	SGI Linux	Fortran, C/C++
	pSeries690	スカラ	8	46.42	共有型 16	4.5	AIX	XL Fotran C++
関西	SSC/MPP HP SC/ES40	スカラ	908	1513	分散型 2056	28	Tru64 UNIX	Fortran77,90 HPF
	ITBL 計算機 PRIMEPOWER	スカラ	512/4	1128	共有/分散 1152	15	日本語 Solaris8	Fortran C,C++
東京	SX-6	ベクトル	3	96	共有/分散 48	1	Super-UX	Fortran C,C++
	pSeries690	スカラ	16/1	83.2	共有型 96	2	AIX5L	Fortran C,C++



図-2.1　機構の大型計算機システム

３．平成１７年度における大型計算機の利用実績

3.1 東海原子力科学研究所

東海原子力科学研究所のシステムは、機構内において最大規模であり、当機構全体の研究・技術開発の推進に重要な役割を果たす中核的な共用計算機して位置づけられ、利用者は旧原研及び旧サイクルの旧二法人の全体にわたる。各部門の利用実績は基礎・基盤、計算科学、核融合及び量子ビームと幅広い分野で利用されている。平成 17 年度からは新たに次世代原子力（FBR サイクル）の利用が開始された。

なお、新システム(Altix3700Bx2, PC クラスタ A,PC クラスタ B)は、平成 17 年 4 月から本格的に運用が開始された。GS21 については、平成 17 年 3 月末に大洗研究開発センターの GS21 に集約され、運用を終了した。

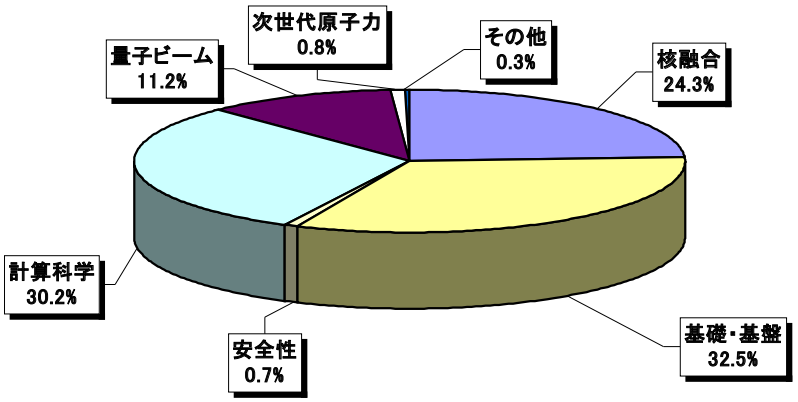
(1) 利用者数

登録ユーザ：933 人　利用実績ユーザ：668 人

(2) 処理件数及び CPU 利用実績(月別)

	Altix3700Bx2			PC クラスタ A			PC クラスタ B		
	バッチ処理件数	会話処理件数	CPU 時間	バッチ処理件数	会話処理件数	CPU 時間	バッチ処理件数	会話処理件数	CPU 時間
4 月	5,914	7,153	344,837	1,153	2,462	3,727	474	1,001	1,238
5 月	7,577	9,999	679,046	4,871	1,762	5,568	305	621	3,449
6 月	15,365	13,582	920,405	1,912	1,576	9,002	533	766	1,070
7 月	17,355	20,965	855,431	1,652	1,320	4,142	1,357	888	5,908
8 月	15,806	19,879	966,150	2,045	1,110	2,666	1,419	687	6,892
9 月	11,205	13,927	872,431	3,667	1,020	4,074	616	612	3,211
10 月	7,740	20,214	927,675	3,435	952	5,589	1,750	565	9,397
11 月	12,334	24,149	1,056,948	1,912	916	9,924	10,905	595	17,032
12 月	14,446	20,665	1,079,164	2,174	1,244	9,794	1,259	554	5,235
1 月	12,030	15,532	1,008,403	4,492	1,222	11,366	2,373	621	12,946
2 月	11,311	7,539	863,967	2,254	1,569	11,141	1,233	705	8,396
3 月	8,889	7,483	1,008,159	2,353	1,404	9,349	3,087	958	9,623
合計	139,972	181,087	10,582,616	31,920	16,557	86,342	25,311	8,573	84,396

	VPP5000			GS21		
	バッチ処理件数	会話処理件数	CPU時間	バッチ処理件数	会話処理件数	CPU時間
4月	1,280	1,844	2,722	2,706	12,662	105
5月	1,270	1,152	4,295	2,261	10,356	89
6月	1,817	1,195	3,532	2,703	10,482	81
7月	1,506	1,228	3,819	2,221	10,200	80
8月	812	1,003	1,655	1,941	11,752	88
9月	1,273	777	1,619	2,520	10,764	84
10月	1,871	598	1,550	2,863	9,176	125
11月	1,179	634	1,839	2,188	5,260	108
12月	827	841	2,558	1,774	3,624	65
1月	1,024	964	5,713	2,401	3,421	54
2月	1,396	958	5,960	1,714	3,020	50
3月	1,250	715	6,174	2,111	3,237	52
合計	15,505	11,909	41,437	27,403	93,954	979



各部門別ＣＰＵ時間利用実績（５システム合計）

3.2 那珂核融合研究所

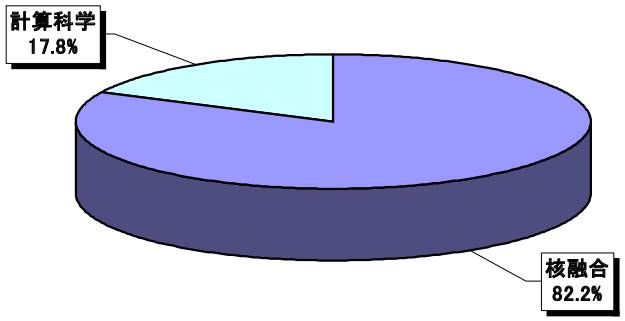
那珂核融合研究所のシステムは、主に核融合研究の大規模シミュレーションの計算結果を可視化処理する Prism、核融合研究の実験解析等を行う pSeries650 で構成されている。各部門の利用実績は、利用者も利用分野も大部分が核融合となっている。なお、Prism は、平成 17 年 4 月から東海原子力科学研究所の新システムとともに、本格的な運用が開始された。

(1) 利用者数

登録ユーザ：219 人　利用実績ユーザ：189 人

(2) 処理件数及び CPU 利用実績(月別)

	Prism			pSeries650		
	バッチ処理件数	会話処理件数	CPU時間	バッチ処理件数	会話処理件数	CPU時間
4 月	897	1,922	3,468	64	1,970	400
5 月	6,363	1,477	19,479	134	1,581	223
6 月	13,735	1,012	34,344	160	2,348	306
7 月	5,116	1,638	18,130	472	2,186	391
8 月	6,443	1,700	40,219	143	2,011	280
9 月	5,152	1,352	19,578	243	2,096	924
10 月	1,540	1,560	25,595	489	2,374	1,094
11 月	8,428	1,229	41,654	315	3,031	1,533
12 月	9,116	1,443	35,361	115	3,356	1,197
1 月	5,801	1,171	28,518	272	2,953	351
2 月	4,323	779	39,925	455	3,117	569
3 月	3,179	1,209	44,631	609	3,715	1,025
合計	70,093	16,492	350,900	3,471	30,738	8,293



各部門別ＣＰＵ時間利用実績（２システム合計）

3.3 大洗研究開発センター

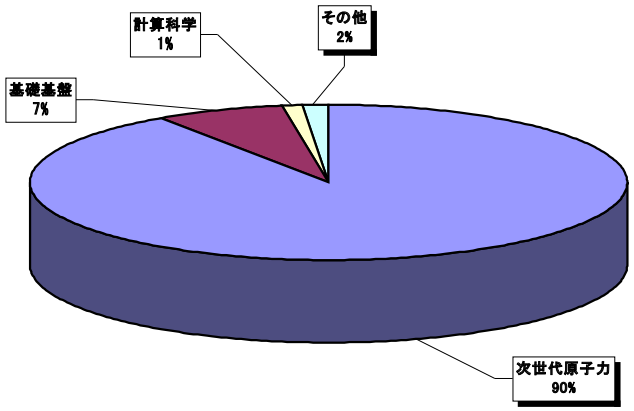
大洗研究開発センターのシステムは、主にFBRサイクルの実用化プラントの設計用として利用されるHPC2500と人事・財務等の業務システムで利用されるGS21で構成されている。各部門の利用実績は、利用者も利用分野も大部分が次世代原子力となっている。

(1) 利用者数

登録ユーザ：1622人　利用実績ユーザ：594人

(2) 処理件数及びCPU利用実績(月別)

	HPC2500			GS21		
	バッチ処理件数	会話処理件数	CPU時間	バッチ処理件数	会話処理件数	CPU時間
4月	1,286	1,382	154,339	4,730	6,222	141
5月	1,916	1,551	89,994	5,011	5,292	140
6月	3,071	1,721	174,639	6,035	6,473	127
7月	1,774	1,677	147,878	6,567	4,933	193
8月	1,880	1,860	127,865	6,071	4,604	122
9月	1,682	1,693	165,805	5,516	4,759	201
10月	1,467	1,746	181,518	4,711	3,664	66
11月	1,465	1,806	172,912	4,638	3,579	98
12月	2,193	1,799	175,937	4,360	2,793	80
1月	1,365	1,515	175,217	7,095	3,733	48
2月	1,951	1,446	179,708	4,692	3,783	128
3月	1,088	1,480	201,639	4,622	4,493	149
合計	21,138	19,676	1,947,450	64,048	54,328	1,492



各部門別ＣＰＵ時間利用実績（２システム合計）

3.4 関西光科学研究所

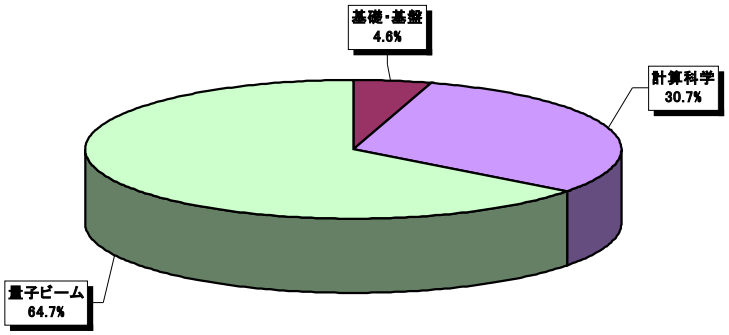
関西光科学研究所のシステムは、主に光量子科学研究の大規模シミュレーション計算を超並列で長時間連続処理する AlphaServer と ITBL 計画の下で利用する中核的計算機である PRIMEPOWER で構成されている。各部門の利用実績は、利用者も利用分野も大部分が量子ビーム、計算科学となっている。

(1)利用者数

登録ユーザ：485 人　利用実績ユーザ：307 人

(2)処理件数及び CPU 利用実績(月別)

	AlphaServer			PRIMEPOWER		
	バッチ処理件数	会話処理件数	CPU時間	バッチ処理件数	会話処理件数	CPU時間
4 月	764	28,795	382,209	7,589	3,600	301,055
5 月	1,646	36,903	362,442	10,159	3,193	313,212
6 月	687	29,672	465,559	17,374	3,180	305,933
7 月	743	28,664	474,235	11,278	3,086	280,704
8 月	555	36,159	288,423	4,966	2,646	332,135
9 月	566	18,329	384,157	5,774	2,274	327,797
10 月	1,006	21,187	447,672	10,788	2,654	312,994
11 月	812	13,609	311,824	7,974	4,814	289,158
12 月	615	8,441	269,189	5,099	3,065	288,538
1 月	793	15,785	384,490	6,542	2,645	319,318
2 月	662	25,242	234,664	3,275	2,742	290,335
3 月	479	26,415	214,755	1,368	1,826	314,284
合計	9,328	289,201	4,219,618	92,195	35,725	3,675,463



各部門別ＣＰＵ時間利用実績（２システム合計）

4.大型計算機利用による研究成果

4.1 安全性研究センター

4.1.1 FLUENT コードによる温度成層化現象の解析

Analysis of thermal stratification phenomena using FLUENT code

渡辺　正

熱水力安全評価研究グループ

１．利用の概要（要約）：

熱水力安全評価研究グループでは、軽水炉の熱水力的安全性に関する実験データを整備するため、OECD/NEA ROSA プロジェクトを実施しており、実験と並行して CFD コードの安全問題への適用性の検討を行っている。CFD コードは高価であり、また、複雑な原子炉の体系においてコードの性能を調べるためには、大規模かつ長時間の解析を多数実施し実験結果と比較検討する必要があるため、大型並列計算機の利用は必要不可欠である。

２．利用の内容・結果：

OECD/NEA ROSA プロジェクトで実施を予定している低温側配管への非常用炉心冷却水注入時の温度成層化実験に対して､代表的CFDコードであるFLUENTによる予備解析を行った。17 年度は、低温側配管から圧力容器にかけての定常な流れ場に関して、ノーディングや乱流モデルの評価を行い、以下の結果を得た。

- 配管の湾曲のため、流速及び温度分布に旋回が見られる（図 1 参照)。
- 乱流モデルとしては、標準ｋ－ε モデルが良好な結果を与える。
- 温度成層化は、注入点から圧力容器まで続く。
- 圧力容器入り口で流路形状が変わるため、流速は増加する。
- 二相状態での計算も FLUENT により可能である(図 2 参照)。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

渡辺正、中村秀夫、

“コールドレグ内温度成層化現象の実験及び解析”、

日本原子力学会 2005 年秋の大会、八戸、9 月 14 日(2005)。

４．今後の利用予定：

温度成層化現象の解析において、数値解法や解析モデル等の影響を引き続き調べ、二相流への FLUENT コードの適用性の検討を進める予定。

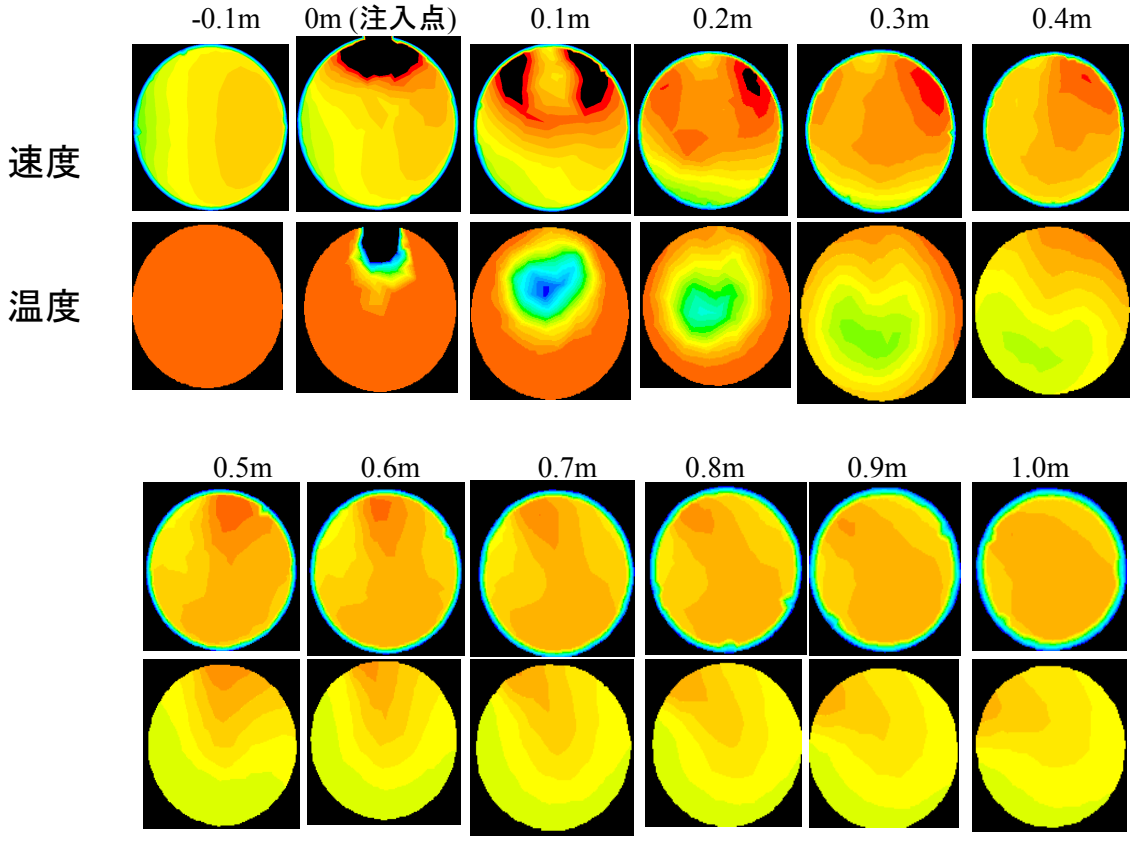


図 1. 配管断面内の速度及び温度分布
（注入点基準、数字は注入点から圧力容器側へ向かう距離）

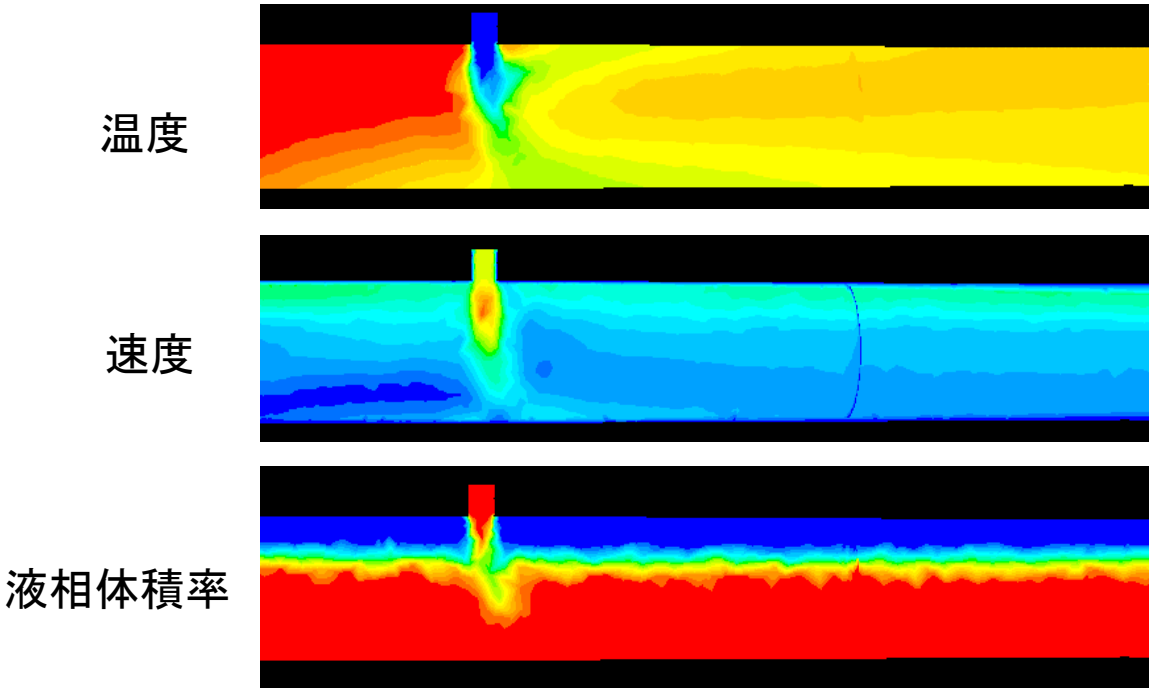


図 2. 二相状態への冷却水注入の計算例

4.1.2 過渡臨界実験装置 TRACY を用いた臨界事故模擬実験における線量測定の解析

Analysis of Dose Measurements in Criticality Accident Situation at Transient Experiment Critical Facility, TRACY

村崎　穣

核燃料サイクル施設安全評価研究グループ

１．利用の概要（要約）：

核燃料サイクル施設安全評価研究グループでは、臨界事故時における線量特性の研究のため、原子力機構原子力科学研究所燃料サイクル安全工学研究施設（NUCEF）の過渡臨界実験装置 TRACY において、臨界事故模擬実験時における中性子線量及びγ線量の測定を行っている。この測定に対して、連続エネルギーモンテカルロコード MCNP を用いた解析を行い、線量計設置位置における線量を求め、測定値と比較することにより、MCNP コードの計算精度を検証している。この計算で用いている MCNP コードのような連続エネルギーモンテカルロコードは、統計精度のよい結果を得るためには多大な計算時間を必要とする。このため、Altix3700BX2 において、32CPU を用いた MCNP の並列計算を行った。この並列計算により、従来用いていた PC による計算と比較して、計算速度が 30 倍以上向上し、解析作業の効率が大幅に改善された。

２．利用の内容・結果：

TRACY 炉心タンクと炉室内構造物をモデル化し、中性子線量及びγ線量の双方を MCNP コードにより求めた。計算対象となる TRACY の運転は、2005 年 10 月 31 日に行われた R325 から同年 11 月 22 日に行われた R328 までの全４ランである。各ランにおいて、中性子線量測定点は３点、γ線量測定点は５点あり、それぞれ点検出器タリーを用いて線量を求めた。点検出器タリーによる結果は、しばしば異常な統計を示すことがあるため、何ケースか初期乱数を変更して再計算を行う必要があった。求めた線量は、各運転の積算出力で規格化され、測定値と比較された。比較の結果、MCNP 計算値は、中性子線量については概ね測定値と一致したが、γ線量については過小評価となった。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

なし。

４．今後の利用予定：

今年度の TRACY 実験の解析を行う。

4.2 先端基礎センター

4.2.1 Co_x/C_{60} 複合物の原子レベルの構造に関する理論的研究

Theoretical Study of Atomic Structure Evolution of the Co_x/C_{60} Composites

Pavel Avramov
先端基礎研究センター
超極限環境下における固体の原子制御と新奇物質の探索グループ

１．利用の概要（要約）：

The JAEA supercomputer system (ITBL and AltixBx2 machines) has been used to calculate the atomic and electronic structure of the novel Co_x/C_{60} ($x \leq 2$) composites in cluster approach (89 $Co_m(C_{60})_n$ (m=1, 2, n=2, 3) clusters) using B3LYP/6-31G* approximation. For the m=1, 2 the η^2 type of coordination is energetically preferable. The η^5 one is the highest energy isomer and other isomers ($\eta^{2\prime}$ or mixed structures like η^2/η^5, $\eta^{2\prime}/\eta^5$ and $\eta^{2\prime}/\eta^2$) have middle energies. The theoretical atomic structures match well the experimental structural data. For the m=2 the bridged cobalt dimer in triplet spin state bonding the C_{60} cages is the lowest energy isomer. The B3LYP/6-31G* calculations of $Co_2(C_{60})_3$ clusters show that the migration of cobalt ions around the C_{60} cages occurs through hopping between the η^2- and $\eta^{2\prime}$-sites. At the final stages of migration a formation of several cobalt dimer structures is possible.

２．利用の内容・結果：

Atomic and electronic structure of a new class of Co_x/C_{60} ($x \leq 2$) composites synthesized under unequilibrium conditions has been studied using B3LYP/6-31G* approach. To model different cobalt content a set of $Co_m(C_{60})_n$ (m=1, 2, n=2, 3) clusters (89 in total number) has been calculated. For the m=1, 2 the η^2 type of coordination is energetically preferable. The lowest energy structure of the m=1 systems is the $3\eta^2$ triangle planar $Co(C_{60})_3$ cluster (coordination number 6). The formation of the Co/C_{60} complexes with additional sp^3 C-C bonds between the fullerene cages is possible and preferable, especially for the ionized clusters during mass-spectroscopy experiments. Comparison of the theoretical Co-C bond lengths (R_{Co-C}=2.06 A) with XAFS structural data (coordination number 6, R_{Co-C}=2.06 A) demonstrates good adaptability of the B3LYP/6-31G* approach for the calculations of atomic structure of the species.

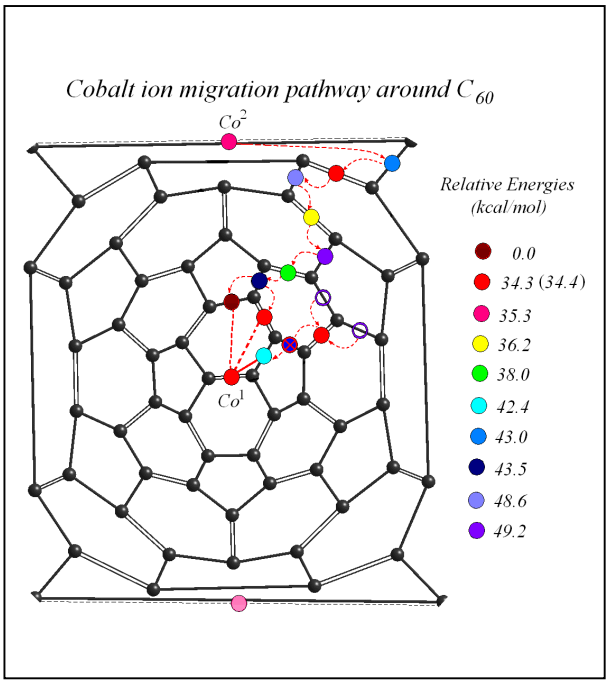
For the m=2 only three structural types of $Co_2(C_{60})_2$ clusters can be realized: i) with cobalt dimer bonding the C_{60} cages, ii) with possible formation of additional C-C bonds between fullerene cages and iii) bonding only through one cobalt ion.

The B3LYP/6-31G* calculations show that the triplet spin states are energetically preferable. We have discovered 27 $Co_2(C_{60})_2$ isomers in triplet state and 28 $Co_2(C_{60})_2$ ones in singlet state of the first and second types. Mostly cobalt ions present η^2 or $\eta^{2'}$ (in few cases η^3) types of coordination. All triplet state isomers keep the main peculiarities of atomic structure of the singlet analogs. The typical singlet-triplet splitting for all isomers is equal to 40 - 70 kcal/mol. The transition from singlet to triplet

state leads only in enlarging (~0.2 ÷ 0.5 A) of the Co-Co distance of cobalt dimers.

To study the process of atomic structure evolution of Co/C_{60} composites under unequilibrium conditions we have studied four sets of linear and bent $Co_2(C_{60})_3$ clusters to model the process of cobalt ion migration around the C_{60} cages. Based on the calculations of Co_1 systems we proposed the η^2 and $\eta^{2'}$ types of coordination of $Co_2(C_{60})_3$ clusters as energetically preferable. The calculations of $\eta^2:\eta^2/\eta^2:\eta^2$, $\eta^2:\eta^2/\eta^2:\eta^{2'}$, $\eta^5:\eta^5/\eta^5:\eta^5$ and $\eta^5:\eta^5/\eta^5:\eta^{5'}$ complexes show that the η^2 type of coordination is ~10-20 kcal/mol lower in energy the η^5 and $\eta^{2'}$ ones.

The low energy reaction pathway of migration of the cobalt ions around the C_{60} cage through the 6-6 and 6-5 fullerene edges is presented in the Figure. The first cobalt ion (red dot Co^1) with fixed position is placed in the center of 6-6 edge of the Schlegel diagram. The initial position of the second cobalt ion (pink dot Co^2) is in the center of opposite 6-6 edge. Migration of the second cobalt ion around C_{60} cage through 6-5 and 6-6 edges is presented by color dots reflecting the relative energies of isomers ($\eta^2:\eta^2/\eta^2:\eta^2$ type of coordination) and intermediates ($\eta^2:\eta^{2'}/\eta^2:\eta^2$ type of coordination). Carbon atoms are presented in black. Two lowest and highest carbon atoms are equivalent and presented as half circles because of specific Shlegel diagram projection. The Co^2 atom has mirror reflection at the bottom of the figure (light pink dot) as well as the correspondent 6-6 edge. Two violet empty circles denote the beginning of alternative reaction pathway of cobalt migration. The traffic sign “do not stop” denote absence of intermediate state on particular 6-5 edge.



The energy difference between neighboring η^2 isomers and $\eta^{2'}$ intermediates is relatively small (~10 – 12 kcal/mol) whereas the final low energy dimer structure has sufficiently lower (~ 35 – 50 kcal/mol) energy (red broken line and brown dot, Fig.). The second in energy structure can be realized through the same reaction pathway with different last step (relative energy 9.4 kcal/mol, red broken line and red dot). In some cases at final stages the formation of cobalt dimer structures can proceed without the potential barriers between the intermediates and final dimeric forms. For example, such reaction pathway is presented in the Fig. by intermediate traffic sign “do not stop” and final light blue dot connected with the Co^1 by solid red line. The complex with the second ion bonded with the following 6-5 edge undergoes structural transition and forms the Co-Co dimeric structure directly without passing correspondent intermediate state. The describe energy difference is the main driving forces of atomic structure evolution of Co_x/C_{60} composites under unequilibrium conditions.

To perform the atomic and electronic structure calculations of the Co/C_{60} composites the ITBL and Altix 3700Bx2 supercomputer systems as well as the parallel GAUSSIAN 03 code have been used. The atomic and electronic structure of the objects was calculated using modern sophisticated methods

on different levels of theory like *ab initio* DFT (LDA, GGA) or hybrid *ab initio* DFT (B3LYP, PBE0) and *post*-HF methods (MP2, CAS SCF). In total during the period ~175 000 CPUh on ITBL system and 40 000 CPUh on AltixBx2 one were used.

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1. P. Avramov, H. Naramoto, S. Sakai, K. Narumi and V. Lavrent'ev, Quantum Chemical Study of Atomic Structure Evolution of the Co_x/C_{60} ($x \leq 2$) Composites, XII-th International Congress of Quantum Chemistry, B189, Kyoto Terrsa, May 21-26, 2006, Kyoto, Japan.
2. P. V. Avramov, A.A. Kuzubov, A.A. Fedorov, F.N. Tomilin, P.B. Sorokin, Structure and electronic properties of Si/SiO_2 clusters, nanoparticles and nanowires, C187, Kyoto Terrsa, May 21-26, 2006, Kyoto, Japan.
3. P. V. Avramov, P.B. Sorokin, A.S. Fedorov, Atomic and Electronic Structure of Si-substituted Single Wall Carbon Nanotubes, Abstracts of 1st NAREGI International Nanoscience Conference, June 14-18, 2005, Nara, Japan, p. 127 (http://www.shinkokaido.jp/).
4. P. V. Avramov, S. Sakai, H. Naramoto, V. Lavrent'ev, K. Narumi, Quantum Chemical Investigation of Atomic and Electronic Structure of 1D Co/C_{60} Composites, Abstracts of 1st NAREGI International Nanoscience Conference, June 14-18, 2005, Nara, Japan, p. 192 (http://www.shinkokaido.jp/)
5. H. Naramoto, S. Sakai, K. Narumi, V. Lavrent'ev, J. Vacik, P. Avramov, Structure Evolution Induced by Physical and Chemical Processes in the Mixtures between Co(Ni) and C_{60}, Abstracts of the 1st International Nanocarbon Workshop, July 30-31, 2005, Hayama, Japan, p. 15.
6. P. Avramov, S. Sakai, H. Naramoto, V. Lavrent'ev, K. Narumi, The role of electronic correlations in Co/M (M=C_{60}, C_5H_5 and C_2H_4) molecular structures and composites, Abstracts of the 1st International Nanocarbon Workshop, July 30-31, 2005, Hayama, Japan, p. 22.
7. P. V. Avramov, H. Naramoto, S. Sakai, K. Narumi , V. Lavrent'ev, Quantum Chemical Study of Atomic Structure Evolution of the Co_x/C_{60} (x=1,2) Composites, J. Phys. Chem., in progress.
8. P. V. Avramov, A.A. Kuzubov, A.S. Fedorov, F.N. Tomilin, P.B. Sorokin, ab initio DFT study of *nc-Si/SiO₂* objects, J. Phys. Chem., in progress
9. Pavel V. Avramov, Pavel B. Sorokin, Alexander S. Fedorov, Dmitri G. Fedorov, Band gap unification of partially Si-substituted single wall carbon nanotubes, submitted to Phys.Rev. B

４．今後の利用予定：

1. CAS SCF/aug-cc-pVTZ calculations of model systems with one and two cobalt ions ($CoCp_2$, $Co(C_{36})_2$, $Co_2(C_2H_4)$, $Co_2(C_{36})_2$)
2. B3LYP/6-31G* calculations of $Co_3(C_{60})$ systems
3. B3LYP/6-31G* calculations of $Fe/Ni_x/(C_{60})$ systems ($Fe_m(C_{60})_n$ and $Ni_m(C_{60})_n$ (m=1,2, n-2,3) clusters)

4.3. 原子力基礎工学研究部門

4.3.1 PHITS を用いた航空機乗務員・宇宙飛行士の被ばく線量評価

Dose evaluation of aircrews and astronauts by the PHITS code

佐藤　達彦
放射線防護研究グループ

１．利用の概要（要約）：

近年，航空機乗務員及び宇宙飛行士の宇宙放射線による被ばくが問題となっている。その被ばく線量を評価するためには，航空機及び宇宙船内における放射線エネルギースペクトルを精度良く計算する必要がある。しかし，宇宙放射線は，原子炉等で発生する放射線と比べてエネルギーが極めて高く，また，重イオンを含むなどその種類も多様なため，既存の放射線輸送計算コードではその挙動を正確に模擬することができなかった。そこで，我々は，粒子・重イオン輸送モンテカルロ計算コード PHITS を開発し，それを用いて航空機及び宇宙船内における放射線エネルギースペクトルを計算した。PHITS は，多大な計算資源を必要とする量子分子動力学モデルを用いて重イオン核反応を模擬するため，この計算には，大型並列計算機の利用が不可欠であった。得られた計算値を実験値と比較したところ，PHITS を用いて計算した結果は，従来モデルによる結果と比べて実験値に対する再現性が良いことが判明した。このことから，本計算手法を用いることにより，航空機乗務員及び宇宙飛行士の被ばく線量をより高精度に評価できることが明らかになった。

２．利用の内容・結果：

航空機内の放射線エネルギースペクトルを計算するためには，宇宙放射線の大気中における輸送計算を行う必要がある。我々は，開発した放射線輸送計算コード PHITS に最新の核データライブラリ JENDL High Energy File を組み合わせて大気中の放射線輸送計算を行い，いくつかの条件（高度・地磁気強度・太陽活動周期）に対する中性子スペクトルを計算した。その際，初期条件として CREME96 コードを用いて計算した大気入射宇宙線スペクトルを採用した。この大気中放射線輸送計算は，大気が約 1000g/cm^2 と極めて厚いため多大な計算資源を必要とし，並列計算機 PC クラスターを用いることにより初めて可能となった。また，得られた計算結果の系統性を考察し，高度 20km 以下の任意の地点における中性子スペクトルを予測可能な解析式を導出した。その解析式に，航空機による放射線遮へい効果を考慮する項を加えることにより，航空機内における中性子スペクトルを導出可能とした。図 1 に，航空機内中性子スペクトルに対するシミュレーション及び解析式による予測値と測定値を比較した結果を示す。図より，シミュレーション・解析式ともに，極めて精度良く測定値を再現できることが分かる。このような一致は，従来開発されてきた他の計算手法では得られておらず，この研究成果により，航空機乗務員の中性子被ばく線量を精度良く評価することが可能となった。

宇宙船内の放射線エネルギースペクトルを計算するためには，宇宙放射線の宇宙船内にお

ける輸送計算を行う必要がある。そこで，我々は，PHITS を用いて，実際のスペースシャトルにおける船壁厚分布を再現するよう構築した仮想的な宇宙船内における放射線輸送計算を行い，そのエネルギースペクトルを計算した。この計算では，重イオン核反応が重要な役割を果たし，それを正確に模擬することが必要となる。そのためには，多大な計算資源を要する量子分子動力学モデルを用いて重イオン核反応を模擬する必要があり，この計算は，並列計算機 PC クラスターを用いることにより初めて可能となった。図 2 に，宇宙船内における中性子スペクトルに対する PHITS を用いた計算値及び実験値を示す。図より，PHITS を用いた計算手法は，実験値を精度よく再現できることが分かる。このような一致は，米国航空宇宙局(NASA)や欧州宇宙局(ESA)が以前より開発してきた計算手法では得られておらず，この研究成果により，宇宙飛行士の中性子被ばく線量を精度良く評価することが可能となった。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

論文発表：

1. Tatsuhiko Sato, Lembit Sihver, Hiroshi Iwase, Hiroshi Nakashima and Koji Niita, “Simulations of an Accelerator-Based Shielding Experiment Using the Particle and Heavy-Ion Transport Code System PHITS”, Advances in Space Research, 35(2), 208-213 (2005)
2. Tatsuhiko Sato and Koji Niita, “Analytical Function to Predict Cosmic-Ray Neutron Spectrum in the Atmosphere”, Radiation Research, in press
3. Tatsuhiko Sato, Koji Niita, Hiroshi Iwase, Hiroshi Nakashima, Yasuhiro Yamaguchi and Lembit Sihver, “Applicability of Particle and Heavy Ion Transport Code PHITS to the Shielding Design of Spacecrafts”, Radiation Measurement, submitted

学会発表：

1. T. Sato, K. Niita, V.A. Shurshakov, B.E. Kalyaev, E.N. Yarmanova, I.V. Nikolaev, H. Iwase, L. Sihver, D. Mancusi, A. Endo, N. Matsuda, Y. Iwamoto, H. Nakashima, Y. Sakamoto, H. Yasuda, M. Takada and T. Nakamura, “Applications of the PHITS Code to Space Researches – Estimation of Dose Reduction Rate due to Water Shielding in Front of Russian Crew Cabin”, 4-th International Workshop on Space Radiation Research, Moscow – St. Petersburg, June 5-9, 2006

４．今後の利用予定：

航空機乗務員の荷電粒子による被ばく線量を評価するため，荷電粒子や電磁成分も含めた大気中の放射線輸送計算を行う。宇宙飛行士の被ばく線量評価の精度を向上させるため，簡易宇宙船モデルではなく，実際の幾何形状に基づいた宇宙船内の放射線輸送計算を行う。これらの計算は，従来と同等，もしくはそれ以上の計算資源を必要とするため，引き続き並列計算機 PC クラスターを利用する予定である。

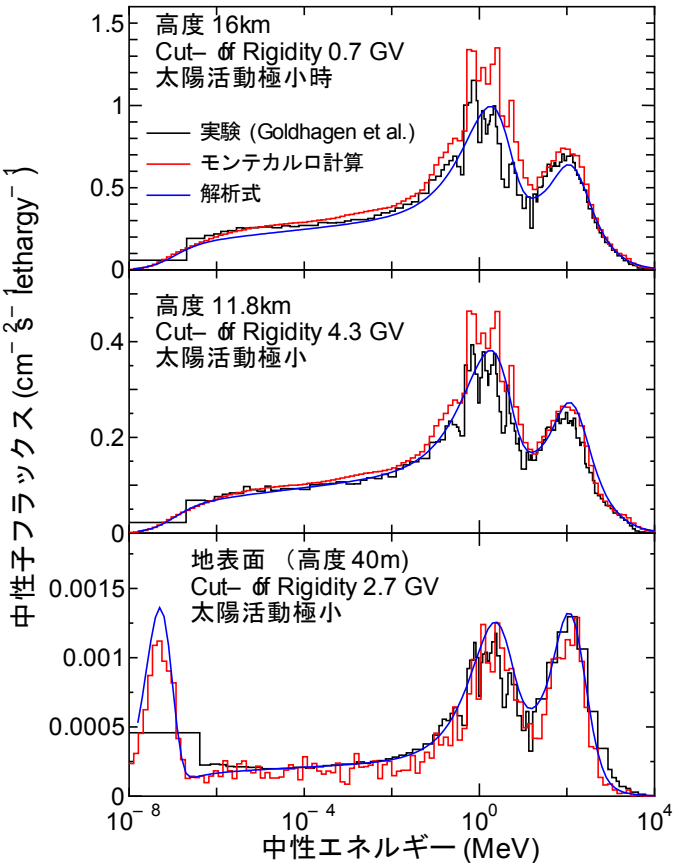


図１　航空機内及び地表面における中性子スペクトル

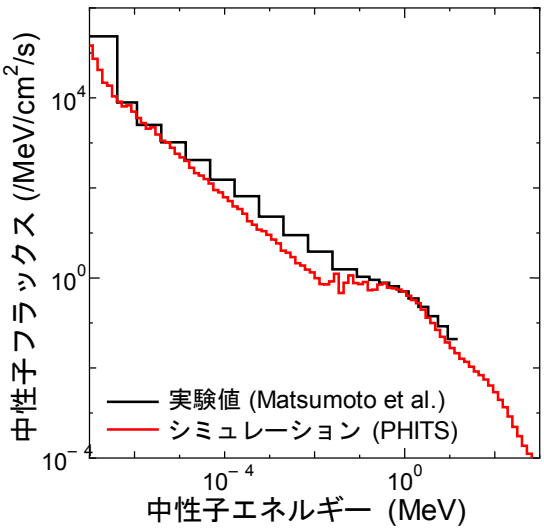


図２　宇宙船内における中性子スペクトル

4.3.2 250,350MeV 陽子入射による厚いターゲットからの 0 度方向における中性子生成エネルギースペクトル計算
CALCULATION of THICK TARGET NEUTRON YIELD AT 0 DEGREE BY 250 AND 350 MEV PROTONS

岩元　洋介
放射線工学研究グループ

１．利用の概要（要約）：

放射線工学研究グループでは「遮蔽基礎データ取得」の中期目標のもとに、大阪大学核物理研究センター（RCNP）で 250,350MeV 陽子入射による厚いターゲットから 0 度方向に放出される中性子エネルギースペクトル測定を行っている。実験結果と放射線輸送計算コード PHITS、MCNPX による計算結果との比較を行い計算コードの検証を行うことを目的としている。長時間のシミュレーション計算を PHITS、MCNPX を用いてグラファイト、アルミニウム、鉄、鉛の 4 ターゲットについて実施した。十分な中性子の統計を得るためにも大型並列計算機の利用は必要不可欠である。

２．利用の内容・結果：

PC クラスタ B 及び Altix の 24 ノード、32 ノードを利用して、放射線輸送計算コード PHITS と MCNPX の 250,350MeV 陽子入射による厚いターゲットから 0 度方向に放出される中性子エネルギースペクトル計算を行った。計算体系では、ターゲットから検出器の間の加速器構造体やコリメータなどを考慮しなければならないが、計算時間の短縮のために、これらを除去して計算を行う必要がある。そこで、図１に示す計算体系を用いて、加速器構造体やコリメータからの中性子散乱の影響を調べたところ、図２に示すように中性子エネルギー20MeV 以上では構造体による影響は殆どないことがわかったので、本計算では図１のターゲット、空気、検出器のみを計算体系に入れた。

PHITS 及び MCNPX 計算は、表１に示すように、核内カスケードモデルに Bertini モデルを、評価済み核データには JENDL-HE ファイル及び LA150 を用いて、３つのケースで行った。計算結果と実験結果を図３に示す。何れの計算結果も実験結果を中性子エネルギー20MeV 以上で過小評価することがわかった。その中で、JENDL－HE を用いた計算結果が実験結果に近く、３つのケースの中で遮蔽計算に有効であることがわかった。今後、さらに様々な核内カスケードモデル及び評価済み核データを組み合わせて計算を行い、実験結果との比較検討を行う必要がある。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1. Yosuke Iwamoto, Shingo Taniguchi, Noriaki Nakao et al.,
“Measurement of neutron spectra produced in the forward direction from thick graphite, Al, Fe and Pb targets bombarded by 350MeV protons”
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 562 (2006) 789-792
2. Yosuke Iwamoto, Shingo Taniguchi, Noriaki Nakao et al.,

"THICK TARGET NEUTRON YIELD AT 0 DEGREE BY 250 AND 350 MEV PROTONS"
Proc. of SATIF-8, Shielding Aspects of Accelerators, Targets and Irradiation Facilities, Eight Meeting, to be published.

４．今後の利用予定：

放射線工学研究グループでは、医療用小型加速器中性子源の遮蔽基礎データを TIARA における実験で取得しており、PHITS、MCNP による計算結果との比較検討を行う。また、数百 MeV の重イオン入射による核反応計算を PHITS に組み込まれている JQMD モデルを用いて計算し、既存の実験データと比較して JQMD モデルの検証を行う。

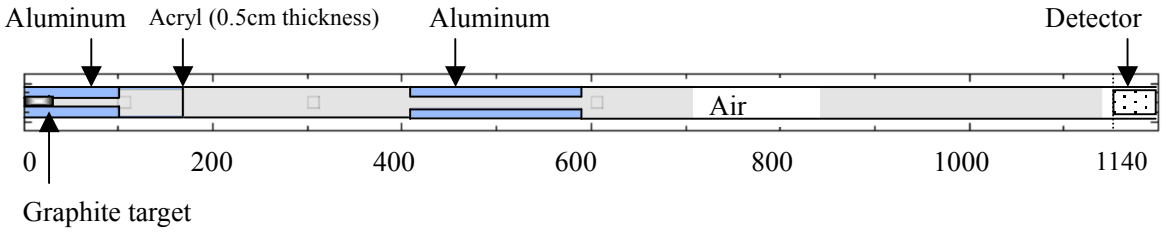


図１　計算体系

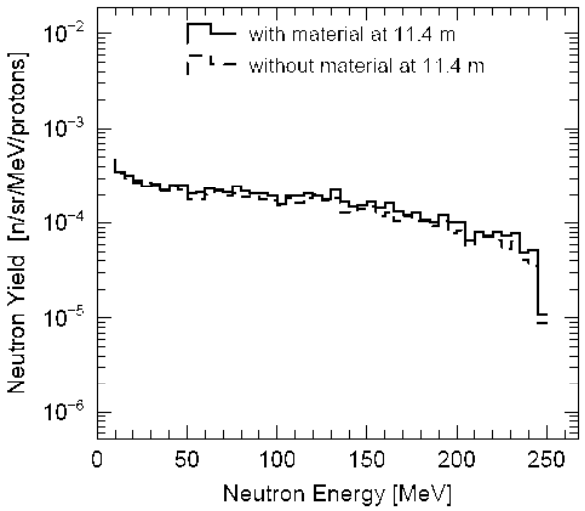


図２　ターゲットから検出器間の加速器構造体有無による中性子エネルギースペクトルの比較

Case	INC model	Evaluated nuclear data	Transition energy of model and nuclear data (MeV)
PHITS Bertini	Bertini	JENDL-HE	20
PHITS JENDL-HE	-	JENDL-HE	-
MCNPX LA150+Bertini	Bertini	LA150	150

表１　放射線輸送計算のオプション

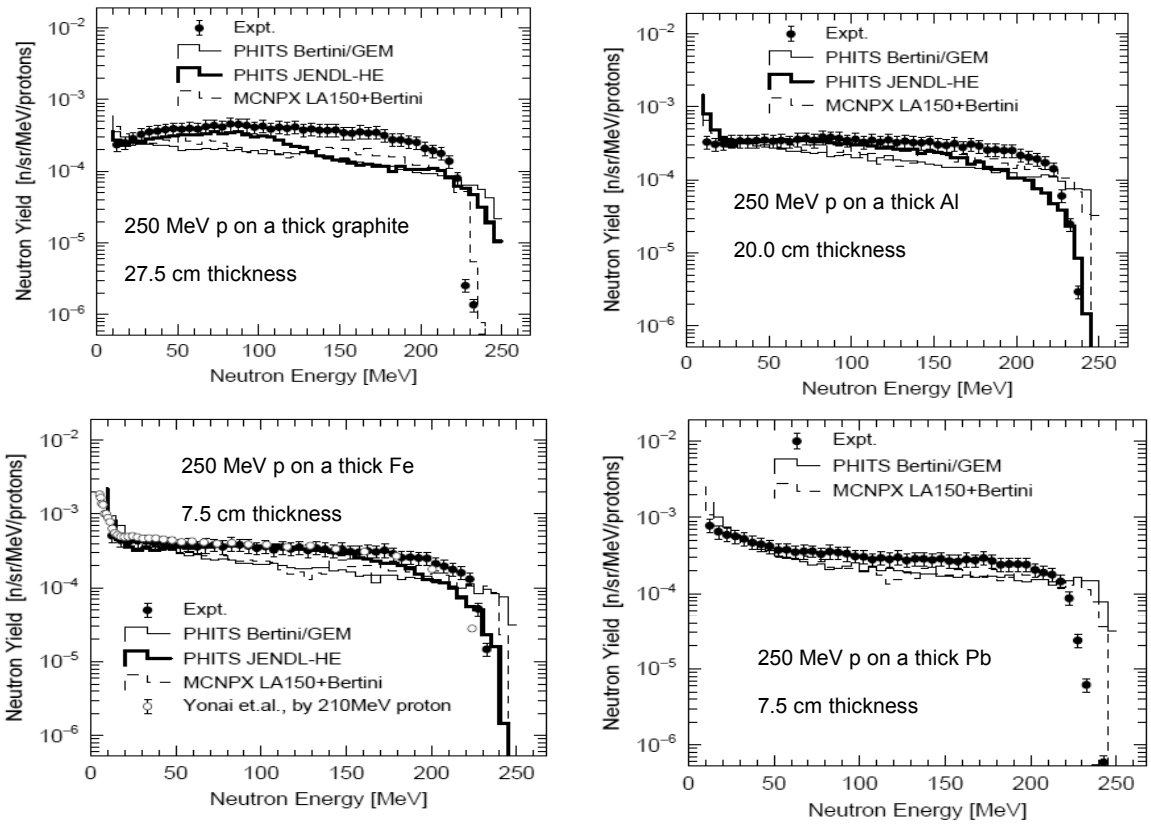


図３　250MeV 陽子入射の計算結果と実験結果との比較

4.3.3 将来型原子炉内気液二相流特性に関する大規模シミュレーション

A Large-Scale Simulation on Gas-Liquid Two-Phase Flow Characteristics in Advanced Nuclear Reactor Cores

秋本　肇
機構論的熱設計手法開発グループ

１．利用の概要（要約）：

機構論的熱設計手法開発グループでは、「原子力熱工学に関する研究」のテーマのもとに、従来の炉心熱設計手法に計算科学的手法を組み合わせることによって、大規模試験を必要としないシミュレーションを主体とした先進的な炉心熱設計手法の開発を行っている。このようなDesign by Analysisの概念を原子炉設計に反映することによって、開発期間の短縮や大幅なコストダウンが期待できるため、効率的な新型炉開発の実現が可能となる。また、実験的検証が容易ではない複雑な二相流熱流動現象を正確に把握できるため、炉心成立性を評価する限界熱流束等の予測精度を従来よりも向上できる。

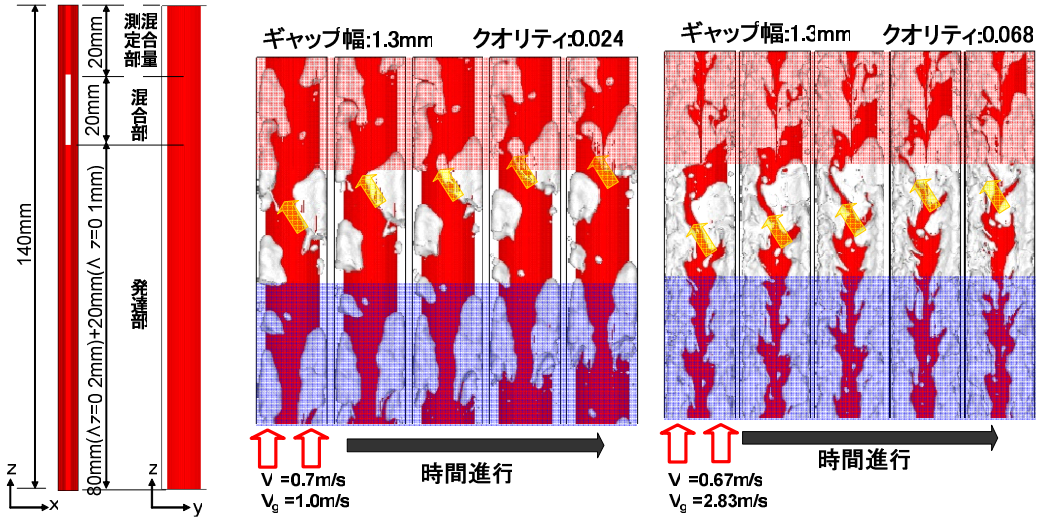
２．利用の内容・結果：

Altix3700Bx2 の最高 1024 プロセッサを利用した大規模シミュレーションを行って、原子炉燃料集合体内の液膜・液滴挙動、流体混合等に関する気液二相流特性について調べ、実験結果との比較を通して予測結果の妥当性を定性的・定量的に検討した。また、従来から原子炉熱設計に用いられている二相流相関式に関して、適用範囲の拡張性や妥当性について解析結果を基に評価した。使用したコードは、改良界面追跡法コードTPFIT、粒子法コードPOPCORN及び拡張二流体モデルコードACE-3Dである。解析例を次に示す。

図１は、稠密炉心燃料集合体内の 2 つのサブチャンネル内で起こる流体混合挙動を TPFIT コードで予測した結果であり、ギャップ幅（流体が流れる領域）1.3mm に対して２つのクオリティ(全質量速度に対する気相の質量速度の比)条件での気液界面挙動の時間変化を示す。クオリティが小さい場合には流路内に気泡流またはスラグ流が形成される。一方、クオリティが大きい場合にはチャーン流あるいは環状流が形成される。一連の解析の結果、クオリティと流動様式の関係を TPFIT コードで予測できることを定量的に確認した。

図２は、POPCORN コードで予測した環状噴霧流域における液膜挙動と液滴生成挙動の結果である。流入した流れによって流路入口付近の壁近傍に大きなせん断力が発生し、これにより液膜が擾乱されて液滴が生成される挙動を再現できた。一連の解析によって、液滴の飛散量が時間とともに増大して噴霧流へと移行する過程をリアルに予測できることがわかった。

図３は、ACE-3D コードを使って予測した稠密燃料集合体出口部のボイド率分布である。解析では計算格子よりも大きな気泡の存在を考慮しなかったため、サブチャンネル中心部でボイド率が低くなる実験結果とは異なる予測結果であったが、コードに組み込まれている二相流相関式の改良によって予測精度の向上は可能と考える。ACE-3D コードでは、稠密炉心に適合する相関式の導入、大規模シミュレーションに対応する高速化等の改良を進めている。



(a) 解析体系　(b) 比較的小クオリティの場合　(c) 比較的大クオリティの場合

図 1　稠密炉心体系におけるサブチャンネル間気液界面挙動の時間変化

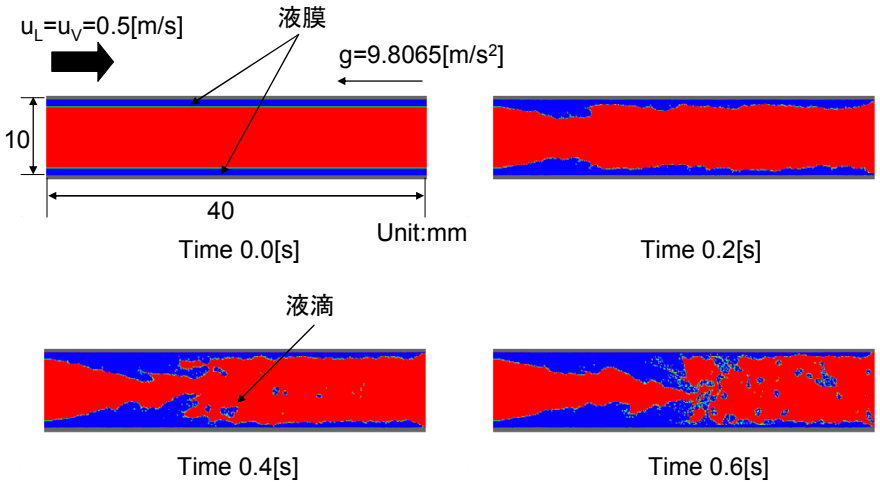
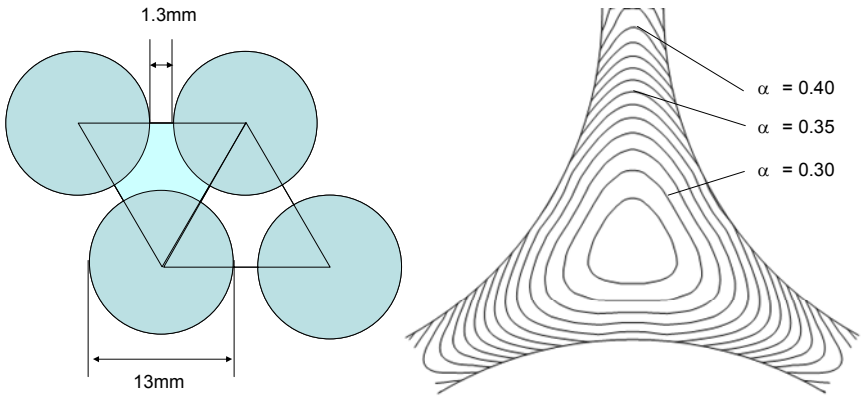


図 2　粒子法による環状噴霧流解析結果の一例



(a) 計算体系　(b) ボイド率分布

図 3 二流体モデルによる稠密炉心内二相流解析結果

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1) 高瀬, 他, 炉心燃料チャンネル内大規模二相流シミュレーション, 第24回日本シミュレーション学会大会, (2005) pp.161-164.
2) 高瀬, 他, 鉛直狭隘流路内大規模気泡流に関する数値的可視化, 第33回可視化情報シンポジウム, (2005) pp.435-436.
4) K.Takase, et al., Predicted Three-Dimensional Bubbly and Liquid Flow Behavior in Narrow Fuel Channel, Int. Conf. Jets, Wakes and Separated Flows, JSME No.05-201, pp.137-144, Oct. (2005).
5) K. Takase, et al., A Large-Scale Numerical Simulation of Bubbly and Liquid Film Flows in Narrow Fuel Channels, ASME International Mechanical Engineering Congress, IMECE2005-80772, USA (2005).
6) K. Takase, et al., Numerical Analysis of Three-Dimensional Two-Phase Flow Behavior in a Fuel Assembly, Computational Methods in Multiphase Flow III, WIT Press., UK, pp.183-192. (2005).
8) 高瀬, 他, 稠密格子燃料集合体の除熱技術開発(2)大規模シミュレーションによる燃料集合体内二相流動解析, 日本混相流学会 2005 年会, A232, 東京, 8 月, (2005) pp.231-232.
9) 高瀬, 他, 微小流路内大規模気泡流構造に関する数値予測, 日本機械学会2005年度年次大会, Vol.7, No.05-1, 東京, 9 月,(2005)pp.17-18.
10) 高瀬, 他, 微小流路を上昇する大規模な気泡挙動の予測と高詳細可視化, 日本原子力学会 2006 春の年会, (2006).
11) 吉田, 他, 拡張二流体モデルによるスペーサ周囲の噴霧流解析, 日本原子力学会2005秋の大会,(2005).
12) 吉田, 他, 改良二流体モデルによる矩形流路内気泡流解析, 日本原子力学会 2006 春の年会, (2006).
13) H. Yoshida, et al., Development of Analytical Procedures on Two-Phase Flow in Tight-Lattice Fuel Bundles for Innovative Water Reactor for Flexible Fuel Cycle (FLWR), Proc. of 2006 International Congress on Advanced in Nuclear Power Plants (ICAPP'06), Reno, NV USA, June 4-8, 6169, (2006) .
14) H. Yoshida, et al., Current Status of Thermal/Hydraulic Feasibility Project for Reduced- Moderation Water Reactor (2) -Development of Two-Phase Flow Simulation Code with Advanced Interface Tracking Method-, Proc. of 2005 International Congress on Advanced in Nuclear Power Plants (ICAPP'05), May 15-19, 2005, Seoul, KOREA, 5156 , (2005).
15) H. Yoshida, et al., Numerical Simulation of Single Bubbles Rising through Subchannels with Interface Tracking Method, The 11th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics (NURETH-11), 436, (2005).
16) 永吉, 他, 大規模シミュレーションによる稠密燃料集合体内気液二相流特性の解明, (II) 2 チャンネル流体混合実験への適用, 日本原子力学会和文論文誌, Vol.4, No.1, (2005).
17) 吉田, 他, 大規模シミュレーションによる稠密燃料集合体内気液二相流特性の解明, (III) 傾斜平板上液膜挙動の解析, 日本原子力学会和文論文誌, Vol.4, No.1, (2005).
18) 吉田, 他, 大規模シミュレーションによる稠密燃料集合体内気液二相流特性の解明, (IV) 地球シミュレータを用いた TPFIT コードの燃料集合体内大規模二相流解析",日本原子力学会和文論文誌, Vol.4, No.2, (2005).
19) 吉田, 他, 改良界面追跡法による燃料集合体内流体混合相関式の評価, 日本機械学会 2005 年度年次大会, (2005).

４．今後の利用予定：

平成 18 年度の大型計算機の大規模計算利用課題として、当グループからは「界面追跡法による BWR 炉心に対する相関式の開発」、「BWR 炉心におけるスペーサ効果の解析的評価」、「BWR 炉心における除熱限界の機構論的予測手法の開発」の 3 件が採択されている。今後は、これら 3 件のシミュレーションを最優先で実施するとともに、実験による二相流データベースとの比較を通して予測精度評価を行い、シミュレーション主体の先進的炉心熱設計手法実現に向けて研究を展開したい。

4.3.4 選択チャンネル核分裂モデルによる核分裂収率計算法の研究

Study on calculation method for fission product yield by selective channel scission model

太田　雅之
核変換用核データ測定研究グループ

１．利用の概要（要約）：

本研究では、任意の元素及び任意の入射中性子エネルギーに対する核分裂収率の計算手法・モデルの確立を目的としている。

使用済み燃料の再処理に伴って発生する高レベル放射性廃棄物が現在問題になっている。核分裂反応により、マイナーアクチニドを非放射性の核種あるいはより寿命の短い核種に変換できれば、地層処分する高レベル廃棄物の量を減らすことができる。この核分裂収率の理論的な予測ができれば、核変換処理の研究において有効な手段となりうる。

最近提案された「選択チャンネル核分裂モデル」は、すべての核分裂チャンネルに対して、それぞれの核分裂障壁の値を求めることで、決定論的に核分裂収率を求めることができる理論である。チャンネル依存の核分裂障壁を正確に求める方法を確立することで、調整パラメータに依存することなしに、任意の元素の核分裂収率の予測が可能となると考えられる。このチャンネル依存の核分裂障壁の計算のため、大型計算機（HPC2500）を用いた数値計算を行っている。

２．利用の内容・結果：

核分裂ポテンシャルの計算では、巨視的－微視的法と呼ばれる半現象論的方法がよく用いられている。この方法では、巨視的な液滴モデルの項 E_{LDM} に、微視的な殻効果 E_{shell} を補正した形で与えられる。E_{LDM} は、変形液滴の表面エネルギーE_{s}と、変形液滴のクーロンエネルギーE_{c}を計算することにより求めることができる。

変形核の形状は、ルジャンドル多項式を用いたα_{n}-parameterization [1]にて記述した。図 1 に変形核形状の例を示した。チャンネル毎のポテンシャルの計算に対して、変形核のくぼみ地点で、調べたいチャンネルの体積分割が常に実現しているようにした。くぼみがない変形段階の場合は x=0 で分割する等、条件を設定した。

変形液滴の表面エネルギーE_{s}は、表面積に比例する形で書くことができる。表面張力の式としては Myers and Swiatecki (1966) [2]を採用した。変形液滴のクーロンエネルギーE_{c}は、微小体積間のクーロンエネルギーを領域にわたって積分することで求められる。一般的に、液滴モデルでは、核内の電荷密度を一定としているが、今回はチャンネルごとの計算になり、分裂片の電荷密度を考慮するため、モンテカルロ法により、核内に乱数的に微小体積の座標のペアを作り、クーロンエネルギーを足し合わせることで計算した。乱数発生にはモンテカルロ計算に適しているメルセンヌ・ツイスター法を用いた。図 2 に、変形形状内での乱数による点の配置例を示した。本モデルにおいて、分断へと向かう鞍点附近では２つの分裂片への内部的な分裂が十分に進んでいると考えられる。そこで、そのチャンネルの独立した２つ

の核分裂片の殻効果の和が、その変形核全体の殻効果を与えると仮定した。この仮定は元の核からの変形が小さい場合には適切ではないが、十分に変形が進んだ状態においては適当であると考えられる。形状的に当てはめられた分裂片における殻効果の計算に関しては、公開されている計算コードである Barrier Code [3]を用いて行った。変形核でのエネルギーと、基底状態でのエネルギーの差から、変形のエネルギーが求め、チャンネル依存の核分裂障壁の計算を現在行っている。

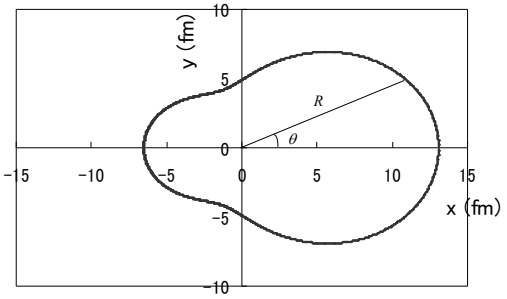


図 1　変形形状の記述例

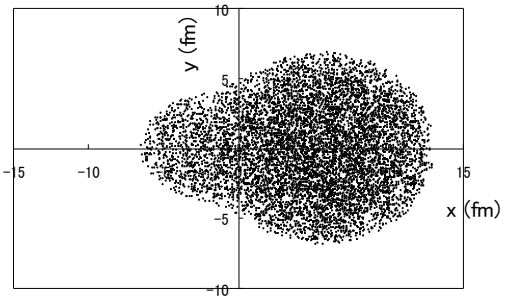


図 2　乱数による変形形状内での点の取り方の例

[1] R.W. Hasse and W.D. Myers, Geometrical Relationships of Macroscopic Nuclear Physics (Springer Series in Nuclear and Particle Physics), Springer-Verlag, (1988).
[2] W.D. Myers and W.J. Swiatecki, Nuclear masses and deformations, Nucl. Phys., 81 (1966) 1.
[3] F. Garcia, O. Rodriguez, J. Mesa, J.D.T. Arruda-Neto, V.P. Likhachev, E. Garrote, R. Capote and F. Guzman: Comp. Phys. Comm., 120 (1999) 57.

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1)“選択チャンネル核分裂モデルに基づくチャンネル依存の核分裂ポテンシャルの計算”，太田雅之，中村詔司，原田秀郎，日本原子力学会「2005 年春の年会」L40，(2005 年 3 月 29～31 日，東海大学)

2)“選択チャンネル核分裂モデルによる核分裂の解析”，太田雅之，中村詔司，2005 年度核データ研究会，(2006 年 2 月 2～3 日，日本原子力研究開発機構　原子力科学研究所)

3) M. Ohta and S. Nakamura, “Channel-dependent Fission Barriers of n+^{235}U Analyzed by Selective Channel Scission Model”, Jpn. J. Appl. Phys., (to be published).

４．今後の利用予定：

平成 18 年度は、^{235}U を対象としてチャンネル依存の核分裂障壁を求める。また、いくつかの高レベル放射性廃棄物核種に適用して核分裂障壁の計算および核分裂生成物収率の解析を実施する。

4.3.5 レーザー逆コンプトンガンマ線を用いた光核反応実験のデータ解析

Data analysis for the photonuclear experiment with laser-Compton scattering gamma rays

原　かおる
核変換用核データ測定研究グループ

１．利用の概要（要約）：

産学連携協力研究員の研究テーマ「長寿命核に対する核変換基礎データの光核反応による評価」において、産業技術総合研究所のレーザー逆コンプトン（LCS）ガンマ線を用いた^{152}Sm(γ,n)反応実験を実施した。この実験データ解析のため、大洗 HPC2500 計算機システムを利用し、^{152}Sm(γ, n)反応断面積を求めた。

高レベル放射性廃棄物中に含まれる長寿命核分裂生成核種 ^{151}Sm（半減期 $t_{1/2}$＝90 年）の中性子捕獲断面積は核変換研究のための基礎データの１つである。また、^{151}Sm 核は恒星内で中性子捕獲反応によって進行する元素合成（s 過程）の分岐核であり、その中性子捕獲断面積は星の環境下での温度や中性子密度を見積もる際の重要な基礎データである。

^{151}Sm の中性子捕獲断面積の直接測定には放射性標的試料と強い中性子源が必要であり、容易ではない。本研究では逆反応を利用し、安定核種 ^{152}Sm の光核反応の測定を行なった。反応しきい値（S_n：8.26MeV）近傍におけるデータを統計モデル計算に対する制約条件として用い、keV から MeV エネルギー領域において中性子捕断面積の評価に資する。

２．利用の内容・結果：

光核反応実験のデータ解析の中で、大洗 HPC2500 計算機システムの CPU 時間を主に要したのは、Ge 半導体検出器の応答関数と中性子検出効率の計算であった。

LCS ガンマ線ビームに対するエネルギースペクトルは 120%の Ge 半導体検出器(EG&G ORTEC GEM-120225-P)で測定した（図１）。モンテカルロ計算コード EGS4 を用いて、Ge 検出器中での光子と電子との電磁的相互作用のシミュレーションを行い、LCS ガンマ線ビームに対する Ge 検出器の応答関数を計算した。測定したエネルギースペクトルを最も良く再現することの出来る Ge 検出器の応答関数を用いて、LCS ガンマ線ビームのエネルギー分布を決定した。

光核反応によって生成された中性子は、ポリエチレン減速材中に 20 本の ^{3}He 比例計数管（EURISYS MESURES 96NH45）を配置した 4π型の中性子検出器で検出した。この中性子検出器の検出効率の中性子エネルギー依存性を求めるため、モンテカルロ計算コード MCNP5 を用いて減速材中の中性子輸送シミュレーションを行なった。MCNP5 で計算された中性子検出効率の較正には、産総研計測標準部の ^{252}Cf 中性子線源を用いた。^{252}Cf 線源に対する測定値と MCNP5 コードの計算結果はよく一致している。

3. 利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

① 原かおる、北谷文人、原田秀郎（原子力機構）、秋宗秀俊、宇都宮弘章、海堀岳史、

後神進史、芳原新也、牧永あや乃、山県民穂（甲南大）、豊川弘之、山田家和勝（産総研）、
「レーザー逆コンプトンガンマ線による ^{152}Sm の光核反応断面積測定」、
日本原子力学会 2006 年春の年会（大洗、原子力機構）

② K.Y. Hara, H. Harada, F. Kitatani, H. Akimune, S. Goko, S. Hohara, T. Kaihori, A. Makinaga, H. Utsunomiya, T. Yamagata, H. Toyokawa and K. Yamada, "Cross section measurements of the ^{152}Sm(γ,n)^{151}Sm reaction near threshold", Second Joint Meeting of Nuclear Physics Divisions of the American Physical Society and the Physical Society of Japan, 17-22 September 2005, Hawaii, USA

４．今後の利用予定：

^{151}Sm の中性子捕獲断面積を評価するため、統計モデル計算を行なう。また ^{37}Cl(γ,n)反応実験のデータ解析のために利用する。

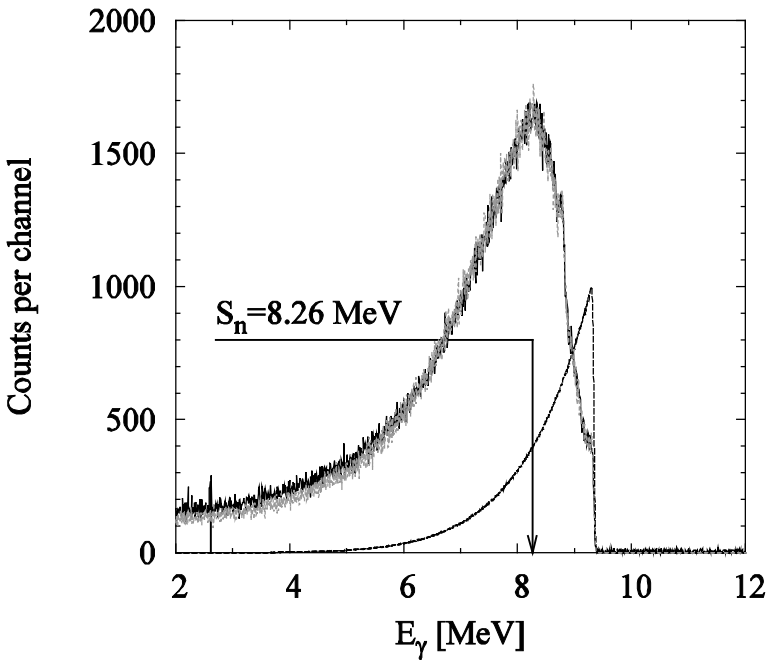


図１：LCS ガンマ線ビームに対する 120%Ge 半導体検出器のエネルギースペクトル。実線が測定したエネルギースペクトルである。EGS4 を用いて計算した LCS ガンマ線ビームのエネルギー分布を破線で、そのビームに対する Ge 検出器の応答関数を点線で示している。矢印は ^{152}Sm の反応しきい値 S_n=8.26MeV を示している。

4.3.6 溶融塩のXAFSシミュレーション

XAFS simulation for molten salts

岡本　芳浩
放射光重元素構造化学研究グループ

１．利用の概要（要約）：

溶融塩のような高温液体系の放射光 XAFS ではそのスペクトル振動の信号が弱いため、解析において補助的に分子動力学（MD）シミュレーション技術を利用している。逆に、XAFS スペクトルは MD 計算のモデルに敏感であり、モデルの妥当性の目安にもなる。このように放射光 XAFS データによって最適化されたモデルを使い、構造と物性の相関関係の解明や未知の物性の推定へと展開した。

２．利用の内容・結果：

放射光科学研究ユニットが SPring-8 で進めている高輝度高エネルギーXAFS 測定を駆使して得られた溶融塩のデータを MD シミュレーションから再現を試み、さらに計算を拡張して構造的な特徴を把握し、物性値の推定を試みた。

(1)溶融 $TbCl_3$

ランタノイド系列の中で中間に位置する $TbCl_3$ について放射光 XAFS 測定を行った結果と、塩化物イオンに分極効果を導入して得られた MD シミュレーションの結果を図１の最上段に示す。XAFS パターンの計算は、MD シミュレーションから Tb^{3+}イオンを中心としたクラスターを数万程度抽出して FEFF コードにかけて平均化する手法をとっている。ランタノイド塩化物の最近接配位数は、陽イオンの大きな $LaCl_3$ での約８と小さな $DyCl_3$ での６と変化があることが報告されている。$TbCl_3$ での配位数を明らかにするために、シミュレーションで得られたクラスターを配位数ごとに分けて求めた XAFS パターンを図１の２段目以下に示した。配位数７のパターンが一番良く一致しており、$TbCl_3$ の溶融状態での配位数が平均的に７であることが分かった。次に、この MD 計算モデルを利用して物性の計算を行った。まず、もっとも基本的な物性である液体密度を等圧 MD シミュレーションから求めた結果を図２に示す。実験値と良く一致しており、広い温度範囲でモデルが適用できることが分かる。このモデルについて VPP5000 上での並列計算により大きな統計量を得て粘性率を推定した結果を図３に示す。$TbCl_3$ はランタノイド塩化物溶融塩の中では、比較的高い粘性率を有する液体であることが分かった。

(2)LiCl-KCl 共晶塩中の $LaCl_3$ 配位構造の変化

昨年度までに MD 計算モデルを確立した LiCl-KCl 共晶塩と $LaCl_3$ の混合系について、5% $LaCl_3$ 濃度の放射光データを取得した。その混合系の MD シミュレーションを行った結果を図４に示す。計算では、多成分系の低濃度のイオンを効果的に取り扱うために、Altix3900 上での並列計算により数千を超える大規模な系を扱った。得られた計算結果は良好に XAFS 実験値を再現しており、混合系でも計算モデルは良好に実験値を再現する。次いで、このモデルを利用して計算した、cage correlation function の結果を図５示す。この関数は、配位構造にお

いて配位子である塩化物イオンが配位圏外との間で起こる交換現象の目安になるもので、全く交換がない場合は１を保つ。一方、配位している全ての塩化物イオンが外部と入れ替わってしまうと相関関数はゼロになる。結果を見ると、LiCl-KCl 共晶塩中ではわずかにその配位相関が上がることが分かった。そこで、次に３成分系ではなく、$LaCl_3$-LiCl と $LaCl_3$-KCl の２成分系について求めた（図５の中段と下段)。すると、LiCl と混合した場合、$LaCl_3$ の配位構造は逆に不安定になる結果が、KCl と混合すると安定化が大きく進むことが分かった。LiCl-KCl 共晶塩中では、この相反する効果が競合していると考えられる。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

(1)Y.Okamoto, H.Shiwaku, T.Yaita, K.Minato, L.Rycerz, M.Gaune-Escard,
「High-energy XAFS study of molten salt systems」
7th International Symposium on Molten Salts: Chemistry and Technology,
平成 17 年 9 月、Toulouse（フランス）
(2)岡本芳浩、Paul A.Madden、湊和生
「LiCl-KCl 共晶塩融体中の希土類塩化物の挙動」
第 37 回溶融塩化学討論会、平成 17 年 11 月、慶応大学（横浜）

４．今後の利用予定：

高エネルギーを利用した放射光 XAFS 実験では低濃度中のランタノイドイオンのデータを取得しており、それに対応した MD シミュレーションを並列高速化したコードを Altix3900 上で行い解析する。

本研究で使用した分子動力学計算コードは、システム計算科学センター鶴岡卓哉氏により Altix3900 上で並列高速化されました。ここに感謝いたします。

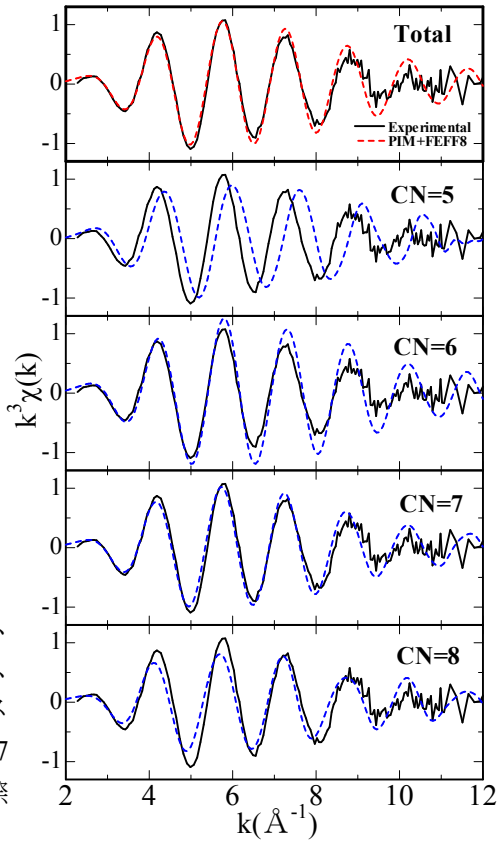


図１　溶融 $TbCl_3$ の XAFS 関数 $k^3\chi(k)$
全ての図で実線は実験値を示す。最上段の破線は、計算値を示す。２段目以下の CN は配位数を表し、CN=5 の破線は MD 計算の中で配位数５のクラスターのみを使い合成した XAFS 関数を示す。CN=7 で最も良い一致が得られており、溶融 TbCl3 の際近接配位数が７であることを示している。

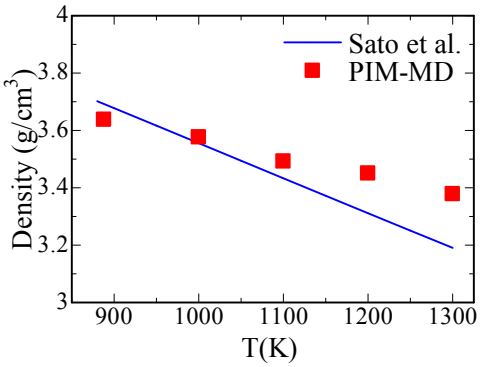


図２　溶融 $TbCl_3$ の密度
実線は実験値、■マークは等圧 MD 計算から求めた密度を示す。

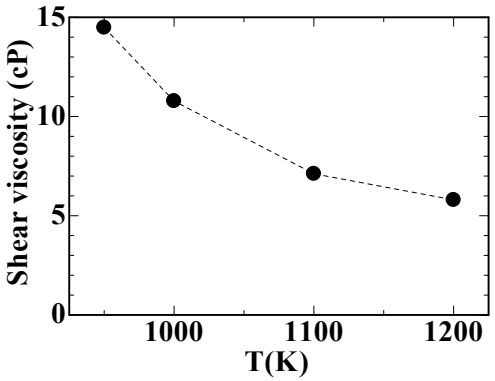


図３　溶融 $TbCl_3$ の粘性率
MD 計算で応力テンソルを求め、久保の公式を使い算出した。

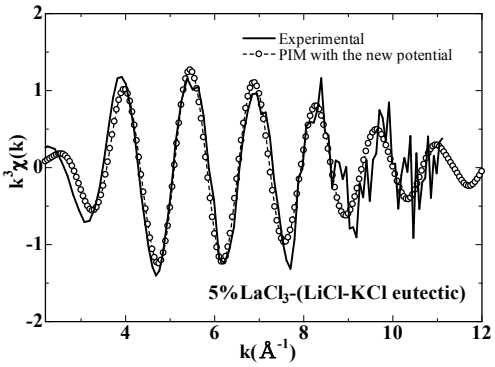


図４　LiCl-KCl 共晶塩中に 5%溶けた $LaCl_3$ の XAFS 関数
実線が実験値、○が計算値を示す。

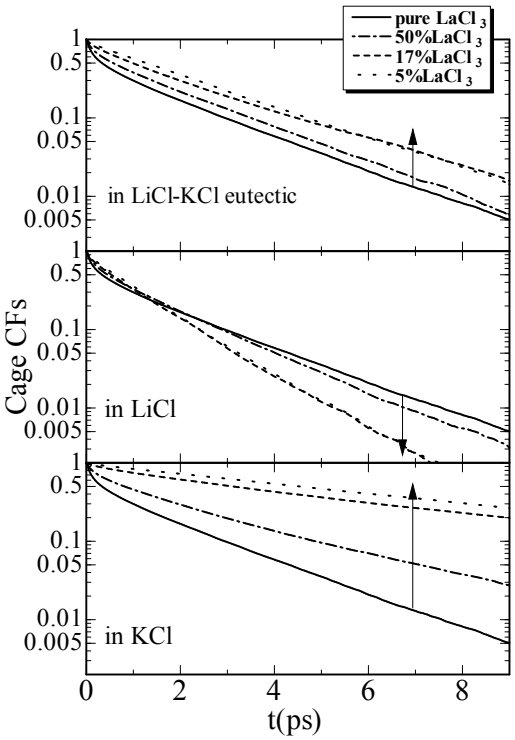


図５　混合塩中の La-Cl 配位の cage correlation function
LiCl との混合では配位構造が不安定になり、KCl との混合では安定化する。LiCl-KCl 共晶塩中では、この相反する２つの効果の競合状態にあると考えられる。

4.3.7 アイリッシュ海における ^{137}Cs の長期間シミュレーション

Long-term simulation of ^{137}Cs in the Irish Sea

小林　卓也
環境動態研究グループ

１．利用の概要（要約）：

当研究グループでは日本の沿岸域及び近海域における海水循環と物質移行挙動を明らかにするとともに、海洋中の物質移行を予測するために、海水循環予測コード POM、海水中放射性核種移行予測コード SEA-GEARN、被ばく線量評価コード COLDOS から構成される海洋環境評価システムの開発を進めている。本システムの妥当性検証を実施するため、英国セラフィールドにある British Nuclear Fuels の使用済核燃料再処理施設から放出された ^{137}Cs の長期間シミュレーションを実施し、観測値と比較した。

２．利用の内容・結果：

計算領域は北緯 52.8 度－55.2 度、西経 2.8 度－6.4 度とした。水平格子間隔は 5km、鉛直分割数は σ 座標系で 15 層とした。計算対象海域であるアイリッシュ海は半閉鎖的な海域であり、潮汐が卓越している。そこで POM に国立天文台が開発した海洋潮汐予報モデル（NAOTIDE）を組み込み、任意の日時・緯経度における潮位を計算する機能を追加した。北大西洋と繋がる開境界を北アイルランドとスコットランド間のノース海峡、アイルランドとウェールズ間のセント・ジョージ海峡とし、2 つの開境界において潮位を与え潮流を発生させた。その他の外力として Comprehensive Ocean-Atmosphere Data Set から気候値の海上 10m 風速を月別に与えた。水温と塩分は World Ocean Atlas 1998 から月別の気候値を与え、水深は ETOPO2 を用い、最低水深を 7m とした。POM の計算ではタイムステップは 15 分、計算期間は 1966 年 1 月 1 日から 2 年間とした。潮流の半日周潮成分を考慮して 2 時間毎に計算された流速データセットを作成し、SEA-GEARN の入力データとして保存した。SEA-GEARN の計算では再処理工場から放出された年平均 ^{137}Cs 濃度を用いた。計算期間は 1966 年から 24 年間とし、POM で計算された流速データセットを繰り返し使用した。水平拡散係数は 500m^2/s、鉛直拡散係数は 0.003m^2/s、タイムステップは 30 分とし、溶存態のみの場合、溶存態と懸濁態が相互作用する場合、の 2 ケースの計算を実施した。

検証のため IAEA-MEL が開発した海洋放射能データベース（Marine Information System: MARIS）から抽出したアイリッシュ海における溶存態 ^{137}Cs 表層濃度分布と計算結果のスナップショットを比較したところ（図 1）、溶存態と懸濁態の相互作用を考慮した計算が放出口近傍からマン島周辺における表層濃度分布を比較的良好に再現することを確認した。

なお、POM の計算には Altix3700Bx2（32CPU）を、SEA-GEARN の計算には PC クラスタ B（1CPU）を用いた。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1) T. Kobayashi, S. Otosaka and O. Togawa; Three-dimensional Modeling of the Tidal Dispersion of Radionuclides in the Irish Sea, Proceedings of International Symposium on The 13th Ocean

Sciences Meeting, OS25J-07, Honolulu, February 20-24 (2006)
2) 小林卓也、外川織彦；海洋環境評価システムの検証（Ⅰ）アイリッシュ海における ^{137}Cs の長期拡散シミュレーション、日本原子力学会 2006 年春の年会, 茨城 (2006)
3) 日本原子力研究開発機構；「下北海域における海洋放射能予測コードの整備（Ⅲ）」成果報告書 (2006)
4) T. Kobayashi, M. Chino and O. Togawa; Numerical Simulations of Short-term Migration Processes of Dissolved ^{137}Cs Due to a Hypothetical Accident of a Nuclear Submarine in the Japan Sea, J. Nucl. Sci. Technol., 43(5), p.300-310 (2006)

４．今後の利用予定：

同海域において難溶性核種である Pu の再現シミュレーションを実施し、システムの開発を進める。

SEA-GEARN の溶存態と懸濁態の相互作用を考慮した計算を実施するのに 10 日程度の CPU タイムを要した。自動並列オプションを追加して計算を試みたが計算速度は逆に遅くなった。今後は SEA-GEARN を MPI 並列化し、高速計算が可能となるようにソースコードを改良する予定である。

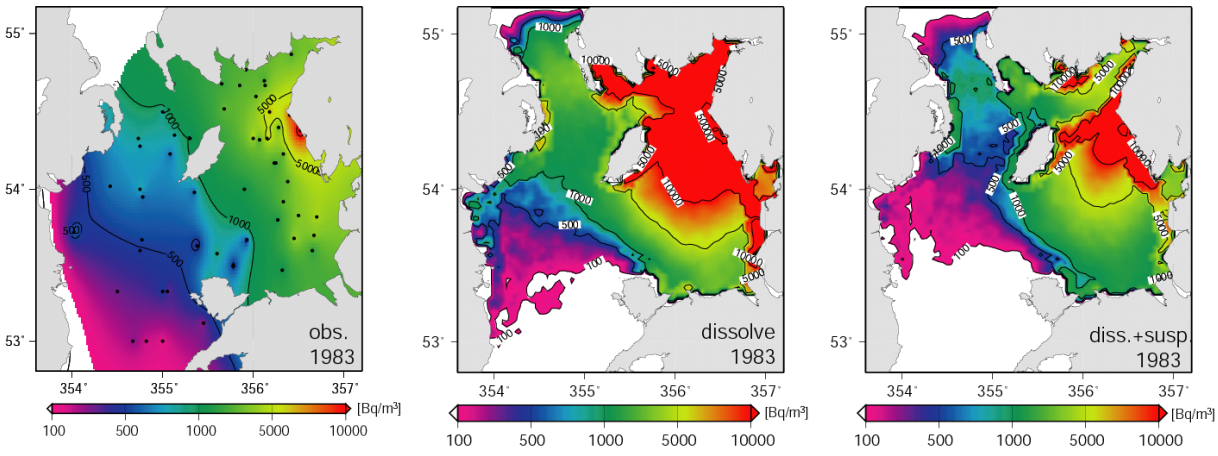


図 1　　表層における溶存態 ^{137}Cs 濃度分布(Bq/m^3)の観測値との比較
左図：観測値、中央図：溶存態のみの計算、右図：溶存態と懸濁態との相互作用を考慮した計算

4.3.8 DNA 鎖切断に関する理論的研究

Theoretical studies on DNA single strand break.

M. Pinak and J. Kotulic Bunta
原子力基礎工学研究部門 放射線影響解析研究グループ

１．利用の概要（要約）：

The current work is focused on results of molecular dynamics simulations performed on DNA single strand break as an origin of a double strand break, that is considered to be one of the most significant damage leading to genetic instability that may result in enhanced cell proliferation or carcinogenesis. The computational studies were focused on the structural and molecular orbital changes at strand break site. The result show that open valences at broken strand ends are quickly filled by the electrons generated during radiolysis. Results of simulation also indicate a local instability of hydrogen bonds between complementary bases.

２．利用の内容・結果：

Single strand break (ssb) is a predecessor of double strand breaks (dsb) of DNA, that is among the most important lethal effects in cells; moreover, there is a significant probability that the attempted repair of dsb's leads to insertion or deletion errors, and a certain probability of mutation. Strand breaks are caused by the incision of bond at either C3' or C5' atoms of DNA pentose and require damage to the sugar-phosphate backbone. Breaks that occur in a single strand of the DNA molecule are repaired using the same enzyme systems functional in base-excision repair. Once DNA is damaged, the damage must be properly repaired in order to keep its molecule intact. Failure of the DNA repair process disrupts the structural stability, which must be preserved in order to be properly segregated to daughter cells when cells divide. The molecular events following the DNA repair failure leading to a genomic instability are only partly understood. Aim of present work is to describe the structural and molecular changes at the DNA strand site.

method

The molecular dynamics (MD) technique was the main tool. MD simulation is a technique that yields static and dynamic properties of a molecular system and provides useful scientific data showing the DNA in its dynamical mode. The classical MD is based on solving of Newton’s equations of motion for each atom in the system. Solving of these equations produces new atomic coordinates that are used to calculate new set of forces. Static and dynamic properties of the system are then obtained as a time averages over the trajectory. For the simulations the molecular dynamics program package Amber 5 was used.

single strand break

The ssb was introduced between adenine and cytosine of DNA strand by breaking the covalent bond between P and O3’ atoms of the backbone (Fig. 1).

To obtain the charges and structural parameters of the broken strand the quantum chemical

calculation was needed. This was performed using Gaussian03 software package. Fig. 2 shows the structure of ssb and the newly computed charges and distance between O3' and P atoms.

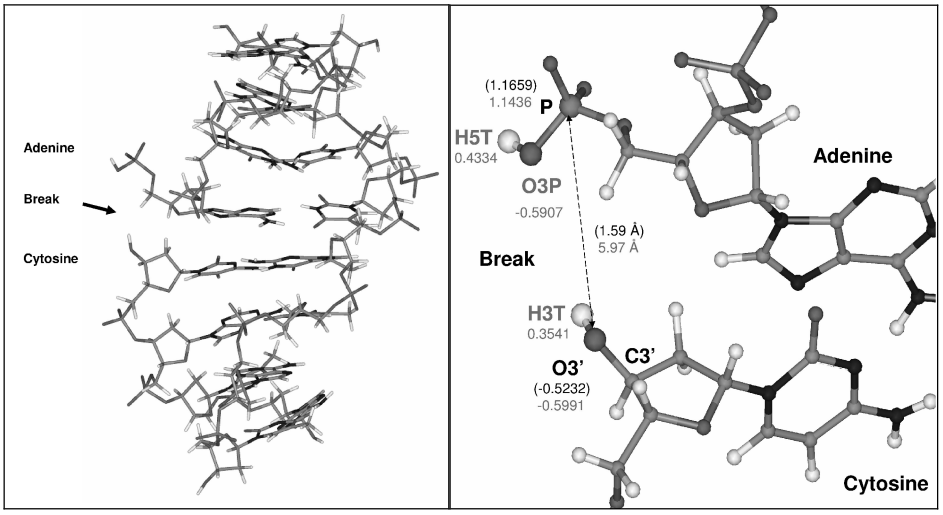


Fig. 1 (left) Position of ssb on the DNA strand representing the result of hydrolysis of the glycosidic phosphate sugar bond.

Fig. 2 (right) DNA single strand break MD after 10 nanoseconds of MD simulation. The numbers show the ESP charges of individual atoms (charges fitted to the electrostatic potential) and the interatomic distance between P and O3' atoms. The original values prior simulation are shown in parentheses.

In analyzing the results of 10 ns of MD simulation of DNA 8-base pairs duplex it was observed that molecular structure remains relatively stable for the first approximately four nanoseconds, however, after the fourth nanosecond the molecule starts change at the break site. Mainly it is observed that residues are separating and their relative conformation is being deformed and partly disintegrated. It has been observed that open valences at broken strand ends are quickly filled by the electrons generated during radiolysis.

One of the indicators of the DNA double helix stability is existence of hydrogen bonds between complementary residues. Fig. 3 shows the probability of existence of hydrogen bonds. It is seen that after 8th nanosecond several hydrogen bonds are permanently broken. This indicates that double helix is becoming less stable and unless the break is repaired it may lead to disintegration of the DNA molecule.

However, in further MD the reestablishment of broken hydrogen bonds was observed indicating that the ssb doesn't present significant threat to the integrity of DNA.

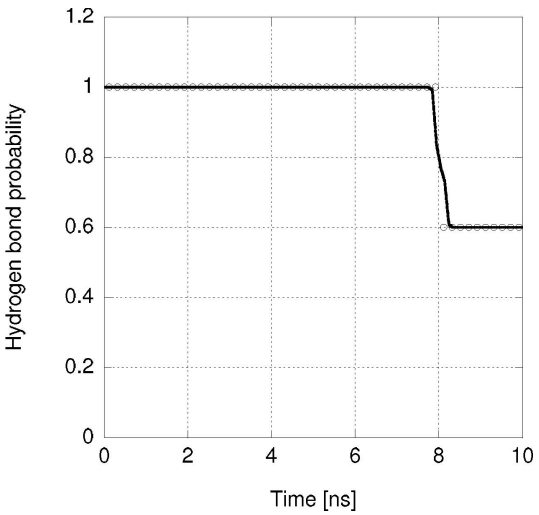


Fig. 3 Hydrogen bond existence probability. It shows the results for hydrogen bonds between ssb nucleotides and their complementary nucleotides on the opposite strand.

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

KOTULIC BUNTA, J., LAAKSONEN, A., PINAK, M. and NEMOTO, T. 2006, DNA strand break: structural and electrostatic properties studied by molecular dynamics simulation. *Computational Biology and Chemistry* **30**, 112-119.

BUNTA, J., DAHLBERG, M., ERIKSSON, L., KOROLEV, N., LAAKSONEN, A., LOHIKOSHI, R., LYUBARTSEV, A., PINAK, M. and SCHYMAN, P. 2005, Solvating, manipulating, damaging and repairing DNA in a computer. *J.Quant.Chem.*, in press

SCHYMAN, P., DAHLBERG, M., PINAK, M., BUNTA, J., LYUBARTSEV, A., KOROLEV, N., LOHIKOSK, R., ERIKSSON, L. and LAAKSONEN, A. Modeling, manipulating, damaging and repairing DNA in a computer. Theoretical Biophysics Symposium "TeoBio-05", Orebro, Sweden, June 28-July 1, 2005.

FUJIMOTO, H., PINAK, M., NEMOTO, T., O'NEILL, P., KUME, E., SAITO, K. and MAEKAWA, H. Molecular dynamics simulation of clustered DNA damage sites containing 8-oxoguanine and abasic site. The 34th Annual Meeting of the European Society for Radiation Biology, Leicester, UK, September 5-8, 2005.

KOTULIC BUNTA, J., LAAKSONEN, A., NEMOTO, T. and PINAK, M. DNA strand break – structural properties studied by molecular dynamics simulation. 4th European Conference on Computational Biology, Madrid, Spain, September 28-October 1, 2005.

KOTULIC BUNTA, J., PINAK, M. and SAITO, K. Radiation Damage in DNA: Computational Study of the Strand Breaks. The 1st Asian Congress of Radiation Research, Hiroshima, Japan, November 16-17, 2005

PINAK, M. Radiation and non-radiation damage to DNA: onset of molecular instability and carcinogenesis. Theoretical explorations on DNA damage and repair. The 7th Environmental radioactivity workshop, KEK, Tsukuba, Japan, March 7-9, 2006.

Published proceeding: PINAK, M. and KOTULIC BUNTA, J. Radiation and non-radiation damage to DNA: onset of molecular instability and carcinogenesis. Theoretical explorations on DNA damage and repair., in press

４．今後の利用予定：

In the future work the current study is planned to include the MD simulation of double strand break in complex with repair enzyme - heterodimer Ku70:80. The set of complex structures shall be generated in simulated annealing process and potential energy of each complex evaluated. This work aims to identify the crucial parameters leading to proper recognition of free DNA ends (e.g. dsb) by the enzyme. Generated complex structures shall be compared with available crystal structures and provide information on missing residues that are not seen in crystals.

4.3.9 ボクセルファントムを用いた成人日本人における光子吸収割合評価

Evaluation of photon absorbed fractions for adult Japanese by using voxel phantoms

佐藤　薫
放射線防護研究グループ

１．利用の概要（要約）：

内部被ばく線量評価を行うためには、線量係数（Sv/Bq）が必要である。線量係数は、放射線の吸収割合（線源臓器から放出された放射線のエネルギーのうち、標的臓器において吸収される割合）及び体内動態モデルを用いて評価された臓器中の放射性核種の沈着量を用いて計算される。このうち、放射線の吸収割合は、コンピュータ上に再現した人体ファントムを用いて計算する必要がある。従来、数式を用いて臓器形状を単純に表現したMIRD5型ファントムの吸収割合が線量係数の計算のために用いられていた。しかし、MIRD5型ファントムは、人体構造を正確に表現していないという欠点があった。一方、近年CT及びMRIの画像データに基づいてボクセルと呼ばれる小直方体の集合体によって人体構造を表現したボクセルファントムが開発されており、国際放射線防護委員会（ICRP）の新勧告においても男女の標準ボクセルファントムが採用される予定である。しかし、これらのボクセルファントムは主に西欧人の体格データに基づいて開発されているため、日本人における精度の高い線量評価を行うためには、日本人の体格を反映したファントムを用いて吸収割合の評価を行うことが必要である。また、吸収割合は、臓器形状、位置等の人体構造によって影響されることから、線量評価に及ぼす人体構造の影響を明らかにすることは、極めて重要である。

放射線防護研究グループでは、原子力機構が開発した日本人成人男女のボクセルファントムを用いて成人日本人における光子吸収割合の変動幅の評価、及び体格、姿勢等の違いが光子吸収割合に及ぼす影響について解析を行っている。これらの評価解析のためには、人体内における光子、電子等の放射線の詳細な輸送計算を行う必要がある。また、線量係数の計算のためには、0.01MeV～4.0MeVの光子の吸収割合が必要であるが、特に、低エネルギー光子の輸送計算の精度を確保するためには、長時間にわたる計算を行う必要がある。さらに精密な人体構造を有するボクセルファントムを取り扱うため、大容量のメモリーを使用する。このため、本研究では大規模な計算機資源を有するITBL計算機を活用し、成人日本人における光子吸収割合の特徴について解析を行った。

２．利用の内容・結果：

ボクセルファントムを用いて光子及び電子の吸収割合を計算するため、原子力機構が開発したモンテカルロコードであるUCSAFの並列版を用いてITBL計算機による並列計算を行った。吸収割合の評価のため、原子力機構が開発した日本人成人男性ボクセルファントムであるOtoko、JM、及び日本人成人女性ボクセルファントムであるOnago、JFを用いた。各ファントムの体格を表1に示す。Otoko及びJMファントムの体格は、日本人成人男性の平均とほぼ等しく、Onagoファントムの体格は、日本人成人女性の平均と比較して大きい。また、JF

表１　日本人成人ボクセルファントム

	Otoko	Onago	JM	JF	日本人成人男性平均	日本人成人女性平均
性	男	女	男	女	-	-
身長（cm）	170	162	171	152	170	155
体重（kg）	65	57	66	44	65	52

ファントムの体格は、日本人成人女性の平均と比較して小柄である。平成 17 年度においては、これらのファントムを用いて 0.01MeV～4.0MeV の光子が腎臓、肝臓等の線源臓器より放出されると仮定した時の主要な標的臓器における光子吸収割合を計算した。これらの計算において、光子エネルギーが低いケース及び線源臓器と標的臓器の距離が離れているケースについては、計算精度を向上させる必要があり、多くの計算時間を必要とすることから、ITBL 計算機を活用し、120 プロセッサーを利用した並列計算を実施した。

平成 17 年度において得られた成果は、以下の通りである。

・成人日本人ボクセルファントムを用いて計算した光子の比吸収割合（吸収割合を標的臓器の割合で割った値）の例として、腎臓から 0.5MeV の光子が放出されると仮定したときの肝臓、膵臓、副腎、脾臓、胃壁、下部大腸壁における比吸収割合を図 1 に示す。Otoko、JM、Onago、JF ファントムの比吸収割合は、全ての標的臓器において Voxel-MIRD ファントムよりも高かった。また、下部大腸壁における比吸収割合は、Voxel-MIRD ファントムと各日本人ボクセルファントムとの差が最も大きく、Voxel-MIRD ファントムの比吸収割合は、Otoko、JM、Onago、JF の各ファントムの約 11%、23%、13%、32%であった。さらに、腎臓を線源臓器とした時の日本人成人ファントムの下部大腸壁における比吸収割合には、体格の影響は認められなかった。

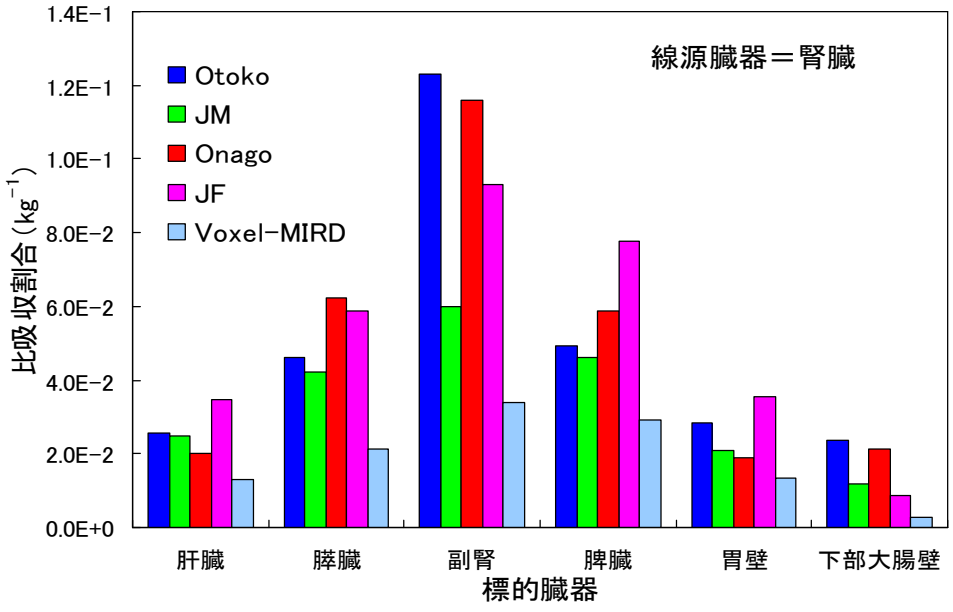


図１　腎臓を線源臓器としたときの主要臓器における 0.5MeV 光子の比吸収割合

・腎臓が線源臓器である時の各主要臓器の光子比吸収割合と、腎臓から各標的臓器までの臓器重心間距離の関係を図 2 に示す。今回、計算した肝臓、膵臓、副腎、脾臓、胃壁、下部大腸壁の比吸収割合は、腎臓から各臓器の重心間距離が長い程、小さくなることが明らかになった。また、Otoko、JM、Onago、JF の成人日本人の各ボクセルファントムは、Voxel-MIRD ファントムと比較して腎臓からの臓器重心間距離が短いため、比吸収割合は高くなることが明らかになった。

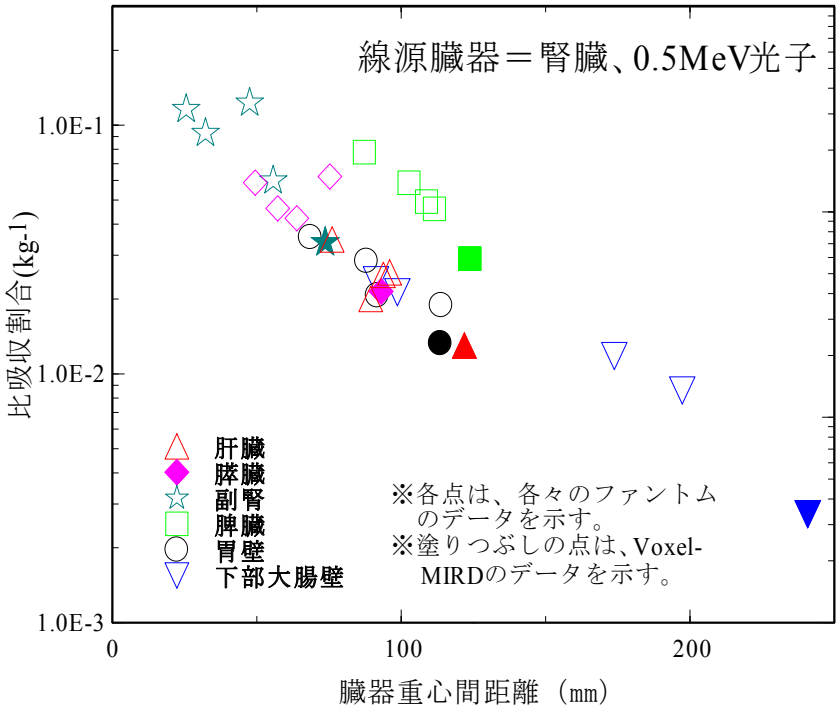


図 2　主要標的臓器の比吸収割合と、腎臓から各標的臓器までの重心間距離の関係

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

(1)「日本人成人女性ボクセルファントムの開発」　（2005 年日本原子力学会春の年会）

⑵Japanese adult male voxel phantom constructed on the basis of CT-images. Radiation Protection Dosimetry (to be submitted)

４．今後の利用予定：

今後、姿勢の違いが内部被ばく線量に及ぼす影響を明らかにするため、原子力機構で開発した立位姿勢ボクセルファントムを用いた光子吸収割合の評価を行い、解析を進める予定である。また、成人日本人における比吸収割合のデータベースを構築するため、ITBL 計算機を積極的に利用する予定である。

4.3.10 原子力緊急時対応のための長距離大気拡散予測モデルの開発

Development of a long-range atmospheric transport model for nuclear emergency

寺田　宏明
環境動態研究グループ

１．利用の概要（要約）：

本研究は、原子力発電所での事故等の緊急時において大気中に放出された放射性物質の移行挙動のリアルタイム予測を行う世界版緊急時環境線量情報予測システム WSPEEDI(Worldwide version of System for Prediction of Environmental Emergency Dose Information)の計算モデルの開発および改良を行うことを目的としている。従来の WSPEEDI は質量保存風速場モデル WSYNOP とランダムウォーク法粒子拡散モデル GEARN から構成されていた。気象場の計算モデルとして、WSYNOP に代わり大気力学方程式に基づいて 3 次元気象場の予測計算を行う非静力学気象モデル MM5 を導入した。また、従来は 1 領域の計算のみが可能であったが MM5 の領域ネスティング機能の利用および GEARN のネスティング計算への対応により 2 領域の同時計算が可能となった。これらの改良の結果、必要な計算資源は増大し、また検証計算の際、各種パラメータの最適化のための多数のケースでの計算が必要となった。さらに緊急時対応のためには迅速な計算結果の提供が重要となる。したがって本研究を行うためには大型計算機の利用が必要不可欠である。

２．利用の内容・結果：

従来使用していた WSYNOP は質量保存則を満たす高解像な計算格子点上の風速場を 3 次元変分法を用いて気象庁の予報データから診断的に計算するモデルであり、気象場を予測計算することは不可能であった。このため予測精度および解像度が入力気象データに依存し、また大気拡散計算に利用可能な気象場の変数が予報データに含まれているものに限られているため、鉛直拡散および降雨沈着過程の詳細な考慮が不可能であるという短所があった。これを改良するため米国ペンシルバニア州立大と大気研究センターで開発された大気力学モデル MM5 を導入した。また GEARN については、降水の 3 次元構造を考慮した湿性沈着計算および MPI(Message Passing Interface)を用いて広域と局所域の 2 領域ネスティング計算が可能なモデルに改良した。この改良版 WSPEEDI を 1986 年に発生したチェルノブイリ事故に適用し、数値モデル予測性能の検証を行った。CASE-1：ヨーロッパ全域を含む広域計算と、CASE-2：広域とチェルノブイリ周辺の狭域での２領域ネスティング計算の２ケースの計算を Altix3900 を利用して行い、Cs-137 の大気中濃度と地表沈着量の計算値を測定値と比較することにより検証を行った。CASE-1 の結果の 6 時間平均地表濃度の時間変動を測定値と比較した結果、プルームの到達時刻、高濃度ピーク発生のタイミングや継続時間など概ね良く計算されたことが確認できた。日平均濃度についての統計解析結果も良い精度を示した。また積算沈着量の水平分布については、CASE-1 の計算結果と測定値の比較結果からヨーロッパスケールでの沈着量分布の特徴が良く再現できた（図１）。さらに CASE-2 の狭域の計算結果の測定値との比

較から、領域ネスティング計算により CASE-1 の広域のみの計算では不可能であったチェルノブイリ周辺の詳細な沈着量分布が計算された（図２）。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1. H. Terada and M. Chino,
“Development of a long-range atmospheric transport model for nuclear emergency and its application to the Chernobyl nuclear accident,”
Proc. 2nd International Conference on Radioactivity in the Environment , Nice, France, October 2 - 6 (2005).

４．今後の利用予定：

上記のチェルノブイリケースの広域全領域についてネスティングを使わず狭域と同じ高解像度での計算を大型計算機を用いて行い、ネスティング手法の妥当性を検証する予定である。

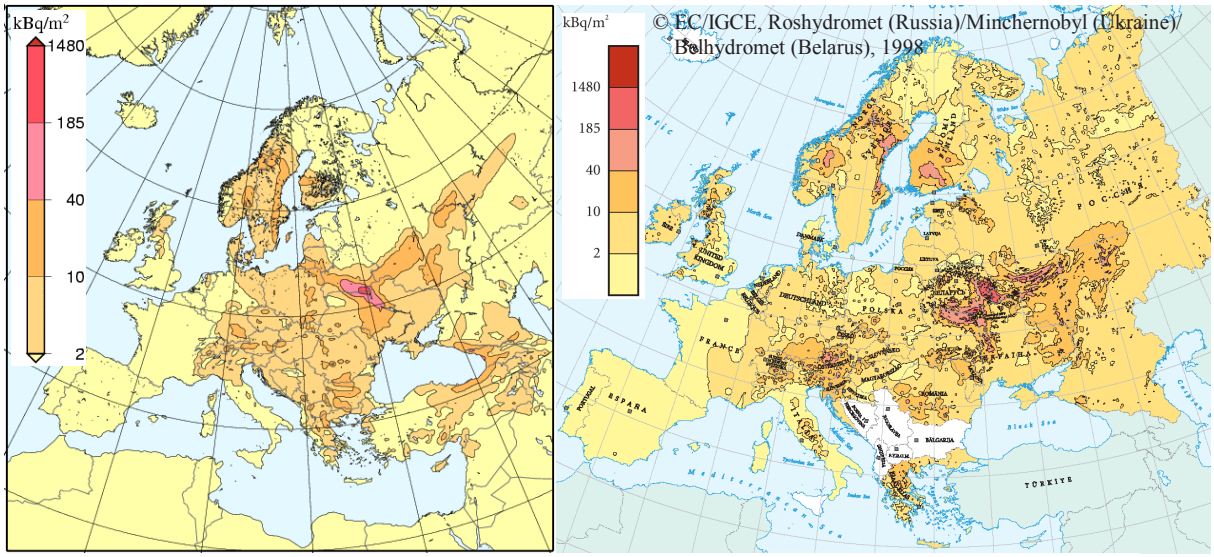


図１．事故発生から 2 週間後の Cs-137 の積算沈着量。左が広域の計算結果（CASE-1）。右が測定値。

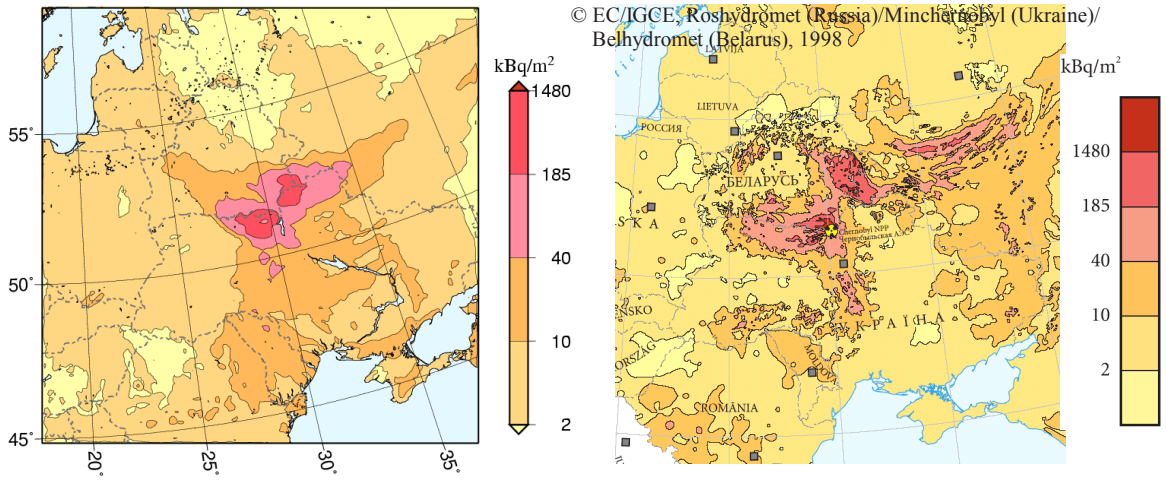


図２．事故発生から 2 週間後の Cs-137 の積算沈着量。左が狭域の計算結果（CASE-2）。右が測定値（拡大図）。

4.4 量子ビーム応用研究部門

4.4.1 DNA の構造とダイナミクスの配列依存性

Sequence-Dependence of DNA Conformation and its Dynamics

河野　秀俊

生体分子シミュレーショングループ

１．利用の概要（要約）：

ワトソンとクリックによって２重らせん構造が提唱されて50年以上経つが、未だにDNA構造の配列依存性はよくわかっていない。DNA の構造変化は、細胞のなかでの DNA のパッケージング、遺伝子発現制御に深く関わっている。これらのメカニズムを原子レベルで明らかにするには DNA 配列と構造の関係を明らかにすることが不可欠である。

そこで、ITBL 計算機を利用して DNA の分子動力学計算を行い、DNA の構造とダイナミクスについて、DNA 配列依存性を解析した。これまでは、X 線結晶構造解析などから得られた立体構造にもとづいて解析を行っているため、DNA 構造のサンプル数が非常に少なく、２塩基対までの解析しかできなかった。我々は、分子動力学計算にもとづく構造サンプリングにより、２塩基対を拡張した４塩基対までの構造と配列依存性の解析を行い、新たに配列と構造・ダイナミクスの関係を明らかにし、DNA の構造変形のしやすさを定量的に評価するポテンシャル関数を作成した。

２．利用の内容・結果：

蛋白質によるDNAの認識機構は、細胞の中に起こっている最も基本的な分子間相互作用であるが、そのメカニズムは良くわかっていない。蛋白質との間に、水素結合やファンデルワールス、静電相互作用のような直接的な相互作用が見られない塩基配列を変えることでも、DNA結合蛋白質とDNAとの結合の強さが大きく変わることが知られている。これは、蛋白質がDNAの配列ではなくて、そのDNA自体の構造情報や物性情報を認識していると捉えることができ、直接認識に対して間接認識と呼ばれている。また、DNAの構造・物性特性は、DNAのパッケージングやクロマチン構造を理解する上でも非常に重要である。

本研究では、蛋白質-DNAの配列特異的認識において、間接認識の大きさを定量的に表現するポテンシャルを導出するために、分子動力学シミュレーションを行なった(図1)。これまでに、蛋白質-DNAの複合体構造からDNA配列の異なる10通りの2塩基対に対する平均構造とその柔らかさが調べられている。しかし、この解析では、異なる複合体構造から得られた構造解析であり、特定のDNA構造の熱力学的な揺らぎを直接的に反映していない。また、より長い配列が与える構造への影響も指摘されているが、充分なサンプルを得るだけの立体構造は解かれていない。そこで、2塩基対の前後に塩基対を加えた4塩基対の配列、すなわち、136通りのDNA配列に対して、DNAの平均構造及び柔らかさを調べた。12塩基対からなるDNAモデルの真ん中に対象とする4塩基対を配置した。136の異なるDNA配列に対して、各10 ns の分子動力学計算を行い、構造を1psごとにサンプリングした。ベースペアをひとつの剛体として扱うことで、DNAの構造を6つのステップパラメータで表現した(図２)。そのパラメータの分布から、DNAの平均構造、ステップ間の相関及び構造変化のしやすさを表す力学定数を求

めた。図３に示すように、ステップ間のパラメータの相関は、隣のステップで高々0.5程度であり、２つ隣のステップではほぼ0.25以下になった。このことから、対象ステップと前後のステップつまり４塩基対でその構造特性を考えればよいと判断した。また、配列ごとに力学定数を見ると、xATxとなる配列が最も硬く、逆にxTAxとなる配列が最も軟らかい配列と計算された。これは、従来から言われていたプリン(A/G)、ピリミジン（T/C）と続く配列が最も硬く、逆にピリミジン、プリンと続く配列が最も柔らかという知見と一致するものである。しかし､個々の4塩基対配列を見ていくと､このルールに反する配列が見られた｡例えば､TGCGは硬いと考えられるが、比較的軟らかく、CCAAはピリミジン、プリンの配列に関わらず比較的硬い配列であった。平均構造では、硬い配列ほどその構造が標準的なＢ型DNA構造に近いこともわかった。

現在、これらの結果をもとに作成したポテンシャルを用いて、DNAの物性と転写などの関係を調べている。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

論文

1 Arauzo-Bravo, M., Fujii, S., Kono, H., Ahmad, S. & Sarai, A. (2005). Sequence-Dependent Conformational Energy of DNA Derived from Molecular Dynamics Simulations:Toward Understanding the Indirect Readout Mechanism in Protein-DNA Recognition. *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 16074-16089.

2 Arauzo-Bravo, M., Fujii, S., Kono, H. & Sarai, A. (2006). Disentangling the Role of Tetranucleotide in the Sequence-Dependence of DNA Conformation: A Molecular Dynamics Approach. *Asian Pacific Conference of Bioinformatics, APCB06*, 227-236.

学会発表

3 藤井聡, 竹中繁織, 河野秀俊, 郷信広 & 皿井明倫. (2005). 分子動力学による DNA 構造の配列依存的特性の解析. 第 43 回日本生物物理学会年会, 札幌.

4 Marcos, A.-B., 河野秀俊, 藤井聡 & 皿井明倫. (2005). Molecular Dynamics Simulations of DNA: Application to the Specificity of Protein-DNA Recognition. 第 43 回日本生物物理学会年会, 札幌.

5 藤井聡, 河野秀俊, 郷信広 & 皿井明倫. (2005). 分子動力学による DNA 配列の構造特性の解析－蛋白質による DNA 配列の間接認識の理解に向けて－. 第 5 回日本蛋白質科学会年会, 福岡.

４．今後の利用予定：

DNA の水和について配列依存性をシミュレーションするため、引き続きシミュレーションを行う。

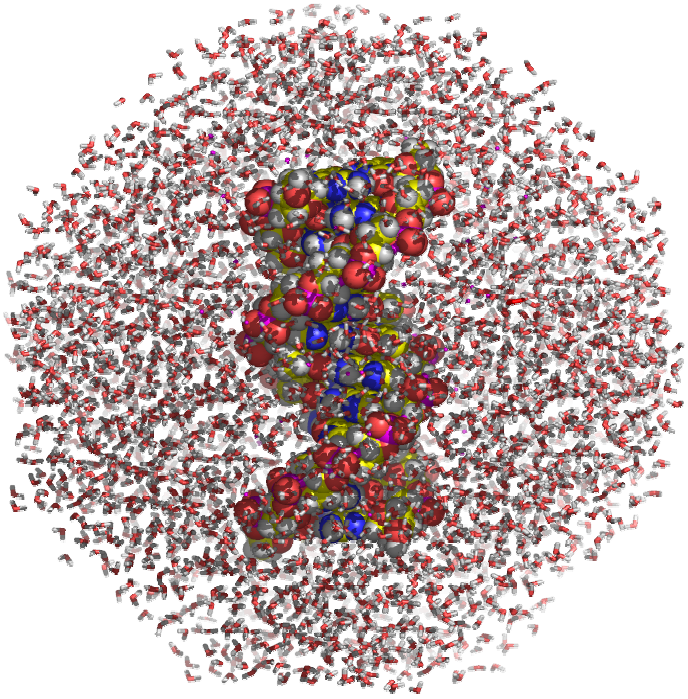


図１．シミュレーションの系。

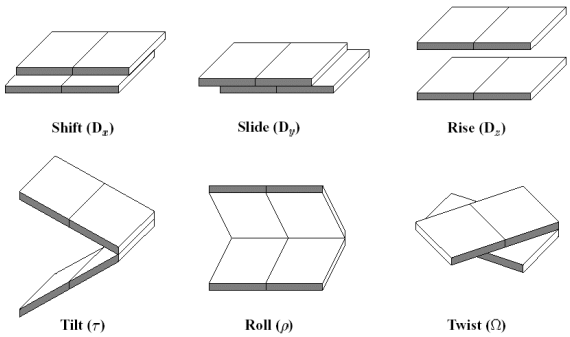


図２．ステップパラメータ。ベースペアを剛体として扱う。２つのベースペアの相対的な位置関係は、この６つのパラメータで表すことができる。

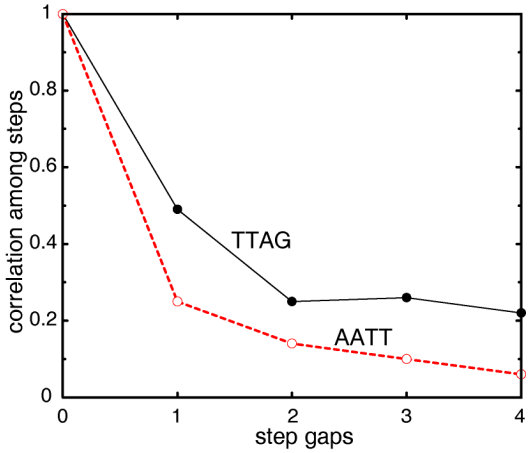


図３．ステップ間のステップパラメータ相関。最も硬いAATTと軟らかいTTAG配列に対してプロットした。

4.4.2 生体分子シミュレーションシステムによる生体分子機能の解明研究

Biomolecular function studied by parallel molecular dynamics simulation

城地　保昌
東京大学・分子細胞生物学研究所
機構担当者：石田　恒（生体分子シミュレーション研究グループ）

１．利用の概要（要約）：

東京大学・分子細胞生物学研究所と生体分子シミュレーション研究グループが開発しているシミュレーションシステムを利用して生体超分子の大規模シミュレーションを実行し生体分子の機能研究を行う。また、得られた結果などを通して、シミュレーションシステムに今後必要とされる解析手法を開発する。

２．利用の内容・結果：

東京大学・分子細胞生物学研究所と生体分子シミュレーション研究グループが開発しているシミュレーションシステムを利用して、DNA 組換え修復に関与する蛋白質 RuvA や細菌べん毛繊維の生体超分子の大規模シミュレーションを実行したところ，予想以上に大きな実行メモリサイズを必要とすることがわかった。そこで、使用メモリサイズを軽減するための配列サイズチューニングを行った。また、ロードバランスによる効率的並列計算など、性能向上のためのシステム開発を引き続き行った。拡張されたシステムは、生体分子シミュレーション研究グループにおいて、DNA 修復蛋白質などの機能解析に適用された。開発、性能検証は ITBL 計算機を用いて行った。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

なし。

４．今後の利用予定

シミュレーションシステムの開発と応用を継続し、生体分子の機能解析を目指す。

4.4.3 生体分子シミュレーションシステムによる生体分子機能の解明研究

Biomolecular function studied by parallel molecular dynamics simulation

北尾　彰朗
東京大学・分子細胞生物学研究所
機構担当者：石田　恒（生体分子シミュレーション研究グループ）

１．利用の概要（要約）：

生体超分子の大規模シミュレーションを実行し生体分子の機能研究を行う。また、得られた結果などを通して、東京大学・分子細胞生物学研究所と生体分子シミュレーション研究グループが開発しているシミュレーションシステムに今後必要とされる解析手法を開発する。

２．利用の内容・結果：

ITBL 計算機を利用して、細菌べん毛繊維の大規模分子動力学シミュレーションを行い、様々な実験データを満足する原子レベルの超らせん構造を構築すると共に、構造多型の分子メカニズムを解明することに成功した。超らせん構造構築のメカニズムには以下の 3 種類の相互作用が鍵となることがわかった。パーマネント相互作用は様々な超らせん構造において常に保たれる。スライディング相互作用は可変な疎水性および親水性アミノ酸残基ペアの間で形成され、大きなエネルギー変化なしに蛋白質サブユニット間のずれを許容する。スイッチ相互作用の形成と解消はサブユニット間相互作用とサブユニット内相互作用をそれぞれ安定化する。我々は構造多型の原因は両者の相互作用のフラストレーションであると結論付けた。超らせん構造間の転移は「変形＝＞緩和」機構によって起こる。すなわち、繊維構造は幾何学的に急速に変形させられ、その後相互作用を再構成しながら徐々にエネルギー的準安定状態へ緩和することを明らかにした。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

A. Kitao, K. Yonekura, S. Maki-Yonekura, F. A. Samatey, K. Imada, K. Namba, and N. Go: Switch interactions control energy frustration and multiple flagellar filament structures, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 103,　4894-4899, 2006

４．今後の利用予定：

シミュレーションシステムの開発と応用を継続し、生体分子の機能解析を目指す。

4.4.4 ポイズン付き非結合型液体水素モデレータの中性子パルス特性の検討

Neutronic studies of poisoned decoupled liquid-hydrogen moderator

原田　正英
中性子施設開発グループ

１．利用の概要（要約）：

本研究室では、J-PARC プロジェクトの主要施設である核破砕中性子源（JSNS）の設計、開発、建設を任務としている。JSNS は、水銀ターゲットに、1MW、3GeV、25Hz の陽子ビームを照射し、ターゲットの上下に設置されている３台の液体水素モデレータから、冷、熱中性子ビームを引き出し、ユーザーに供給するものである。JSNS では、短パルスの中性子ビームを供給するモデレータとして、ポイズン型モデレータが用いられる。中性子パルス特性を向上させるために、中性子特性の観点からモデレータ最適化研究を行うことは、施設の有効利用のために必要不可欠である。しかしながら、この種の最適化研究を実験的に行うことは、不可能に近い。そのため、粒子輸送シミュレーションにより、中性子特性を評価する手法を採用している。

JSNS のポイズン型モデレータは、内寸 13x12x6.2 cm^3 の液体水素で満たされたモデレータ容器中に、中央付近にモデレータを仕切るように、カドミウム（Cd）のポイズン板が設置される。ポイズン板は、モデレータ厚さを実効的に小さくするために用いられる。ポイズン型モデレータの主パラメータは、ポイズン前面側モデレータ厚さ、ポイズン背面側モデレータ厚さ、ポイズン厚さ、材質などであり、本研究では、これらのパラメータ変更による中性子パルス特性への影響を粒子輸送シミュレーション計算により評価し、中性子パルス特性の最適化を行うことを目的としている。粒子輸送計算には、PHITS コード及び MCNP コードを用いている。

本研究は、中性子パルス特性に着目しているため、１ケース当たりの計算時間が、非常に多く必要である。また、パラメータ数が多いため、必然的に計算ケース数も多い。一方、一般的に用いられている分散低減法による計算の加速化は、体系の特殊性から大きくは望めない。しかしながら、本研究で用いている粒子輸送計算コードは、モンテカルロ法を用いており、並列化可能である。そのため、スカラー並列型計算機を用いることは、計算速度が大幅な向上につながっている。

２．利用の内容・結果：

本研究に用いられている三次元計算モデルを図１に示す。

ポイズン前面側モデレータの厚さ（d_f）を大きくすることにより、中性子ピーク強度は増加するが、中性子パルスの半値幅も増加することがわかった。この中性子ピーク強度の増加は、d_f が 25mm まで、ほぼ d_fの比例することがわかった。また、d_fにより、半値幅を制御することができることがわかった。（図２）。

また、ポイズン背面側モデレータの厚さ（d_b）は、約 35mm まで、中性子強度に利得をもた

らすことを確認した。特筆すべきは、d_b を大きくすることで、中性子強度に利得があるだけでなく、半値幅も小さくできることであり、これまでの一般的な考え方と異なる重要な知見である。（図３）

また、燃焼特性についても検討した。すなわち、ポイズンの燃焼による成分変化を反映して、中性子パルス特性の変化を評価した。この結果、1mm 厚さあれば、1MW、3 万時間運転後でも、ピーク強度及び半値幅は変化しないことがわかった（図４）。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

現在、論文を執筆中であり、Nucl. Instr. Method に投稿する予定である。また、これらの成果は、JSNS 製作に、可能な限り反映する予定である。

４．今後の利用予定：

今後、放射線許認可申請に向けた中性子ターゲットステーションや中性子特性試験装置の遮蔽計算を行う予定である。また、中性子特性試験設備における、バックグランド低減に関する研究も行う予定である。これらの計算にも、本計算機を使用して、並列計算を行うことを考えている。

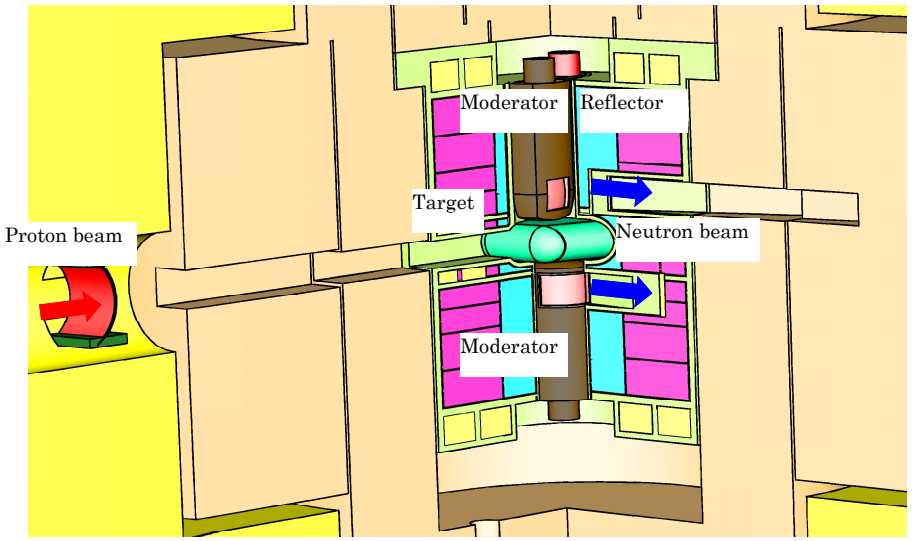


図１、計算モデルの三次元図

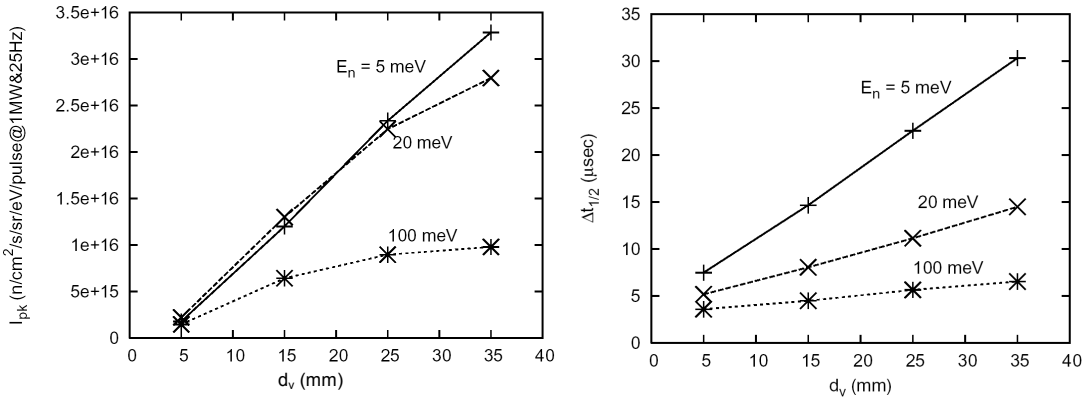


図２、ピーク強度と半値幅のポイズン前面モデレータ厚さ依存性

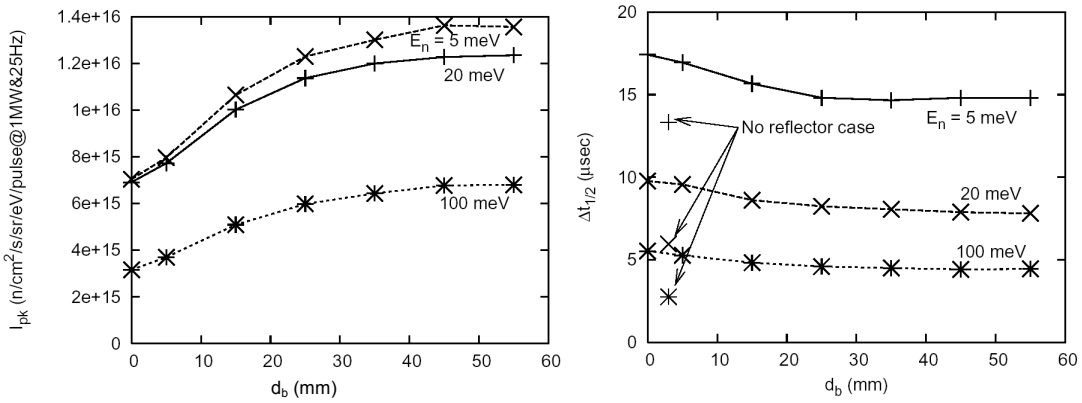


図３、ピーク強度と半値幅のポイズン背面モデレータ厚さ依存性

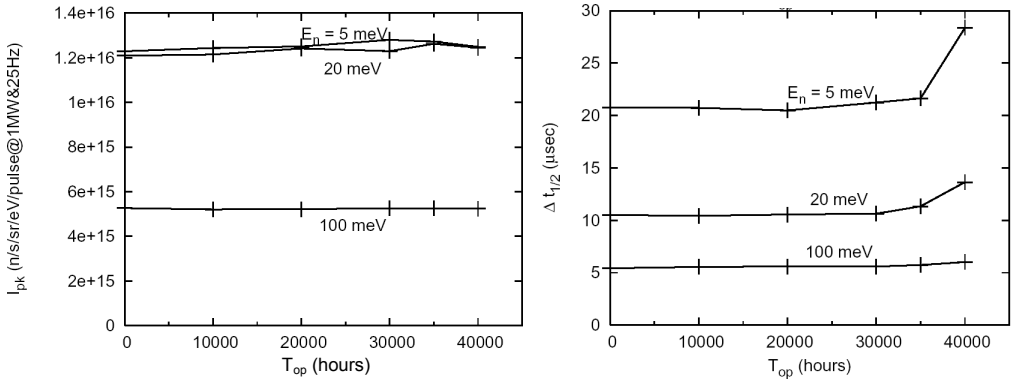


図４、ポイズン厚さ 1.0㎜ の場合のピーク強度と半値幅の燃焼時間依存性

4.4.5 物質・生命科学実験施設に関わる遮蔽設計

Shielding Design on Materials and Life Science Experimental Facility

今野　力
中性子施設開発グループ

１．利用の概要（要約）：

中性子施設開発グループでは大強度陽子加速器計画（J-PARC）のうち物質・生命科学実験施設（MLF）と３GeV シンクロトロンで加速された陽子ビームを MLF まで輸送するビーム輸送ライン（3NBT）の整備を担当している。MLF では 1MW、3GeV 陽子を水銀ターゲット、グラファイトターゲットに入射する時に、また、3NBT では 3GeV 陽子ビームの輸送途中でのビームロス(長さ 1m 当たり 1W のビームロスを仮定)及びビームダンプに 4kW、3GeV 陽子ビームを廃棄する時に、核破砕反応で中性子を含む２次粒子が多量に発生する。この２次粒子が外部に漏洩しないように陽子ビームラインの周り、ターゲットの周りを遮蔽する必要がある。また、ターゲット周りの機器、3NBT の電磁石、冷却水等は高度に放射化するため、高度に放射化した機器の取扱い・保管室の遮蔽、冷却水設備室の遮蔽も必要である。これらの遮蔽評価は、簡易計算が適用できない複雑構造の箇所に関しては、大型計算機システムをフルに利用してモンテカルロコード MCNPX、PHITS による粒子輸送計算を行ない（放射化に関しては DCHAINSP2000 コードも併用)、その結果をもとに遮蔽体の構成、厚さを決定し、施設設計に反映させてきた。これらの遮蔽評価の基本的な部分は平成１５年度までに終了したが、その後も、機器の構造見直しによる遮蔽体の構造変更に伴う追加遮蔽評価、遮蔽体に生じる隙間、開口（ケーブル等のための埋設配管による遮蔽欠損を含む）等による影響評価を大型計算機システムを利用して行なっている。

２．利用の内容・結果：

平成１７年度は主に以下の項目について MCNPX を用いた計算を行なった。

1) MLF 建家内陽子ビームトンネル上部遮蔽ブロック間の隙間による影響
2) 水銀から発生した放射性ガス処理システム周りの遮蔽（含む配管貫通部遮蔽）
3) 冷却水配管詳細模擬線量評価
4) 遮蔽ハッチ隙間による影響
5) ホットセルへの空調ダクト遮蔽
6) 水銀ターゲットで発生した２次粒子の陽子ビームラインへの影響

計算結果の一部として、MLF 建家内陽子ビームトンネル内の電磁石でビームロスした時の上部遮蔽コンクリートブロック外表面での線量率計算の計算モデルと計算結果をそれぞれ図１、図２に示す。ブロック間の隙間により局所的に 50%程度のピーキングが見られるが、それでも常時立入りできる設計基準 6.25μSv/h 以下であることがわかった。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

計算結果は物質・生命科学実験施設の技術報告書の改訂版（JAEA-Technology 等）の一部としてまとめる予定である。また、今後行なう物質・生命科学実験施設の放射線障害防止法の許認可申請書にも計算結果を記載する。

４．今後の利用予定：

物質・生命科学実験施設の放射線障害防止法の許認可申請書作成のために、必要に応じて追加の計算を行なう。

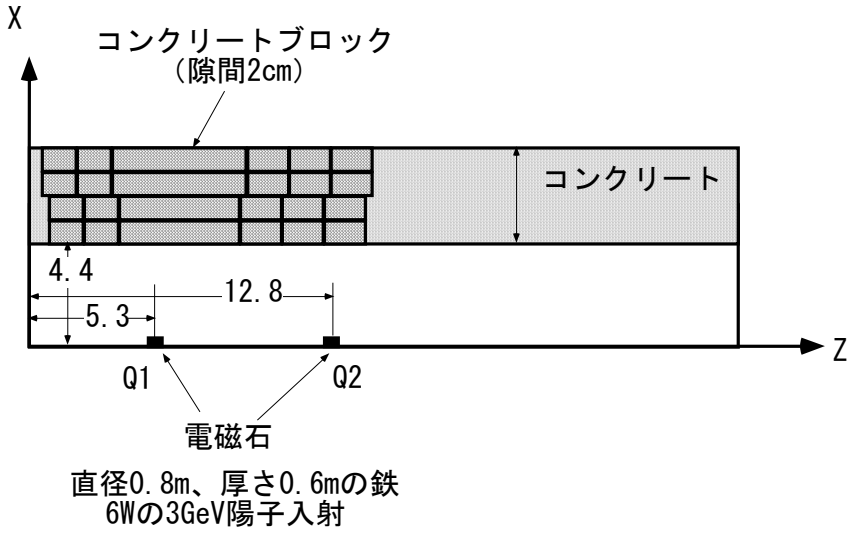


図１　計算モデル

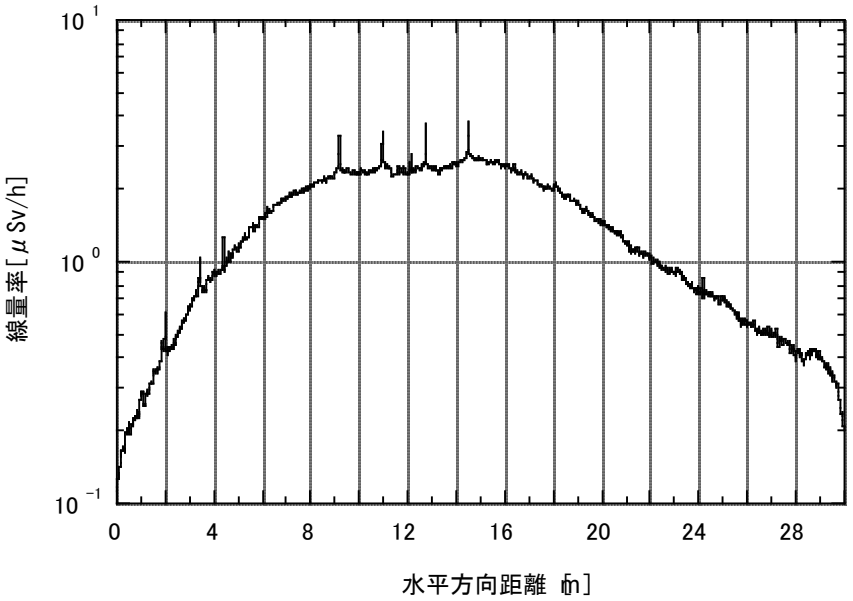


図２　トンネル上部での線量率分布

4.4.6 J-PARC 加速器施設の放射線遮蔽設計

Radiation Shielding Designs of Accelerator Facilities in J-PARC

中根　佳弘
施設安全グループ

１．利用の概要（要約）：

施設安全グループでは，原子力機構が高エネルギー加速器研究機構と共同で建設を進めている大強度陽子加速器施設（J-PARC）における加速器施設の放射線遮蔽設計，放射線安全評価を実施している．放射線による影響評価には主として簡易式が用いられるが，機器や建屋などの構造が複雑なため簡易評価法で評価することが困難な場合も少なくない．このような評価を行うには，実際の施設や機器を詳細にモデル化した計算体系を作成し，この体系内での粒子の挙動を詳細に計算する方法（詳細計算法）を用いる必要がある．加速器施設の評価には，主に高エネルギー粒子輸送モンテカルロコードが用いられるが，実際の施設をモデル化するため計算体系が大きく，また厚い遮蔽体を透過する粒子の輸送計算を取り扱うことから，十分な統計精度を得るには膨大な計算時間が必要であり，大型計算機システムの利用は必要不可欠である．

２．利用の内容・結果：

17 年度は，主に 3GeV 陽子シンクロトロン加速器施設の放射線遮蔽設計及び安全評価を実施した．高エネルギー粒子輸送計算コードとして PHITS 及び MCNPX を用い，加速器運転中における遮蔽体透過後の線量，通路や連絡口など迷路構造からのストリーミング線量について，PC クラスタを利用して計算を行った．3GeV シンクロトロン施設では，上段の加速器であるリニアックからのビーム入射部及びその近傍の機器や，下段の加速器（50GeV シンクロトロン）及び実験施設へのビーム出射部の機器などで比較的多くのビーム損失が局所的に起こることが想定されている．しかし，これらに用いられる機器の構造は非常に複雑で，簡易評価式の適用条件を満たさないことから，信頼できる評価を行うには詳細計算法を用いる必要がある．また，加速器が収納されたトンネルから機械室などのある建屋へ延びる迷路構造の連絡通路等のストリーミング評価においても，建屋，通路，ダクト開口部等の構造（形状）の複雑さから，簡易評価式による評価は困難であり，詳細計算法を用いる必要がある．また，これらの計算では，機器や遮蔽構造の最適化，多様な線源や経路の評価に対応するため，多くのケースの計算を行う必要があるが，大型計算機システムを利用することで，多様な線源，体系に対する多くの計算を実施することができた．

評価結果の一例として，PHITS コードを用いて計算した入射コリメータ機器近傍での遮蔽体透過後の中性子線量率分布評価結果を示す（図１）．詳細計算法を用いた評価により，簡易計算法では困難な，複雑な構造を有する機器に不均一に分布する損失ビームを線源とした放射線の影響評価を行うことが可能となり，施設の放射線遮蔽設計及び安全評価を適切に行うことができた．

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

平成 17 年度に作業した，また 18 年度に機器の設計変更に対応して作業を実施する放射線遮蔽設計及び安全評価の結果は，平成 18 年度下期に文科省に申請予定の，J-PARC 3GeV シンクロトロン加速器施設の許認可申請書における線量評価結果として用いられる予定である．

４．今後の利用予定：

J-PARC 施設の建設スケジュールに対応して，今後の許認可申請に必要な放射線安全評価を継続して実施する予定．

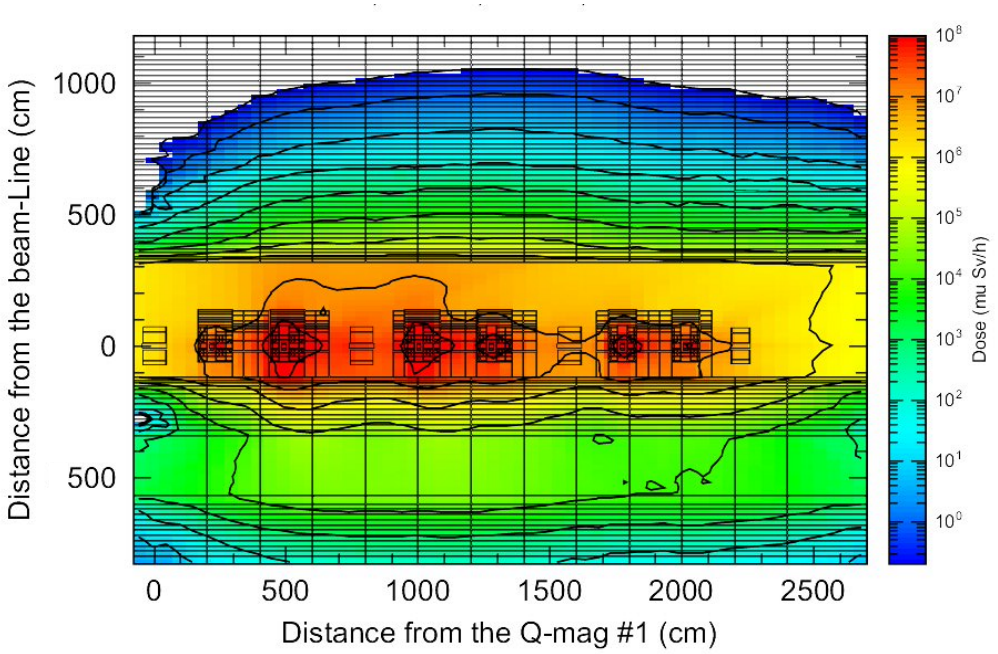


図１　入射コリメータ機器近傍での加速器運転中の中性子線量率分布

4.4.7 耐放射線性 SiC デバイス用酸化膜の第一原理分子動力学シミュレーション

First-Principles Molecular Dynamics Simulation of Oxide Layers for Radiation-Tolerant SiC Devices

宮下　敦巳

物質選択性セラミック材料研究グループ

１．利用の概要（要約）：

SiC 半導体デバイスである SiC 電界効果トランジスタ(MOSFET)の SiC/SiO_2 界面には界面欠陥が多く存在しており、MOSFET のチャネル内電子移動度は理論的に予測される値よりも低い値しか実現できていない。MOSFET の性能向上のためには、高チャネル移動度、高絶縁破壊電圧の SiC/SiO_2 界面の形成技術の開発が不可欠であり、これには界面欠陥の物理構造と電気特性との関連性を明らかにする必要があるが、物理的測定手法から推定される界面欠陥の原子構造から電気特性を推定することは困難である。そこで、第一原理分子動力学法を用いて計算機上に界面欠陥構造を生成し、エネルギー準位や荷電状態等の特性を算出することで、界面欠陥の物理構造とその電気特性との関連性を明らかにする。これにより SiC デバイスの電気特性を最大限に引き出せる物理的界面形成法の開発指針を得る。

２．利用の内容・結果：

計算機上に実デバイスを模擬出来るような界面欠陥構造を生成するためには、少なくとも 1000 原子程度の大きさの界面構造を用いないと、炭素空孔、シリコン空孔、シリコン-シリコン結合、炭素-炭素結合、炭素クラスタ構造等の様々な欠陥構造を再現できない。しかし、第一原理分子軌道計算には多大な計算時間が必要となるため、界面構造再現のための計算パラメータ探査には 1000 原子程度の大規模原子構造を用いるのではなく、数 100 原子程度の中規模原子構造を用いて十数ケースの計算を行い、大規模計算のためのパラメータ決定を行う必要がある。平成 17 年度においては、主に 300～400 原子程度の界面構造を用いて、実デバイスに見られるようなアモルファス SiO_2/SiC 界面構造を生成可能なパラメータの探査を行い、その結果に基づいて大規模原子構造での計算を開始した。

計算コードには第一原理分子動力学コードである Vienna ab-initio Simulation Package (VASP)を用いた。計算モデルでは初期状態として結晶 SiO_2/結晶 SiC を接合した構造を用い、3 次元周期境界条件によって全空間に拡大している。ただし SiO_2 層の上方には基板の SiC 層との相互作用を無視出来るに十分な真空層を取るようなスラブモデルを用いている。この原子構造に対して計算機上で加熱・急冷を行う事で結晶構造のアモルファス化を行っている。この時、SiC 基板構造は結晶構造を保つように原子を固定してあり、SiO_2 層と界面層のみ原子位置が変化するように制限を加えている。400 原子サイズの中規模原子構造を用いてアモルファス化に最適な加熱・急冷時のパラメータ探査を進めた結果、加熱時には SiO_2 層の終端を固定し、急冷時に開放とする事で 4000K と言う高い加熱条件においてもモデルの破壊を招かずにアモルファス化を進める事が可能となり計算時間の短縮が図れるようになった(図 1)。中規模原子構造を用いてのアモルファス界面構造の生成条件の導出と界面欠陥構造の生成に

おいては、界面におけるダングリング・ボンド(未結合手)を持たない急峻界面の生成に成功した。ただし、SiO_2層の中には未だ酸素の未結合手が残っており欠陥準位が観察された(図2)。

中規模原子構造を用いたパラメータ探査の結果を用いて 1000 原子サイズの原子構造から固定基板部分の一部を除いた 693 原子の大規模モデルを用いて、界面アモルファス構造の生成計算を開始した。パラメータ探索の結果から、界面での SiC 自由層は 2 層とし、4000K での加熱時における終端固定は最辺部の水素とシリコンのみ、冷却時 3,500K におけるアニーリング継続によって SiO_2層のアモルファス性の向上を行い、その後室温まで-1000K/ps の速度で冷却する条件で計算を進めている。平成 17 年度においては 4000K による加熱がほぼ終了する所まで計算が進んだ(図3)。平成18年度には冷却過程から計算を継続する予定である。

3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1. 宮下敦巳、大沼敏治、吉川正人、岩沢美佐子、中村智宣、土田秀一、
   “第一原理分子動力学シミュレーションによるアモルファス SiO_2/SiC 界面の生成”、
   応用物理学会「SiC 及び関連ワイドギャップ半導体研究会」第 14 回講演会（11 月 10 日～11 日、京都大)(2005).
2. 大沼敏治、宮下敦巳、岩沢美佐子、吉川正人、中村智宣、土田秀一、
   “第一原理計算による SiO_2/4H-SiC(0001)界面における熱酸化過程の動的シミュレーション”、
   応用物理学会「SiC 及び関連ワイドギャップ半導体研究会」第 14 回講演会（11 月 10 日～11 日、京都大)(2005).
3. A.Miyashita, T.Ohnuma, M.Yoshikawa, M.Iwasawa, T.Nakamura, H.Tsuchida,
   “Generation of amorphous SiO_2/SiC interface by the first-principles molecular dynamics simulation”,
   The First International Symposium on Development of Silicon-based Functional Materials, (21 Nov. 2005, Kiryu).
4. M. Maekawa, A. Kawasuso, M. Yoshikawa, A. Miyashita, R. Suzuki, T. Ohdaira,
   “Structure of SiO_2/4H-SiC interface probed by positron annihilation spectroscopy”,
   Phys.Rev.B 73 014111 (2006).
5. 宮下敦巳、大沼敏治、岩沢美佐子、吉川正人、土田秀一、
   “アモルファス SiO_2/SiC 界面構造の第一原理計算による生成”、
   春季第 53 回応用物理学関係連合講演会（3 月 22 日～26 日、武蔵工大)(2006)
6. 大沼敏治、宮下敦巳、岩沢美佐子、吉川正人、中村智宣、土田秀一、
   “SiO_2/4H-SiC(0001)界面における熱酸化過程の第一原理分子動力学シミュレーション”、
   春季第 53 回応用物理学関係連合講演会（3 月 22 日～26 日、武蔵工大)(2006)

4．今後の利用予定：

平成 18 年度においては、平成 17 年度中に計算終了しなかった大規模原子構造を用いたアモルファス SiO_2/SiC 界面構造生成計算を継続し、年度半ばで急峻界面生成が完了する。今後は、界面構造に各種の欠陥構造を埋め込み、欠陥構造と電子状態との関連性を導出する予定である。

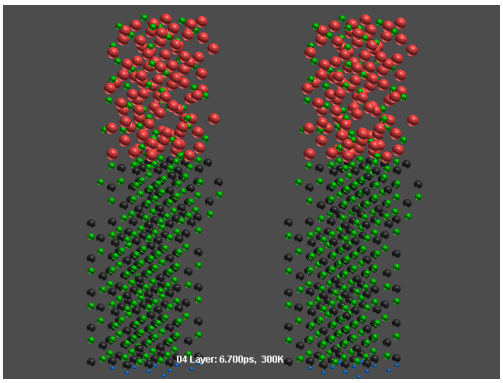


図１　中規模原子構造を用いた加熱・急冷計算後の原子配置(ステレオ画像)
(原子の種類 ＝ 緑：シリコン、黒：炭素、赤：酸素)

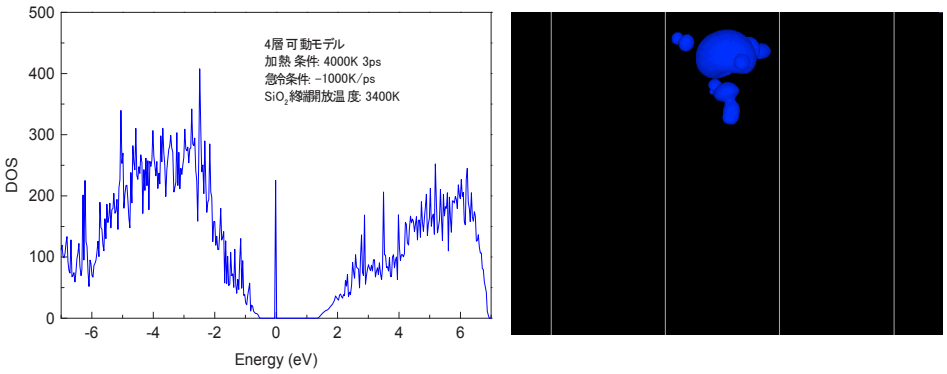


図２　中規模界面原子構造での状態密度分布(左)と欠陥準位電荷分布(右)

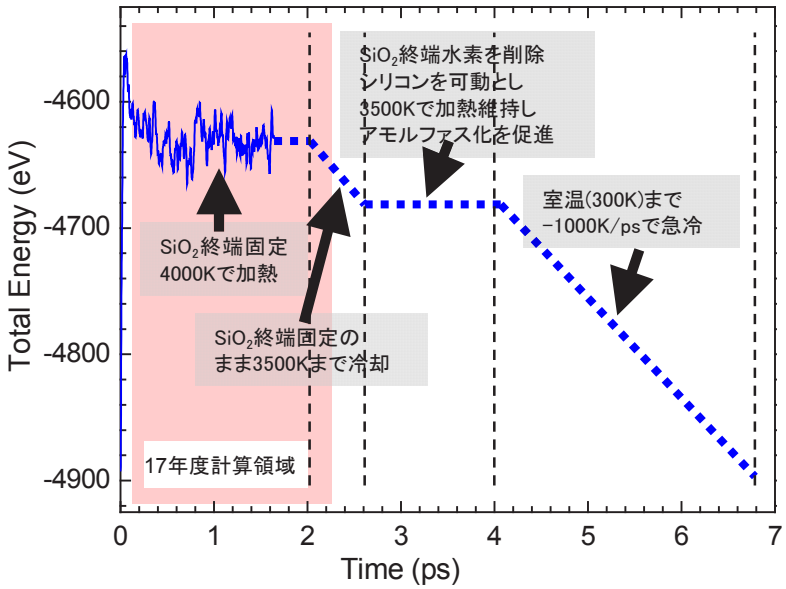


図３　大規模原子モデルを用いた加熱・急冷計算時の全エネルギー変化

4.4.8 3D particle-in-cell simulation of the electron self-injection for the laser-plasma cathode

Alexei Zhidkov
CRIEPI, Yokosuka

１．利用の概要（要約）: Nowadays, the developing injection and acceleration schemes for fully optical electron accelerators based on the laser wake-field acceleration is a key part of new compact accelerator strategy. Based on the plasma irradiated by short laser pulses, they constitute a new class of accelerators that are much more compact and considerably chipper than common sources of energetic particles. This class of accelerators allows generation of femtosecond electron beams with practically high total charge and eliminates the jitter problems. Accelerators based on the plasma cathode get rid of the problem of beam transport as well. The problems of beam charge, its stability, and low emittance have been solved by the manipulation of the pre-plasma.

２．利用の内容・結果： I have been studying numerically through 3D and 2D particle-in-cell simulations the mechanisms of injection of electrons for their further acceleration by plasma waves generated by the laser pulse in gas jets. Injection is a crucial part of plasma cathode technique. Since any conventional electron beams are too long and too broad, they cannot be used for injection purpose. A short, dense and high charge electron bunch must be formed in gas jet simultaneously with the plasma wake filed. The energy of these electrons for the efficient acceleration has to exceed a critical one, $\gamma_{cr}=mc^2(N_{cr}/N_e)^{1/2}$, where $N_{cr}=1.7\text{x}10^{21}$ cm^{-3} is the critical density for TiSph laser with the wavelength $\lambda=0.8$ μm. For atmospheric density $N_e=3\text{x}10^{19}$ cm^{-3}, $\varepsilon_{gr}\sim3.8$ MeV. However, these electrons with the energy higher than the critical one have to possess the velocity v exceeding the phase velocity of the plasma waves at the point they appear. Only than, such electrons can be efficiently accelerated. Most of electrons oscillate in plasma wave with its ‘hydrodynamics’ velocity u [this oscillation can be relativistic] and cannot be accelerated. The process of appearing of a group of electrons in a wave with v not equal to the velocity u is the wave-breaking process. Generally wave-breaking is a process of destroying of the regular hydrodynamic oscillations- generation of multi-fluid motion- thermalization. Usually we determine two processes of thermalization that are characteristic for laser-plasma interaction: longitudinal and transverse wave-breakings. Characteristics of these processes have to be studied to provide the best scheme for injection: highest charge, shortest duration of the electron bunch, smallest emittance and energy spread. If succeed we expect to generate high energy, high quality beam with further acceleration in a plasma channel- capillary discharge. The total charge depends on the laser intensity in the vicinity of the self-injection:

$$N = g(\gamma_{gr}) N_e \lambda_{pl} SM / 2$$

where the weight depends on the laser intensity and the plasma density in the vicinity

$$g(\gamma_{gr}) \propto \exp\left(-\Omega / (IN_e)^{3/2}\right)$$

of the injection

Through manipulation by these parameters one can manage the parameters of the electron beams.

In **Fig. 1** the dependence of the total electron charge on the laser intensity in the vicinity of the injection is given,

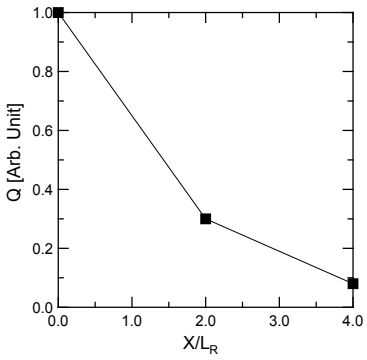


Fig.1 Dependence of the total charge of the injected electrons on the focus position.

With use of magnetic field we could suppressed this effect in the plasma cavity produced by the laser pre-pulse as a result we decreased the emittance of the electrons, improved stability of the beam, and increased the beam charge up to 1.5 nC per shot.

I have studied the effect of plasma channel on the self-injection providing the monoenergetic electron acceleration. **Fig. 2 a,b** show the plasma field and a typical distribution of the accelerated electrons in a plasma channel.

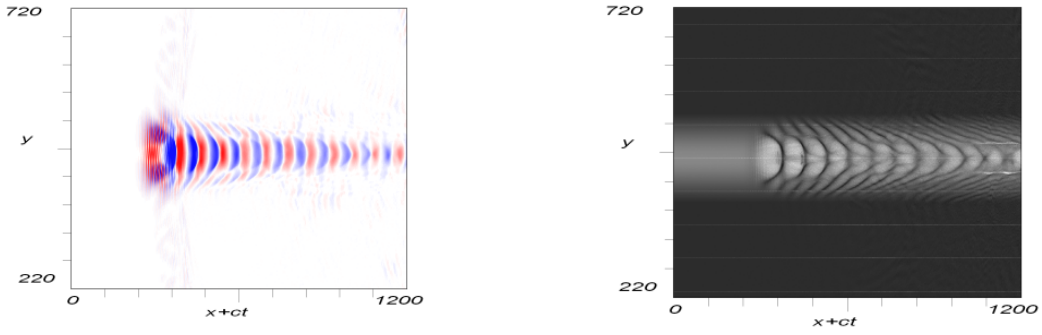


Fig.2a Spatial distribution of plasma field and electron density in a plasma channel with with density $Nmax_e$=4x10^{19} and $N_e$min=1x10^{19} cm^{-3}.

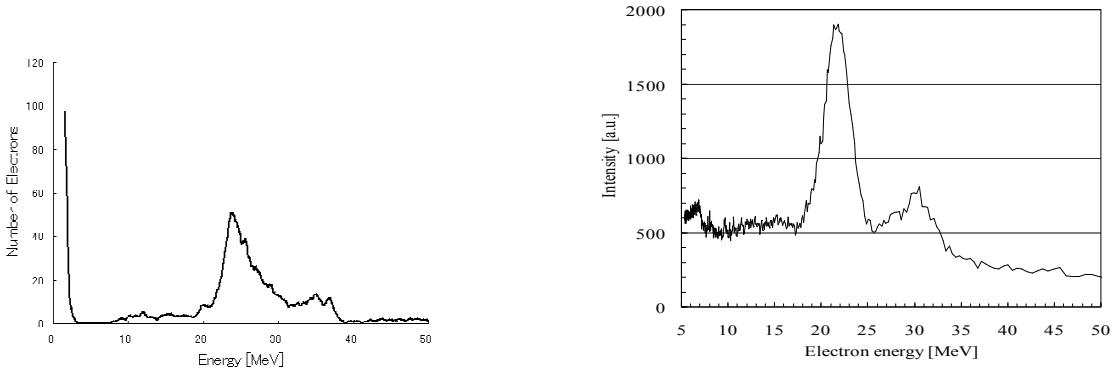


Fig.2b Energy distribution of accelelrated electrons in a plasma channel with with density N_{maxe}=4x10^{19} and N_{emin}=1x10^{19} cm^{-3}. Theory and experiment with 17 TW 40 fs laser pulse.

I have also proceeded with the 3D simulation of the electron acceleration process. In Fig. 3-5 the electron distributions in various cross-sections are given.

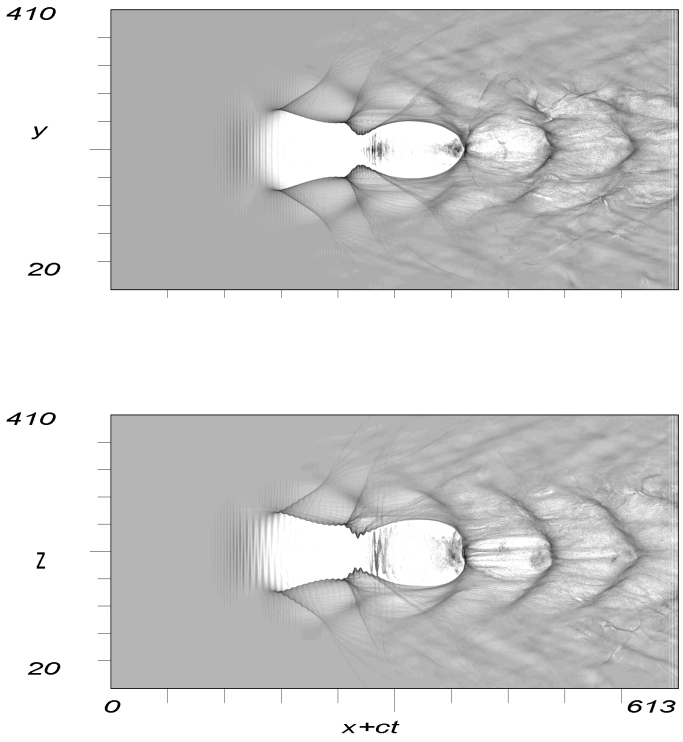


Fig.3 Spatial distribution of accelerated electrons in x-y and x-z planes.

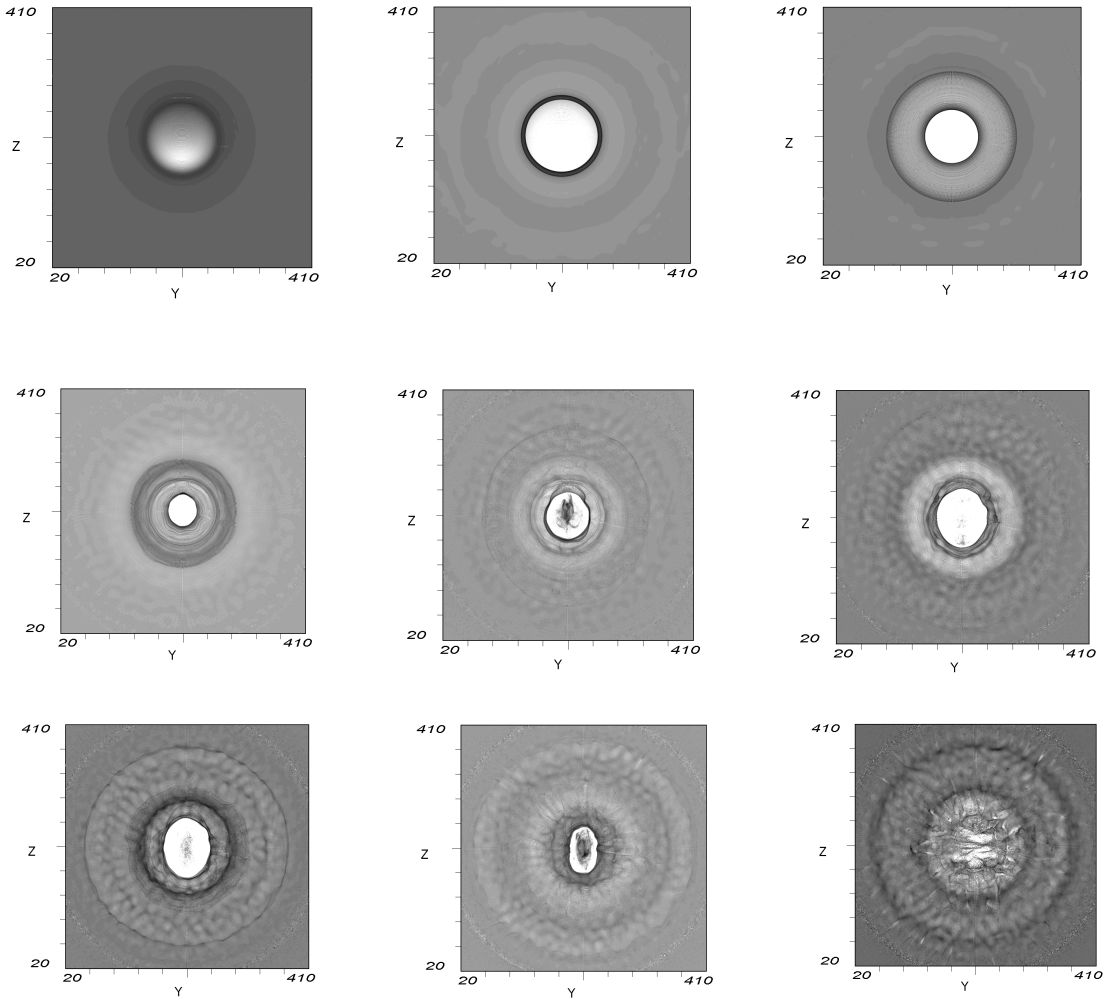


Fig.4 Transverse spatial distribution of accelerated electrons in 3D PIC in plasma.

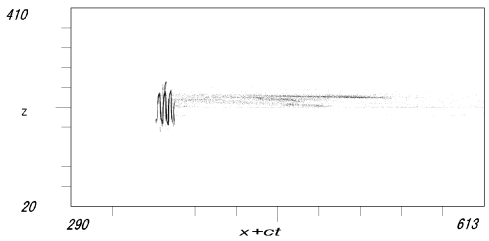


Fig.5 Structure of spatial distribution of accelerated electrons with high energy in 3D PIC in plasma.

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）Several presentations have been made including the Laser-Beam Interaction and Laser and Particle Accelelrators, December 12-16 Taipei, Taiwan

List of publication in 2005

１． T. Hosokai, K. Kinoshita, A. Zhidkov *et al.*, “Observation of strong correclation between quasimonoenergetic beam generation by laser wakefield and laser guiding inside a preplasma

cavitychannel", **Phys. Rev. E 73**, 036407 (2006)

2. T. Ohkubo, A. Zhidkov, T. Hosokai, K. Kinoshita, M. Uesaka, "Effect of density gradient on short-bunch injection by wave breaking in the laser wake field accelelration" **Physics of Plasmas 13** (2006)
3. T. Ohkubo, S.V. Bulanov, A. Zhidkov, et all, "Wave-breaking injection of electrons to laser wake field in plasma channels" **Phys. Rev. E** (2006) submitted
4. T. Hosokai, K. Kinoshita, A. Zhidkov *et al*., "Effect of external static magnetic field on emittance and total charge of electron beams generated by the laser wake field acceleration" **Phys. Rev. Letters**, (2006) submitted
5. A. Maekawa, A. Zhidkov, K. Nemoto *et al*., Intensity and density effects on self-injection scheme in a plasma channel" **Phys. Rev**. E (2006) submitted

４．今後の利用予定：With newly developed 3D PIC code and our better understanding of wave-breaking processes I expect to find the best condition for the generation of mono-energetic electron beams in two- stage- plasma accelerator exploiting high density femtosecond injector and lower density capillary discharge accelerator. In conclusion, new compact electron beams and x-ray sources will become accessible in industrial level in a few years. Presently, two stage acceleration scheme, based on the allows the generation of fs electron bunches with their energy spread <10% with the total charge Q~1nC and <1% energy spread with Q~50 pC. In the tightly focused pulse set up the adverse electrons can be eliminated. Use of plasma channels gives the quasi-mono-energetic beams in the first acceleration stage. However, the jitter problem has yet to be understood. The total charge may be not high.

Relativistic injection of plasma electrons allows one-stage mono-energetic beam (few % energy spread) generation with 200 TW laser pulse. No jitter problem. However, this regime is abundant with multi-MeV adverse electrons.. Besides, electrons with their energy over 100 MeV may be not applicable to the pump-probe measurements.

4.4.9 相対論的高強度レーザーとプラズマとの相互作用シミュレーションならびに光量子実験の理論的支援　ーレーザー航跡場電子加速ー

Relativistically strong laser-plasma interaction simulation and theoretical support for experiments at APR center.

Sergei V. Bulanov
レーザー電子加速研究グループ

１．利用の概要（要約）：

We investigated various regimes of laser wake-field acceleration of electrons with the help of Particle-in-Cell (PIC) simulations. We developed the theory of the attosecond pulse generation during the interaction of a short relativistically strong laser pulse with a thin overdense plasma slab. We performed preliminary calculation for the “Flying mirror” experiment.

２．利用の内容・結果：

We use the supercomputer HP Alpha Server SC ES40 (720 CPU) at JAEA-Kansai and the supercomputer SGI Altix 3900 Bx2 (2048 CPU) at JAEA-Tokai. The use the code REMP (Relativistic Electro-Magnetic Particle-mesh code), which is massively-parallel and fully vectorized and is designed to work in 2D and 3D geometries. In 2005 we performed the following investigations.

1). We analyzed basic properties of the electron acceleration injected due to the wave breaking into the first period of the wake plasma wave left in an underdense plasma behind the ultra short laser pulse. The transverse breaking regime accounts for the finite size electron bunch formation. It has been found that in the first wake period there are two separatrices (they are the inner and the outer separatrix) that separate transient and trapped particle trajectories in the phase plane. The electrons moving along the trajectories confined in between the inner and the outer separatrix have their velocity greater than the group velocity of the laser pulse. The energy spectrum of the electrons at the top of the separatrix has a typical inverse square root form with a maximum and a sharp cut at the maximal energy. We called this energy spectrum the “quasi-monoenergetic spectrum”, because the actual energy width is of the same order as the maximal energy. Transverse oscillations of the electrons have slowly varying amplitude and frequency. Their magnitude determines the transverse emittance of fast electrons. It is shown that for laser pulse lengths above the plasma wake wavelength the wake field accelerated electrons are further accelerated by the electromagnetic wave.

2). With the help of PIC simulations we develop the theory of the attosecond pulse

generation during the interaction of a short relativistic-irradiance laser pulse with a thin overdense plasma slab. The nonlinear electric current caused by the electron motion at relativistic velocity generates the high-order harmonics of the incident radiation. These harmonics are phase-locked and can produce pulses with attosecond duration after spectral filtering. We find conditions for the most efficient generation of a single attosecond pulse. We also find a very efficient regime of attosecond pulse train generation without spectral filtering.

3). We performed preliminary calculation for the "Flying mirror" experiment. We found that the region of parameters favorable for the "Flying mirror" experiment overlaps with the region necessary for good generation of electron bunches. With the available laser, the self-focusing regime is necessary for the successful "Flying mirror" experiment. In the favorable region of parameters, the frequency upshift is visible at all angles from 0 to 90°. The main part of the energy is emitted in the angle inversely proportional to square root of the plasma density.

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1. A. Yamazaki, H. Kotaki, I. Daito, M. Kando, S. V. Bulanov, T. Zh. Esirkepov, S. Kondo, S. Kanazawa, T. Homma, K. Nakajima, Y. Oishi, T. Nayuki, T. Fujii, K. Nemoto. Quasi-monoenergetic electron beam generation during laser pulse interaction with very low density plasmas. Physics of Plasmas 12, 093101 (2005).
2. Sergei V. Bulanov, Mitsuru Yamagiwa, Timur Zh. Esirkepov, James K. Koga, Masaki Kando, Yutaka Ueshima, Kanji Saito, Daisuke Wakabayashi. Spectral and dynamical features of the electron bunch accelerated by a short-pulse high intensity laser in an underdense plasma. Physics of Plasmas 12, 073103 (2005).
3. Alexander S. Pirozhkov, Sergei V. Bulanov, Timur Zh. Esirkepov, Michiaki Mori, Akito Sagisaka, and Hiroyuki Daido. Attosecond pulse generation in the relativistic regime of the laser-foil interaction: The sliding mirror model. Physics of Plasmas 13, 013107 (2006).
4. Alexander S. Pirozhkov, Sergei V. Bulanov, Timur Zh. Esirkepov, Michiaki Mori, Akito Sagisaka, Hiroyuki Daido. Generation of high-energy attosecond pulses by the relativistic-irradiance short laser pulse interacting with a thin foil. Physics Letters A 349, 256–263 (2006).

４．今後の利用予定：

In the future we plan to continue PIC simulations of intense laser-plasma interactions with particular stress on laser-driven electron acceleration and flying mirror experiment.

4.4.10 相対論的高強度レーザーとプラズマとの相互作用シミュレーションならびに光量子実験の理論的支援　－レーザー駆動イオン加速－

Simulation of the relativistically strong laser interaction with plasma and theoretical support for experiments at APR center.

Timur Esirkepov
光量子シミュレーション研究グループ

１．利用の概要（要約）：

Using multi-parametric two-dimensional (2D) Particle-in-Cell (PIC) simulations, we investigated the scaling laws of the intense laser-driven ion acceleration and we developed the theory of the attosecond pulse generation during the interaction of a short relativistically strong laser pulse with a thin overdense plasma slab.

２．利用の内容・結果：

We use the supercomputer HP Alpha Server SC ES40 (720 CPU) at JAEA-Kansai and the supercomputer SGI Altix 3900 Bx2 (2048 CPU) at JAEA-Tokai. The use the code REMP (Relativistic Electro-Magnetic Particle-mesh code), which is massively-parallel and fully vectorized and is designed to work in 2D and 3D geometries. In 2005 we performed the following investigations.

1). We carried out multi-parametric 2D PIC simulations of the laser-driven ion acceleration during the interaction of relativistically strong laser pulse with plasma slab. The aim was to define the regions of the laser and plasma parameters in which the ion energy is maximum, the ion energy spread is minimum and laser-to-ion energy transformation efficiency is significant. In particular, we were looking for the necessary conditions to get ions with 200–300 MeV per nucleon, which is necessary for hadron therapy. We used the double-layer target scheme as a method which allows us to obtain quasi-monoenergetic ion beam. We found that the most critical laser and plasma parameters are the laser amplitude $a=eE/m_e\omega c$, target plasma density n_e and target thickness l. The laser pulse intensity varied in the range $I=10^{20}$–10^{22} $W/cm^2\times\mu\mathrm{m}^2$, the target density n_e – from 1 n_{cr} to 100 n_{cr}, the target thickness – from 0.1λ to 5λ, where n_{cr} is plasma critical density, λ is wavelength of laser radiation. We found that the quickest energy growth rate and thus the largest final energy occurs at certain area density $\sigma = n_e l$, where the optimum σ depends on laser pulse amplitude a quasi-linearly. At each fixed maximum ion energy E_{max} there is minimum amplitude a which gives this E_{max}. The corresponding area density σ correlates with a good absorption and divides the (l, n_e) plane at fixed a into two parts: for smaller σ — the pulse transmission is dominant, for greater σ — the pulse is mostly reflected from the target. The acceleration mechanism at small thicknesses l and large densities n_e: laser pulse sweeps almost all

electrons away, the resulting electrostatic field accelerates ions. At large thicknesses l and small densities n_e: laser pulse shifts and heats electrons, generates strong quasi-static magnetic fields inside the plasma and corresponding magnetic pressure causes ion acceleration. We found that in the case of thin targets and optimal laser pulse duration, the ion maximum energy scales as the square root of the laser pulse power. We demonstrated that when the radiation pressure of the laser field becomes dominant, the ion maximum energy becomes proportional to the laser pulse energy.

2). With the help of PIC simulations we develop the theory of the attosecond pulse generation during the interaction of a short relativistic-irradiance laser pulse with a thin overdense plasma slab. The nonlinear electric current caused by the electron motion at relativistic velocity generates the high-order harmonics of the incident radiation. These harmonics are phase-locked and can produce pulses with attosecond duration after spectral filtering. We find conditions for the most efficient generation of a single attosecond pulse. We also find a very efficient regime of attosecond pulse train generation without spectral filtering.

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

5. T. Esirkepov, M. Yamagiwa, and T. Tajima. Laser Ion-Acceleration Scaling Laws Seen in Multiparametric Particle-in-Cell Simulations. Physical Review Letters 96, 105001 (2006).
6. Alexander S. Pirozhkov, Sergei V. Bulanov, Timur Zh. Esirkepov, Michiaki Mori, Akito Sagisaka, and Hiroyuki Daido. Attosecond pulse generation in the relativistic regime of the laser-foil interaction: The sliding mirror model. Physics of Plasmas 13, 013107 (2006).
7. Alexander S. Pirozhkov, Sergei V. Bulanov, Timur Zh. Esirkepov, Michiaki Mori, Akito Sagisaka, Hiroyuki Daido. Generation of high-energy attosecond pulses by the relativistic-irradiance short laser pulse interacting with a thin foil. Physics Letters A 349, 256–263 (2006).

４．今後の利用予定：

In the future we plan to continue multi-parametric PIC simulations of intense laser-plasma interactions with particular stress on laser-driven particle acceleration.

4.4.11 高強度極短パルスレーザーと中性ガスの相互作用の研究

High Intensity Ultra-short pulse laser and neutral gas interaction research

James Koga
光量子シミュレーション研究グループ

１．利用の概要（要約）：

Since the advent of high power short pulse lasers, there has been a renewed interest in the propagation dynamics of high power laser pulses in neutral gases. In our laboratory super-continuum generation with a total blue-shift of a laser pulse with initial focusing, which is fixed and independent of the gas has been observed. However, the propagation dynamics and light shift mechanism are not clearly understood. We directly solve Maxwell's equations and automatically include higher order gas polarization. We study the generation of long plasma channel formation by high irradiance laser pulses propagating in neutral gases and determine the physical mechanisms by which super-continuum radiation occurs and how it is influenced by initial focusing of the laser pulse.

２．利用の内容・結果：

Super-continuum radiation has been observed in experiments involving weakly focused high power lasers propagating in neutral gases and have been reproduced in simulations using the envelope and the unidirectional optical pulse propagation approximation. In order to study these types of problems with a minimal amount of approximation we explicitly solve in two dimensions Maxwell's equations, the background neutral gas polarization, and optical field ionization by the laser pulse. This requires much higher resolution in space and time which is overcome by using massively parallel computers. Figure 1 shows the laser pulse after it has propagated 2.4 mm in the gas with a) no initial focusing and b) initial focusing. The simulation box is moving to the right with the laser pulse at nearly the speed of light. The laser pulse in the initial focusing case is spreading out in the y direction faster than in the non-focusing case. For the first time we have simulated the effect of the initial focusing on the change in the laser pulse spectrum Figure 2 shows power spectra of the laser pulse taken

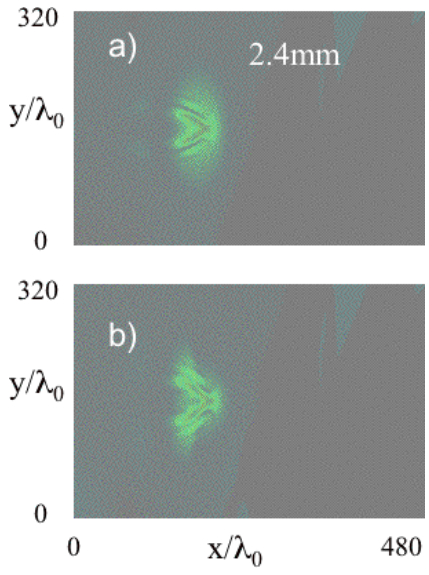


Figure 1. Laser propagation in neutral gas. a) No initial focusing and b) initial focusing

at 2.4 mm propagation distance for no initial focusing (red line) and initial focusing (blue line). With initial focusing the spectrum of the laser pulse is shifted towards higher wave numbers, k/k_0, than in the no initial focusing case. This indicates that initial focusing plays a role in the spectral shifting of the laser pulse. This is allows the beginning of the confirmation of experimental results.

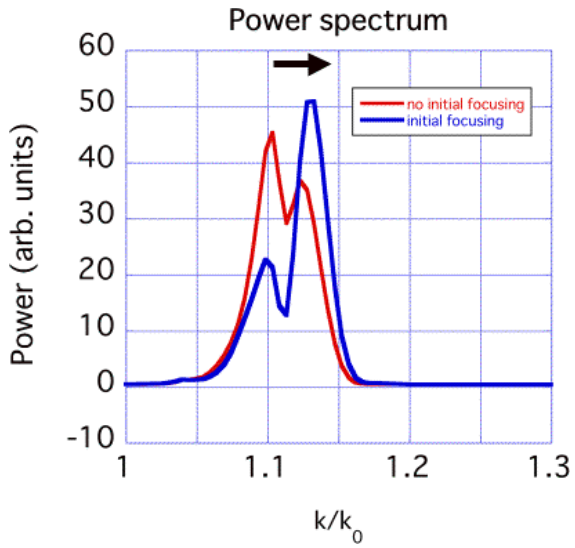


Figure 2 The power spectra of the laser pulses with no initial focusing (red line) and initial focusing (blue line).

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

４．今後の利用予定：

Perform the same type of simulations with various initial focusing to reproduce experimental results, which includes fixed blue-shifting of the laser pulse. Start going to three-dimensional simulations.

4.4.12 N_2 分子の enhanced ionization の第一原理計算

First-principle calculation for enhanced ionization of N_2 molecule

乙部　智仁

光量子シミュレーション研究グループ

１．利用の概要（要約）：

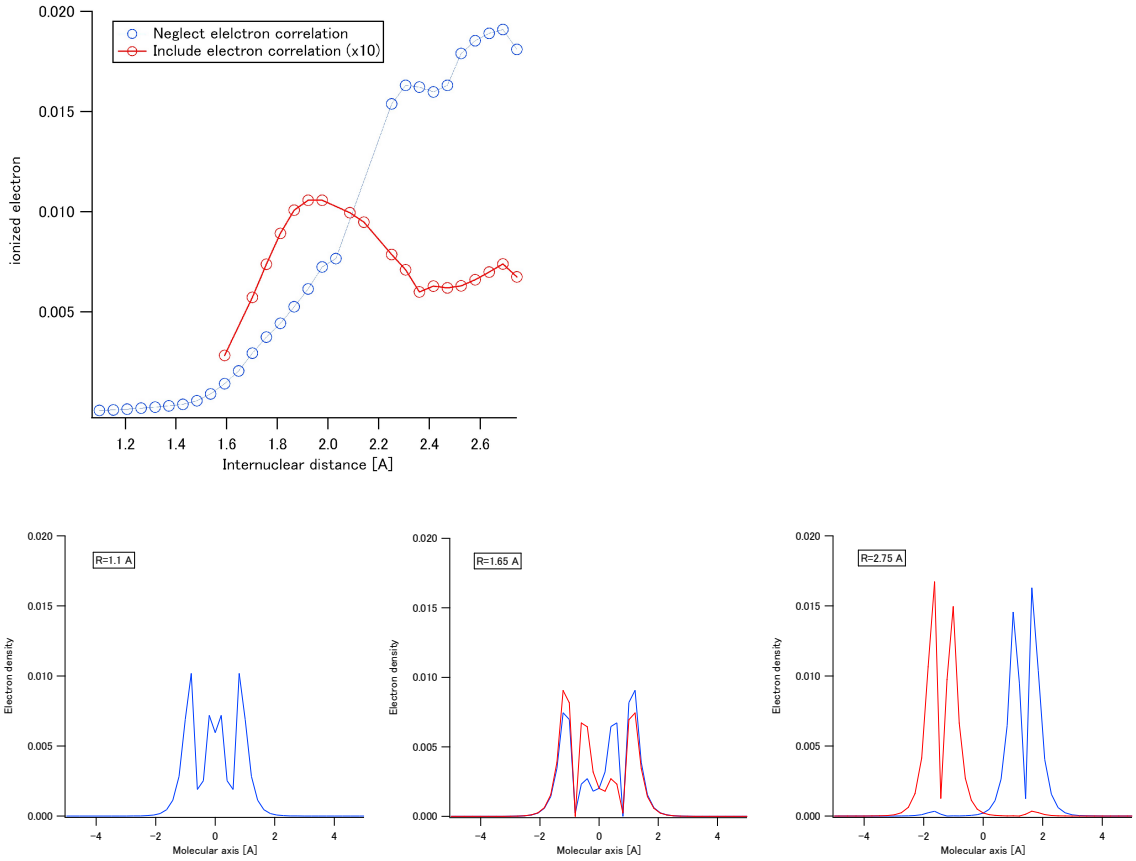
SC/ES40 システムを使用し、N2 分子のレーザー場によるイオン化率の核間距離依存性を計算した。分子のイオン化過程や分子コントロールの可能性を理解する上で核間距離が大きくなって起こる enhanced ionization は非常に重要な概念である。しかし、これまで量子的な計算は H2＋分子の計算などでしか成されていない。多電子分子では電子による遮蔽効果によりイオン化は大きく変更を受ける。多電子効果を含んだ計算を行い、多電子分子の enhanced ionization を議論するには電子相関を含む時間依存密度汎関数法（TDDFT）による計算が有用である。

２．利用の内容・結果：

図１．に N2 分子のイオン化数を核間距離の関数として示した。レーザーはパルス幅 8fs、ピーク強度を $4x10^{13}$ W/cm^2 とし、レーザー通過後の減少した電子数をカウントした。多電子効果を確認する為に電子相関を無視した計算を青で示した。比較のため、電子相関を含んだ計算値を 10 倍にした。図からわかるようにイオン化率のピークは遮蔽効果により大きく変化する。電子相関を無視した場合は約 2.6A 付近でピークを持ち、これはこれまでの 1 電子近似の計算の予測と一致する結果になっている。これは電子相関を無視した TDDFT が 1 電子近似に対応していることを反映している。電子相関による遮蔽効果をとり入れることでイオン化率は大きく抑制され、enhanced ionization が起こりにくくなっていることが分かった。これは遮蔽効果による分子内部のポテンシャル障壁の変化が小さくなるためであり、さらに enhanced ionization が起きる核距離が伸びているものと思われる。

図２．に核間距離が 1.1A、1.85A、2.75A での分子軸方向の最外殻分子軌道（HOMO）の電子密度を示した。青はスピンのアップ、赤はスピンのダウンの電子を表している。イオン化率が最も大きくなる 1.85A 付近で、スピンの違いによる電子分布の変化が起きてきている。電子分布は片方の原子に偏り始めているが依然 2 原子に跨って分布しているため、イオン化ポテンシャル及び励起エネルギーの低下を起こしている。一方核間距離が 2.75A になると電子は片方の原子に局在するようになりイオン化ポテンシャルと励起エネルギーは再び大きくなる。これは分子が 1 つの 2 原子分子的構成から２つの原子へと変わっていく境界でイオン化率が大きくなっていることを示している。このような領域ではイオン化ポテンシャル、励起エネルギーの低下とそれに伴う分極率の増大がイオン化率に影響を及ぼし最もイオン化率が高くなるものと思われる。

このような結果から分子のイオン化率は enhanced ionization が起きる前に分子的構造が崩れ始める核間距離で大きくなる事がわかった。これは既存の静的 DFT 等量子化学計算からイオン化率のピークの予測が可能となることが期待できる。



3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

国際会議　「International Symposium on Ultrafast Intense Laser Science」

平成 18 年度　日本物理学会春季大会

2005 年　分子構造討論会

4．今後の利用予定：

クラスターのイオン化過程の第一原理計算

4.4.13 有機分子のトンネルイオン化率の第一原理計算

First-principle calculations for tunnel ionization rate of organic molecules

乙部　智仁

光量子シミュレーション研究グループ

１．利用の概要（要約）：

大強度レーザーと原子分子の相互作用を考える上で重要なのはイオン化過程を十分に理解するということである。これまで原子や 2 原子分子については多くの研究がなされそのイオン化特性がよく分かってきた。しかし有機分子等の更に複雑な系のイオン化はまだ十分な理解に至っていない。

分子のレーザー場中でのイオン化過程は様々な可能性がある。その中でもトンネルイオン化過程は非常に重要な過程である。本研究では有機分子、特に C_2H_2 C_2H_4 C_6H_6 の静電場中でのトンネルイオン化率を密度汎関数法に基づき第一原理的に計算を行った。この計算は多電子による遮蔽効果、分子軌道の特性、静電場中での電子の束縛エネルギー等イオン化率を計算するために必要な効果が全て自動的に入っている初めての計算法である。

イオン化を記述するには非常に大きな空間が必要となる為、大規模計算機は必要である。本計算では SC/ES40 システムを使用することで計算が可能となった。

２．利用の内容・結果：

これまでの 02 分子等の研究から分子のイオン化においては分子軌道と電場、分子軸等の関係がイオン化率に非常に影響を及ぼすことが分かっている。図１、図２に C2H2 $C2H_4$ のトンネルイオン化率の角度依存性を示した。図１は C_2H_2 の分子軸と電場の角度とイオン化率である。分子軸方向に電場をかけた方がポテンシャルバリアが大きく下げられるのにも関らずイオン化率は分子軸に対して垂直に電場をかけた場合のほうが大きい。これは HOMO (highest occupied molecular orbital) がπ軌道であるため、電子密度が分子軸上でノードを持つことに起因する。図２(1)は C_2H_4 の分子軸と電場の角度を分子面内で変化させた場合のイオン化率、(2)は分子面と垂直な方向に変化させた場合のイオン化率の変化である。図２(1)から、電場と分子軸は 45 度程度の角度を持った時イオン化しやすい事が分かる。これはこの方向に H 原子があり、よりポテンシャルバリアが低く押し下げられることを反映したものと思われる。一方図 2(2)では C_2H_2 と同様にπ軌道の特性により分子面に対して 90 度の角度で最もイオン化率が大きくなる。図２(1)(2)から C_2H_4 では分子面に垂直方向に電場がかかったときが最もイオン化しやすくなることが分かった。

図３、４、５、はそれぞれ C_2H_2 C_2H_4 C_6H_6 のイオン化率を電場強度を変えて計算したものである。青は多電子による遮蔽効果を無視した計算である。電場は最もイオン化率が大きくなる分子面または分子軸に対して垂直方向とした。全ての場合でイオン化率は電子の遮蔽効果により 1/2 以下に抑制されることが分かった。

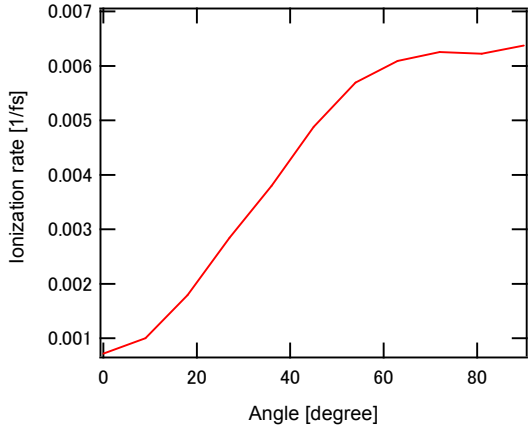


図１：C2H2 のイオン化率
分子軸と電場の角度依存性。π電子は
分子軸上に存在しないためイオン化しやすい
はずの 0 度方向にはイオン化しにくい。

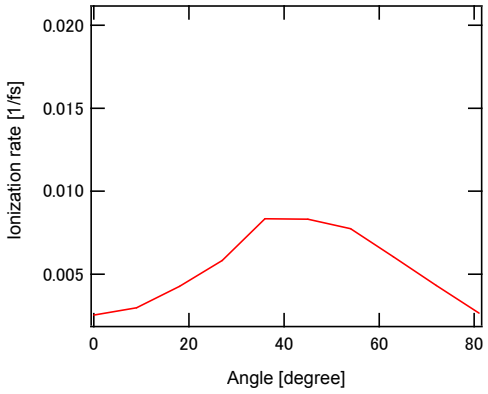
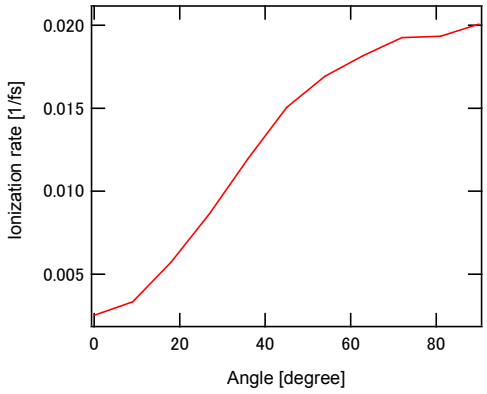


図２(1)：C2H4 のイオン化率。分子面内での
分子軸と電場の角度依存性



(2)：分子軸を含み、分子面と垂直方向
の面内での分子軸と電場の角度依存性

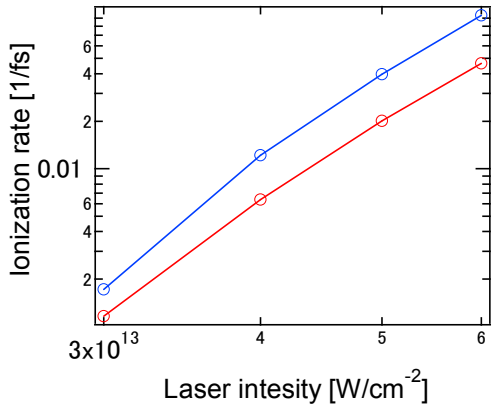


図３：C_2H_2 のイオン化率のレーザー強度
依存性。青は電子による遮蔽効果を
無視した計算。

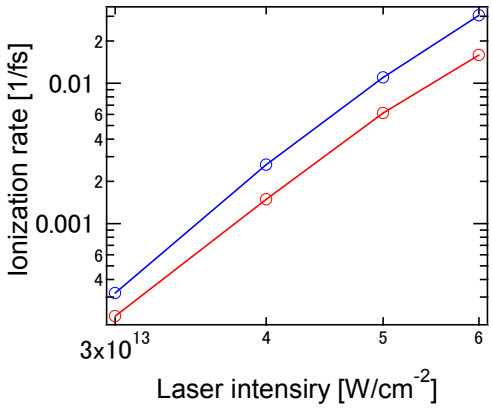


図４：C_2H_4 のイオン化率のレーザー強度依存性

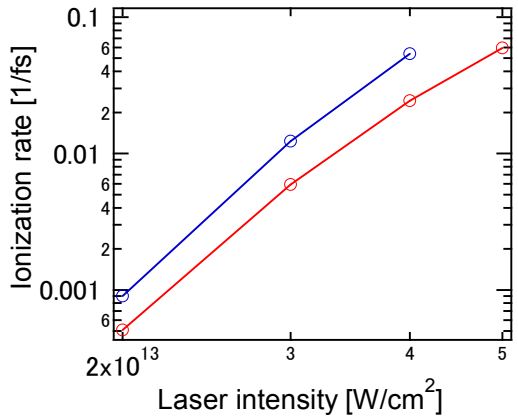


図５：C_6H_6のイオン化率のレーザー強度依存性

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

LPHYS'05 「First-principle calculation for ionization of large molecules」

４．今後の利用予定：

有機分子よりさらに大きな系としてクラスターのイオン化過程の計算を行う。特に希ガスクラスターでは内部イオン化によるイオン化の促進機構がどのように影響を及ぼしているのかを解明していく予定である。

4.4.14 大強度レーザー場中にある透明素材の第一原理計算

First-principle calculation for the electron dynamics of transparent material under the intense laser field

乙部　智仁
光量子シミュレーション研究グループ

１．利用の概要（要約）：

レーザーによる物質加工や物質制御に於いて重要となってくるのは電子の励起過程とそれに伴う物質の光学特性の変化である。本研究は透明固体（特にダイアモンド）と大強度レーザーの相互作用を時間依存密度汎関数法（TDDFT）を実空間実時間法で計算することで解明することを目的としている。固体中電子の非線形な応答を第一原理的手法で計算した例はまだなく、初めての試みである。固体電子の波動関数はブロッホ関数で表され、位相空間（K 点）と実空間の両方の波動関数をシミュレートしなくてはならず非常に大規模な計算である。

２．利用の内容・結果：

本計算は主に Altix3700x2 により行った。計算対象とするダイアモンドの単位胞には炭素原子が 8 個あり 32 個の電子が存在する。この単位胞中のポテンシャルおよび波動関数を 3 次元メッシュ上に離散化し、高次差分法により Khon-Sham 方程式及び時間依存 Khon-Sham 方程式を解く。Khon-Sham 方程式は一般的に

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V_{ion}(\vec{r})+V_H(\vec{r})+V_{xc}[\rho(\vec{r})]\right)\phi(\vec{r})=\varepsilon\phi(\vec{r})$$

となる。ここで$V_H(\vec{r})$はハートリーポテンシャル、$V_{xc}[\rho(\vec{r},t)]$は相関交換ポテンシャル、$\rho(\vec{r})$は電子密度である。波動関数はブロッホ関数で表されるため、実際の計算では

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla^2+2i\vec{k}\ \nabla-k^2\right)+V_{ion}(\vec{r})+V_H(\vec{r})+V_{xc}[\rho(\vec{r})]\right)u_{nk}(\vec{r})=\varepsilon_{nk}u_{nk}(\vec{r})$$

を解く。 k はブロッホ関数の位相因子である。この式を解くことで固体電子の基底状態を計算することができる。計算に於いてはメッシュ幅、位相のサンプリング数に対する結果の収束性を確認する。

外部電場中にある結晶中電子波動関数は電場により大きく動き電子流を形成する。この電子の流れはいずれ固体表面での電荷分布となる。この電荷分布により多電子系特有の現象である遮蔽効果が生まれる。電子ダイナミクスを考える上でこの遮蔽効果を再現することが重要である。本計算では外部電場と電子分布による誘起電場をベクトルポテンシャルの形で取り入れ、時間依存 Khon-Sham 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi_n(\vec{r},t)-\frac{e}{mi}(\vec{A}_{ext}+\vec{A}_{ind})\ \nabla\phi_n(\vec{r},t)+\frac{e^2}{2m}(\vec{A}_{ext}+\vec{A}_{ind})^2\phi_n(\vec{r},t)+\left(V_{ion}(\vec{r})+V_H(\vec{r})+V_{xc}[\rho(\vec{r},t)]\right)\phi_n(\vec{r},t)=i\frac{\partial\phi_n(\vec{r},t)}{\partial t}$$

の時間発展をテイラー展開することで計算する。

計算を Altix3700x2 で行う最初のステップとしてまず計算コードの並列化および最適化を行った。これにより、逐次コードであったプログラムを 512cpu で実行できるようにし、並列化効率も 80%以上を維持することができた。

次のステップとして基底状態のバンドギャップの収束値を得る為に様々なメッシュ幅と K 点サンプリング数で計算を行った。その結果メッシュ幅は最低でも 0.3 Å、K 点サンプリングは 4096 点必要なことを確認した。

次に、このように決定したパラメータでパルスレーザーとの相互作用を計算した。図１に一例としてピーク強度 5×10^{14} W/cm^2 、パルス半値幅 20fs のレーザー場と固体内の電場を示した。青がレーザー場、赤が誘起電場を含めた全電場である。レーザーの立ち上がりは電場が弱いため遮蔽効果によりレーザー電場が小さくなっていることが分かる。しかし電場が強くなるに従ってレーザーと内部電場の位相がずれていき最終的には内部の固有振動が外部電場より強くなってくる。これは励起電子が非常に多くなることで誘電崩壊が起き、応答が金属的になっていることの現われであると思われる。弱いレーザーではこのような振る舞いは起きない。図２．にレーザー通過後の結晶当たりのエネルギー吸収量のレーザー強度依存性示した。2×10^{14} W/cm^2 辺りから急激にエネルギー吸収量が収束している。2×10^{14} W/cm^2 Keldysh パラメータが約１であり、多光子吸収による励起とトンネルによる励起の境界といえる。このような定性的変化は励起過程の違いによる影響、誘電崩壊、メッシュなどの計算精度等様々な可能性があるため、これからさらに計算と解析が必要である。

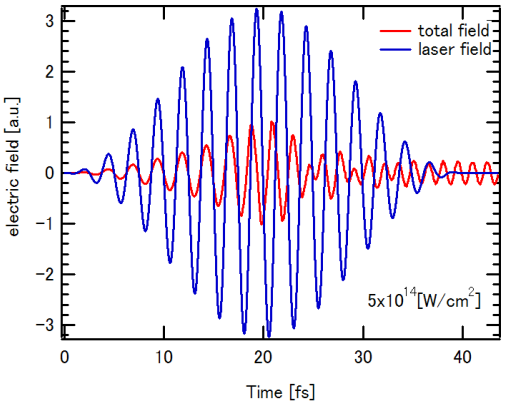


図１．レーザー場と結晶中の電場
誘電崩壊が起きることで固体
電子の応答が強くなっている

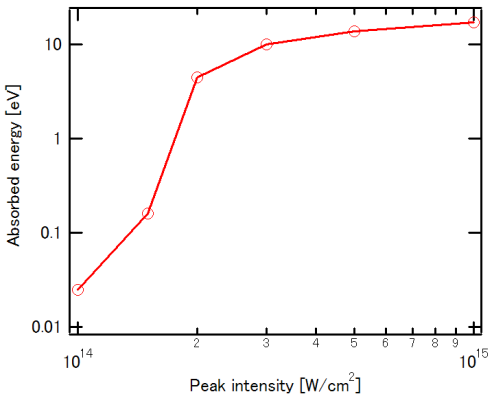


図２．エネルギー吸収量のレーザー強度依存性
2×10^{14} W/cm^2 辺りから急激にエネルギー
吸収量が収束している。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

平成 17 年物理学会春季大会

４．今後の利用予定：

① シミュレーションの計算精度を上げ、数値的誤差の評価を行う。
② 電子の応答を内部電場の周波数分解等の解析を行うことで詳細に調べる。
③ レーザー強度依存性、周波数依存性を調べる為に様々なレーザーパラメータでの計算
④ 電子密度のアニメーションの作成

4.4.15 高強度短パルスレーザーによるプラズマ層からの高エネルギー電子生成の密度依存性

Density dependence of high energy electron generation from a plasma layer with high-intensity short-pulse laser

山極　満

光量子シミュレーション研究グループ

１．利用の概要（要約）：

Two-dimensional particle-in-cell simulation of electron acceleration in an underdense plasma irradiated by high-intensity short-pulse laser is presented. The dependence of the electron energy on the plasma density is studied. For the laser intensity of 10^{20} W/cm^2, the highest energy is achieved for the density around 2 10^{19} cm^{-3}, where the laser pulse undergoes self-focusing and forms the cavity in the electron density. The maximum electron energy is around 200 MeV for the plasma layer length of 150 λ with λ being the laser wavelength.

２．利用の内容・結果：

We use a two-dimensional fully relativistic PIC simulation code which self-consistently solves Maxwell's equations along with both the particle motion of electrons and ions. The system size is 300λ in the x (laser propagation) direction and 288λ in the y (transverse) direction, where λ = 0.8 μ is the incident laser wave length. Hereafter x and y are normalized by λ. We assume that the initial laser pulse length is 20 fs and the diameter of the waist is 10 μ. The laser intensity is taken to be 10^{20} W/cm^2. The length of the plasma layer in the x direction is 150 λ. There exists a vacuum region on both sides of the plasma layer. The length of the left (right) vacuum region in the x direction is 50λ (100λ).

Figure 1 shows the total electron energy spectrum for the electron density of (a) $n_e = 10^{19}$ cm^{-3}, (b) $n_e = 1.5\ 10^{19}$ cm^{-3}, (c) $n_e = 2\ 10^{19}$ cm^{-3}, and (d) $n_e = 5\ 10^{19}$ cm^{-3} at τ = 400 when the laser pulse reaches the right boundary of the plasma layer. The highest energy around 200 MeV is achieved for $n_e = 2\ 10^{19}$ cm^{-3}. Figure 2 shows the electron density image plots in the x-y plane (115<x<165, 120<y<168) for the same densities as in Fig. 1 at τ = 200. We can see the cavity and electron bunch formation and the wakefield structure for cases (a) to (c), while in case of (d) $n_e = 5\ 10^{19}$ cm^{-3} the quality of the wakefield seems to be deteriorated. We also find that for case of (d) the laser field structure is significantly modified and the peak intensity is increased due to self-focusing.

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1) S.V. Bulanov, M. Yamagiwa, T.Zh. Esirkepov, J.K. Koga, M. Kando, Y. Ueshima, K. Saito, D. Wakabayashi

Spectral and dynamical features of the electron bunch accelerated by a short-pulse high intensity laser in an underdense plasma

Phys. Plasmas, Vol. 12, No. 7, 073103 (2005)
2) T. Esirkepov, S.V. Bulanov, M. Yamagiwa, T. Tajima
Electron, Positron, and Photon Wakefield Acceleration: Trapping, Wake Overtaking and Ponderomotive Acceleration
Physical Review Letters, Vol. 96, 014803 (2006)
3) M. Yamagiwa, S.V. Bulanov, T.Zh. Esirkepov, J. Koga, M. Kando, Y. Ueshima, K. Saito, D. Wakabayashi
Simulation of electron bunch generation by an ultrashort-pulse high-intensity laser-driven wakefield
Laser Physics, Vol. 16, No. 2, pp. 252-258 (2006)

４．今後の利用予定：

We will perform three-dimensional simulations of generation of high energy ions as well as electrons.

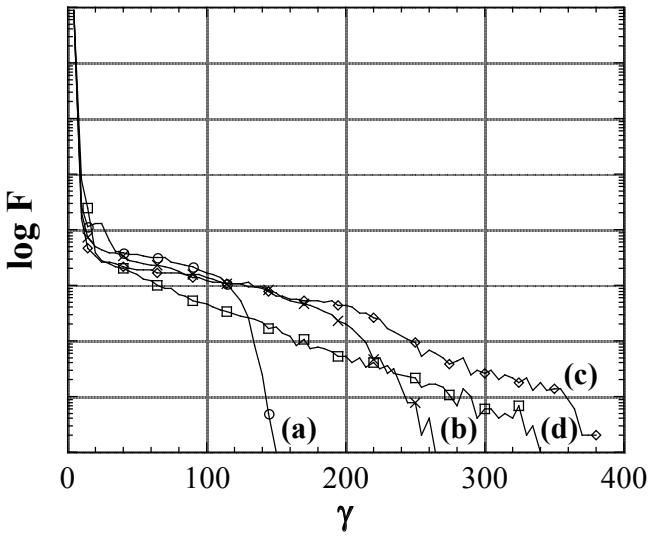


Fig. 1　Electron energy spectrum for (a) $n_e = 10^{19}$ cm^{-3}, (b) $n_e = 1.5\ 10^{19}$ cm^{-3}, (c) $n_e = 2\ 10^{19}$ cm^{-3}, and (d) $n_e = 5\ 10^{19}$ cm^{-3} at $\tau = 400$.

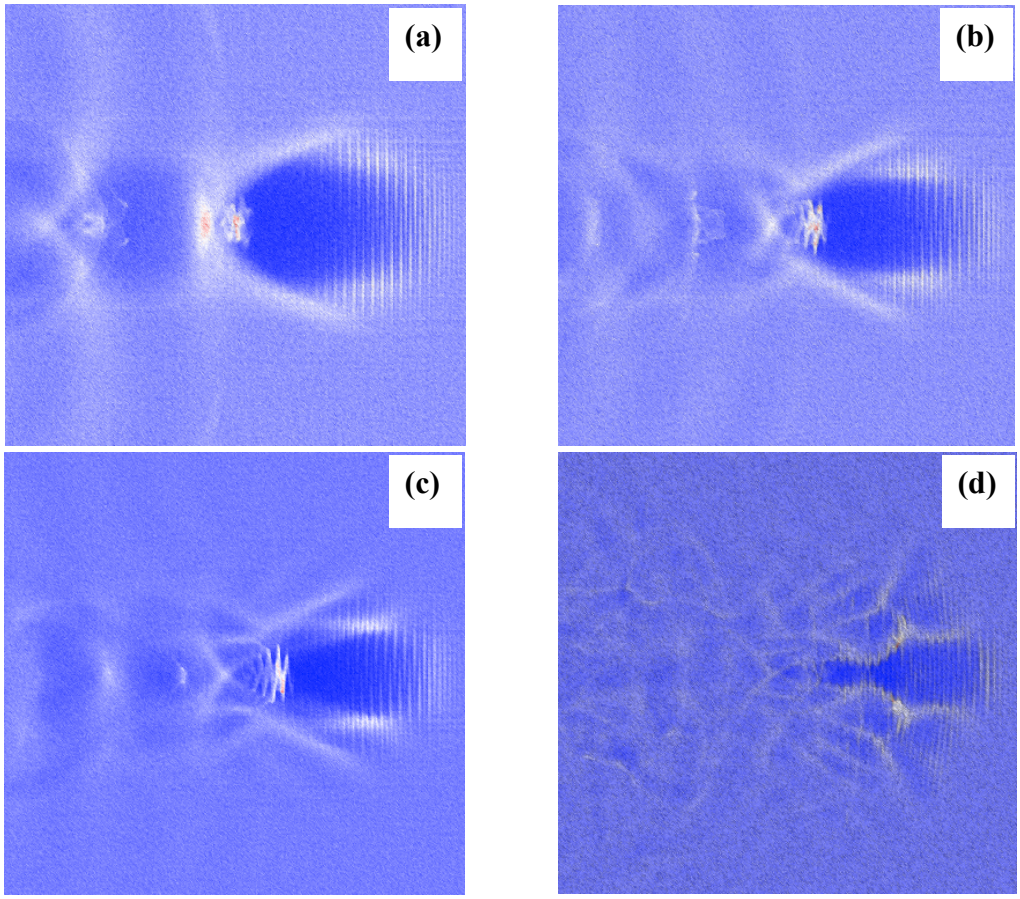


Fig. 2 Electron density image plots in the x-y plane (115<x<165, 120<y<168) for the same densities as in Fig. 1 at $\tau = 200$.

4.4.16 第一原理分子動力学による化学反応のシミュレーション

First Principles Molecular Dynamics Simulations of Chemical Reactions

池田　隆司

放射光量子シミュレーショングループ

１．利用の概要（要約）：

本研究では、第一原理分子動力学に基づいた手法を用いて溶液内化学反応のシミュレーションを実施している。本年度は、軽金属イオンの水和挙動および加水分解過程の詳細を、大型計算機を用いた長時間のシミュレーションにより明らかにした。溶液内化学反応のシミュレーションを実施するには、溶質、溶媒を顕に考慮し、電子状態を調べる必要があるため、大型計算機の利用が必須である。

２．利用の内容・結果：

アルカリ金属イオンの水和は、生体化学において重要な役割を果たしており、その詳細を知ることは特に重要な課題である。本研究では、Li^+、Na^+、K^+の水和構造、動的性質、および電子状態の詳細を第一原理分子動力学シミュレーションにより系統的に調べた。Li^+では水が4 面体状に配位した構造（図 1(a)）が安定であり、他の配位構造は観測されなかったが、Na^+とK^+では図２に示すように配位数に分布がみられた。Na^+においては５配位三方両錐型構造(図1(b))が典型的な配位構造と特定できたが、K^+ではそのような典型的配位構造が特定できなかった(図 1(c))。これは、K^+ではイオン - 水間相互作用が弱く、水 - 水間相互作用と競合するためと考えられる。

水分子の電気双極子モーメントは周囲の環境により敏感に変化することが知られている。Wannier 関数から水分子の電気双極子モーメントの分布を求めたところ、図 3 に示すようにイオンの第一水和圏内の水分子のみ他の水分子と異なる値をとっており、K^+においては、K^+イオンに配位することにより、水分子の電気双極子モーメントが減少することを見出した。この結果は、「水分子の配向」、「水素結合ネットワークの形成」、および「水分子の分極」の間に密接な関連があることを示唆している。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1. T. Ikeda, M. Hirata, and T. Kimura,
“Hydrolysis of Al^{3+} from constrained molecular dynamics”,
J. Chem. Phys. **124**, 074503 (2006).
2. 寺倉清之、池田隆司、Mauro Boero、
“第一原理分子動力学法による水の物理・化学的性質のシミュレーション～超臨界水と高圧下メタンハイドレート～”、
低温科学 **64**, 57 (2005).
3. 池田隆司、Mauro Boero、寺倉清之、
“アルカリ金属イオンの水和”、
日本物理学会2005年秋季大会、京都、9月19日 (2005)

4. 池田隆司、
“超高圧下の水の第一原理分子動力学シミュレーション”、
日本物理学会第61回年次大会、愛媛、3月29日 (2005)

4．今後の利用予定：

高密度化された水における水素結合状態と水分子の解離機構の解明を目指す。

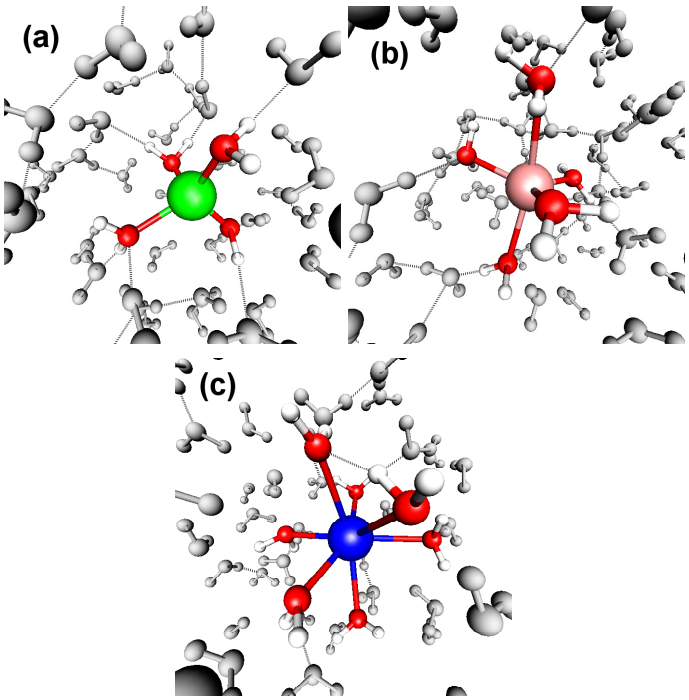


図 1. (a) Li^+、(b) Na^+、(c) K^+の典型的な水和構造

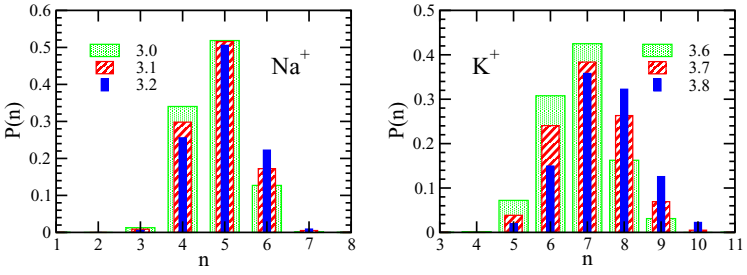


図 2. Na^+(左)、K^+(右)における配位数分布。図内に示したイオンからの距離(単位:Å)内にある水分子数分布を示した。

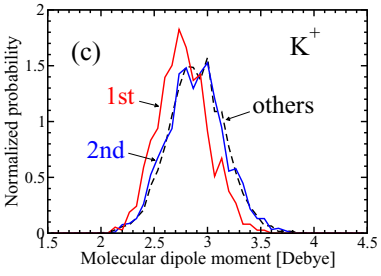


図 3. K^+水溶液における水分子の電気双極子モーメントの分布。

4.5 核融合研究開発部門

4.5.1 低アスペクト比トカマク炉におけるアルファ粒子閉じ込めシミュレーション

Simulation of Alpha-Particle Confinementin a Low-Aspect-ration Tokamak Reactor

谷 啓二
核融合研究開発部門

１．利用の概要（要約）：

低アスペクト比トカマク炉 VECTOR をターゲットに、軌道追跡モンテカルロコードを用いて、核融合反応で発生するアルファ粒子の減速過程における閉じ込めに最も重要なリップル磁場中での粒子軌道の追跡とバルクプラズマとのクーロン衝突をモンテカルロ法でシミュレーションした。

２．利用の内容・結果：

アルファ粒子のリップル損失は、アスペクト比に非常に強く依存することが分かった。プラズマ端におけるリップルを固定したモデルトロイダル磁場においては、リップル損失はアスペクト比 A の 4～5 乗に比例する。さらに、現実的なトロイダル磁場コイル配位において、コイルとプラズマの相対位置をフィックスした系においては、A の９乗もの強い依存性のあることが分かった。これらリップル損失の強い A 依存性により、低アスペクト比トカマクにおいてはアルファ粒子は、非常に良く閉じ込められることが分かった。さらに、これらの結果から、損失アルファ粒子による真空容器第一壁上の熱負荷を強制冷却を必要としない１MW/m^2に抑えてトロイダル磁場コイル数をどこまで削減できるかをフェライト鋼の効果も含めて評価した。VECTOR のオリジナル設計では、トロイダル磁場コイル数は１２個であるが、これに対して、フェライト鋼を挿入すれば、コイル数は８個程度まで、また、コイルサイズをさらに１０％程度大きくすれば、コイル数は６個（半減）出来ることがわかった。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1．TANI Keiji, NISHIO Satoshi, TOBITA Kenji et al
“Ripple Loss of Alpha Particles in a Low-Aspect-Ratio Tokamak Reactor”,
9th IAEA Technical Meeting on “Energetic Particles in Magnetic Confinement Systems”, November 2005, Takayama

2. TANI Keiji, TOBITA Kenji, IIO-TSUJI Shunji et al
“Confinement of Alpha Particles in a Low-Aspect-Ratio Tokamak Reactor”,
IEEJ Trans. FM, Vol.125, No.11, 2005

４．今後の利用予定：

製電場の効果を含めた、より高精度モデルによるアルファ粒子閉じ込めの評価をおこなう。

4.5.2 JT-６０U へのフェライト鋼装着後の高エネルギーイオン閉じ込め評価

Evaluation of Confinement of energetic ions after ferritic insertion on JT-60U

篠原　孝司
トカマク共同実験研究グループ

１．利用の概要（要約）：

トロイダル磁場リップルを低減し、高エネルギーイオンの閉じ込めを改善することで、JT-60Uのプラズマ性能の更なる向上をめざして、JT-60Uにフェライト鋼を設置した。設置後の実験結果が数値計算と比較して妥当であるか解析した。

２．利用の内容・結果：

JT-60Uは18個のトロイダルコイルにてトロイダル方向に閉じた磁力線を生成し、荷電粒子であるプラズマを閉じ込めているが、トロイダルコイルが離散的に設置されているために、いわゆる、トロイダル磁場リップルが存在している。このトロイダル磁場リップルは高エネルギーイオンの閉じ込めを悪くする要因となっている。このことはJT-60Uのプラズマ性能の更なる向上の一障害となっていた。そこで、磁性体であるフェライト鋼を設置することでトロイダル磁場リップルを低減し、高エネルギーイオンの閉じ込めを改善することをめざして、JT-60Uにフェライト鋼を設置した。

設置後の実験結果が数値計算と比較して妥当であるか解析した。実験データとしては、赤外カメラを用いたプラズマ第一対向壁への熱流速のデータと中性子発生量の時間変化のデータとがあり、これらのデータを完全三次元版粒子追跡モンテカルロコード(Full three dimensional magnetic field Orbit following MonteCarlo: F3D OFMC)の計算と比較した。誤差の範囲で矛盾の無いことを確認している。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

秋に中国の成都にて行われる第２１回 IAEA 核融合エネルギー会議にて、その結果を報告し、また、Nuclear Fusion 誌へ投稿予定である。

４．今後の利用予定：

実験データとの比較には更なる精査が必要であり、引き続きデータの解析を進める。

4.5.3 OFMC コードを用いたα粒子に起因するトロイダル回転の研究

Study of toroidal rotation induced by alpha particles based on OFMC-code

小林憂樹（茨城大学工学研究科）
機構担当者：濱松清隆（先進プラズマ研究開発ユニット・トカマク解析 Gr）

１．利用の概要（要約）：

トカマク型実験装置ならび核融合炉において、プラズマの安定な閉じ込め達成にはプラズマのトロイダル回転が重要な役割を果たしており、その制御方法の開発は重要な研究課題の一つである。共同研究として遂行された本研究の目的は、核融合反応で発生するα粒子がプラズマ表面から損失する時に発生する速度空間における異方性に着目し，この異方性に起因するトロイダル回転量の定量評価を行うことである。このために、機構で開発された軌道追跡モンテカルロ(OFMC)コードを用いる．OFMC コードでは，モンテカルロ(MC)法によって核融合反応α粒子を生成し、α粒子の案内中心軌道を追跡しながら燃料プラズマとのクーロン衝突を MC 法で模擬し、プラズマ内部で熱化するかプラズマ外部へ損失するまでの軌道を追跡する．OFMC コードによる数値シミュレーションは Prism システムで実施した．

２．利用の内容・結果：

OFMC コードによる数値シミュレーションは、国際熱核融合実験炉(ITER)に相当するプラズマ・パラメータを用いて行った．有限個数のトロイダル・コイルに起因するリップル磁場の影響が大きい負磁気シア配位では、リップル磁場により軌道損失が増大するため正磁気シア配位に比べてプラズマの回転速度は増大する．しかし、フェライト鋼によってリップル磁場が低減された場合には，プラズマの回転速度は１桁程度の低減を受けることが分かった．

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

１）小林憂樹，三枝幹雄、濱松清隆,「アルファ粒子の非等方性軌道損失と角運動量保存から発生するトカマクプラズマの回転に関するシミュレーション」、第 22 回プラズマ・核融合学会年会、東京、１２月１日、２００５年

２）小林憂樹，三枝幹雄、濱松清隆，飛田健次、「アルファ粒子の非等方性軌道損失と角運動量保存から発生するトカマクプラズマの回転に関するシミュレーション」電気学会プラズマ研究会，日立市，１月１２日、２００６年

４．今後の利用予定：

今後は、GW 程度の核反応出力をもつ核融合炉も解析対象として、より能動的なプラズマ回転制御の方法を検討する予定である．

4.5.4 先進的粒子コード PARASOL による SOL•ダイバータ プラズマのシミュレーション

Simulation of SOL-Divertor Plasmas Using Advanced Particle Code PARASOL

滝塚　知典
トカマク解析グループ

１．利用の概要（要約）：

JT-60 のダイバータ実験解析および、JT-60 の次期装置や核融合実験炉 ITER のダイバータ設計のために、原子力機構核融合研究開発部門では、SOL•ダイバータプラズマシミュレーションコードシステムを開発している［3]。このコードシステムにおける SOL•ダイバータプラズマ物理モデリングの検証と構築を行うために、第一原理に基づく先進的粒子コード PARASOL によるシミュレーションを大型計算機を用いて実行する［4]。

２．利用の内容・結果：

PARASOL コードでは、PIC 法により粒子運動と静電場を自己無撞着に追跡するとともに、モンテカルロ法二体衝突モデルによりクーロン衝突効果を矛盾無く取り入れ、SOL•ダイバータプラズマ中の輸送を運動論効果も含めて正確に模擬することができる。PARASOL コードは、１次元定常バージョン、１次元非定常バージョン、スラブ２次元バージョンおよびセパラトリクス２次元バージョンがある。平成１７年度は大型計算機システムを利用して、２次元バージョンについては並列計算最適化開発整備作業を進め、１次元非定常バージョンについては ELM 崩壊後の SOL•ダイバータプラズマ過渡特性のシミュレーション研究を行った。ELM 崩壊により SOL 領域に突発的に放出された熱はダイバータ板に流出する。その熱流出の時間スケールは、速い電子通過時間スケールと緩かな音速時間スケールに分けることが出来る。ダイバータ板前面において、電子熱流 Q_e、電子温度 T_e、シースポテンシャル ϕ は速い時間スケールで応答し、プラズマの粒子流 Γ、プラズマ密度 n、イオン熱流 Q_i と電子熱流の一部は緩かな時間スケールで応答する（Fig. 1)。速い時間応答の様相はプラズマの衝突度により大きく影響される、一方、緩かな時間応答の様相は衝突度に依存せずダイバータ板近傍の粒子リサイクリングの大きさにより影響されることを明らかにした［1, 2]。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

[1] T. Takizuka, M. Hosokawa, "Particle Simulation of the Transient Behavior of One-dimensional SOL-Divertor Plasmas after an ELM Crash", 10th International Workshop on Plasma Edge Theory in Fusion Devices", Forschungszentrum, Juelich, 17-19 Oct 2005;
to be published in Contrib. Plasma Phys. **46** , No. 7-9 (2006).
[2] 滝塚知典，林伸彦，細川哲成，「ELM 崩壊後の SOL/ダイバータプラズマの１次元粒子シミュレーション」，第 22 回プラズマ・核融合学会年会，東京，2005 年 11 月 29 日-12 月 2 日.
[3] 川島寿人，清水勝宏，滝塚知典，桜井真治，仲野智友英，朝倉信伸幸，小関隆久，「原子力機構における SOL/ダイバータコードの開発とシミュレーション研究の現状」，第 22 回プ

ラズマ・核融合学会年会，東京，11 月 29 日-12 月 2 日（招待講演）.
[4] 滝塚知典，清水勝宏，川島寿人，林伸彦，細川哲成「ダイバータプラズマの構造とダイナミックス」，第 11 回 NEXT 研究会，3 月 6-7 日，京都.

４．今後の利用予定：

PARASOL コードのセパラトリクス２次元バージョンを発展進化させた２次元トロイダルバージョンの開発を進める。このトロイダルプラズマでは、粒子運動のバナナ軌道が現れ、シミュレーション空間スケールとして、より広い空間を取り扱う必要がある。そのため、より多くの粒子を用いる必要があり、より多くの計算資源を使用する。トロイダルバージョンの開発に並行して、非定常１次元バージョンによる非対称 ELM 熱流のシミュレーション、セパラトリクス２次元バージョンによる SOL-コアプラズマにおける電場形成シミュレーションを行う。

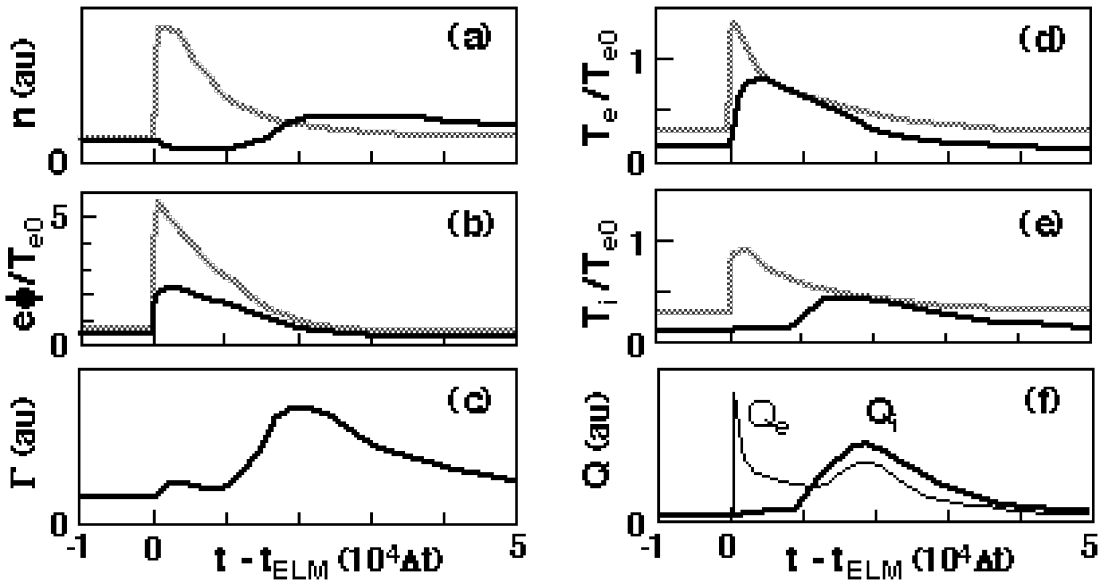


Fig. 1 Transient responses of (a) density n, (b) potential ϕ, (d) electron temperature T_e, and (e) ion temperature T_i at the SOL center (shaded line) and those in front of the divertor plate (solid line) after an ELM crash. Particle flux Γ (c) and electron and ion heat fluxes Q_e and Q_i are measured in front of the plate.

4.5.5 輸送-MHD 統合 ELM シミュレーション

Integrated ELM simulation based on transport and MHD

林　伸彦、小関隆久、相羽信行
トカマク解析グループ

１．利用の概要（要約）：

燃焼プラズマは、様々な時空間スケールの物理現象が複雑に絡み合っており、燃焼プラズマの予測及び制御のためには、この複雑物理現象を含んだシミュレーションコードの開発が必要である。本研究は、燃焼プラズマ統合コード開発の一環として、プラズマの境界領域で起こる不安定性（Edge Localized Mode）のモデルを開発し、ELM がプラズマ性能に与える影響を調べ、ELM の制御手法を明らかにすることを目的とする。ELM モデル開発は、JT-60U 実験と比較し、モデルの妥当性を調べながら行う。本年度は、燃焼プラズマ統合コードの中核となるトカマクプラズマ輸送コード TOPICS と磁気流体（MHD）安定性解析コード MARG2D の統合計算機能を開発した。統合計算では、TOPICS はシングル CPU の計算機で実行し、MARG2D は Altix 及び Prism システムで並列計算させる。統合シミュレーションが、JT-60U 実験で観測される様な ELM による崩壊現象を再現できることを確認した。

２．利用の内容・結果：

ELM モデルでは、TOPICS により計算したプラズマの時間発展分布の各時刻の安定性を MARG2D により計算し、不安定性が起きた場合には輸送を増加させて ELM による崩壊現象を模擬する（図１）。TOPICS は、シングル CPU で実行し計算機負荷は少なく、トカマク解析グループ所有の計算機で実行する。しかし、MARG2D は、並列計算が必要になり、TOPICS の時間発展シミュレーションの各時刻に実行する必要があり計算機負荷が大きく、大型計算機（Altix 及び Prism システム）を利用した。以上の統合コード TOPICS+MARG2D の解析結果を得る為には、長期間に渡り、大量の Job 投入を行う必要が有る。この TOPICS-MARG2D を用いた統合シミュレーションにより、JT-60U 実験で観測されるような MHD 不安定性、プラズマの崩壊・回復分布変化（図２）、及び、ELM 崩壊サイクル（図３）、を再現できることを確認した。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

(1) T. Ozeki, N. Aiba, N. Hayashi, T. Takizuka, M. Sugihara, and N. Oyama, "Modeling of MHD Stability Consistent to the Transport", in Proc. of 32nd EPS Conference on Plasma Phys. Tarragona, 27 June - 1 July 2005 ECA Vol.29C, P-2.050 (2005) (http://eps2005.ciemat.es/papers/pdf/P2_050.pdf).
(2) T. Ozeki, et al., "Integrated Simulation Code for Burning Plasma Analysis", International Energy Agency Workshop on Burning Plasma Physics and Simulation, Tarragona, 4-5 July 2005, accepted in Fusion Sci. Tech.
(3) 小関隆久、相羽信行、林伸彦、滝塚知典、杉原正芳、大山直幸、「燃焼プラズマへ向けた輸送・MHD結合モデルによるELMシミュレーション」、第22回プラズマ・核融合学会年会、東京、

11月29日-12月3日

４．今後の利用予定：

現状の TOPICS+MARG2D 統合シミュレーションモデルでは、プラズマ閉込め領域外の周辺プラズマを考慮していない。しかし、ELM 崩壊によりプラズマの熱・粒子は周辺プラズマに掃き出されることから、プラズマ全体の輸送を自己矛盾なく考慮するためには、周辺プラズマモデルを TOPICS に結合する必要がある。今後、周辺プラズマモデルとして５点モデルを用いて統合シミュレーションモデルを改良して、より現実的な ELM シミュレーションを行う予定である。

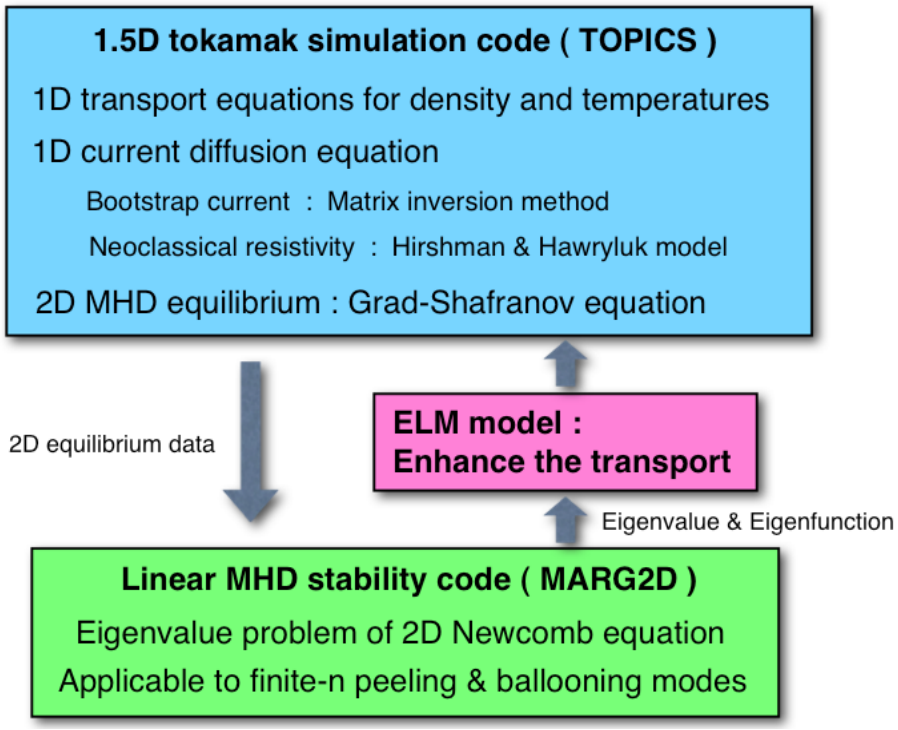


図１：TOPICS+MARG2D 統合 ELM シミュレーションモデル

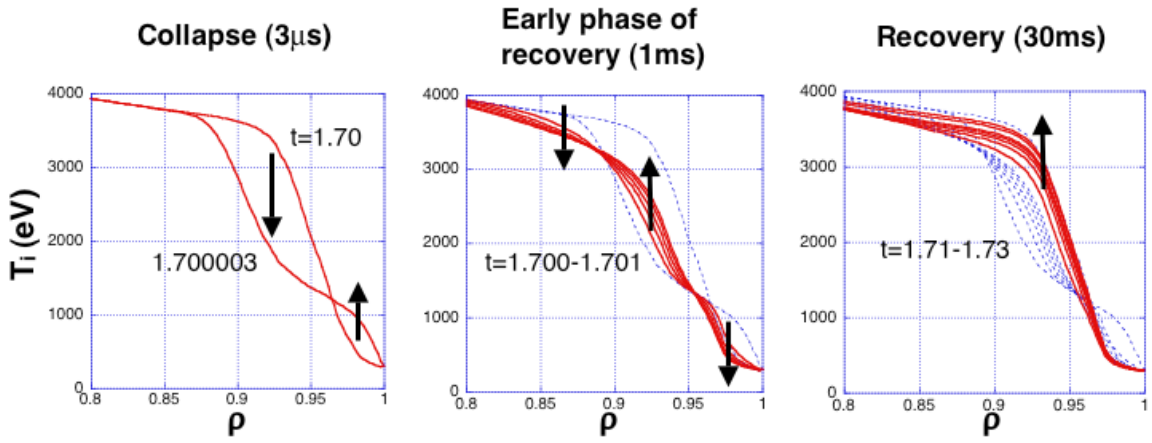


図２：ELM によるプラズマの崩壊・回復分布変化。MHD 不安定性（トロイダルモード数 n=7）発生によりプラズマ分布が 3 μs で崩壊（左)、その後、MHD 不安定性は安定化してプラズマ分布が回復（中、右)。

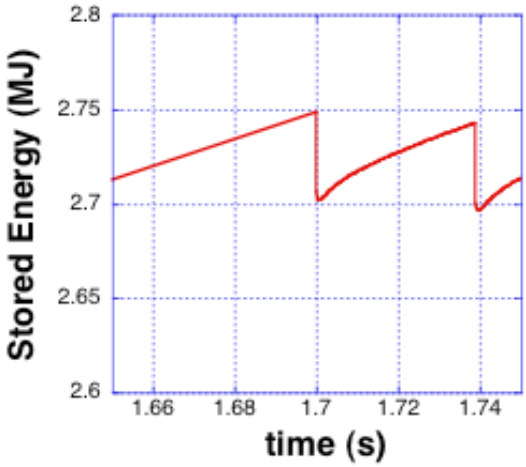


図３：ELM 崩壊サイクル。図２に示されるプラズマ分布の崩壊・回復が周期的（図では 2 回だけ示してある）に繰り返される。

4.5.6 JT-60U へのフェライト鋼導入に伴う OFMC コードの変更

Modification of OFMC-code for JT-60U with ferritic steel

濱松　清隆
先進プラズマ研究開発ユニット・トカマク解析 Gr

１．利用の概要（要約）：

軌道追跡モンテカルロ(OFMC)コードの開発目的の一つは､JT-60U の実験データ解析である。OFMC コードによる実験データ解析は，中性粒子ビーム入射(NBI)で発生する高速イオンの案内中心軌道を追跡しながらプラズマとのクーロン衝突をモンテカルロ法で模擬し、その熱化過程及びプラズマ外部への損失量を評価することである。高速イオンの軌道はトロイダル・コイルによって作られるトロイダル磁場に含まれるリップル磁場成分によって大きく乱され、その閉じ込めを劣化する可能性があるため OFMC による解析が重要である。JT-60U では、リップル磁場成分を小くするために真空容器壁にフェライト鋼タイルの装着を行った。これに対応して、OFMC コードの改良・変更を行った。

２．利用の内容・結果：

有限個数のトロイダル・コイルによって発生するリップル磁場成分は、その個数分の周期性が存在する。このため、磁場の計算ルーチンにおいてこの周期性を利用していた。フェライト鋼によりリップル磁場成分は大幅に低減されたが、逆に対称性のない完全に３次元的な磁場成分の取り扱いが必要になった。このため、3 次元格子点の中間点での磁場を計算するための高効率な 3 次元スプライン補間ルーチンを開発した。また、軌道追跡においても、リップル磁場が存在する場合には非捕捉粒子、バナナ捕捉粒子、リップル捕捉粒子の分類を行って時間ステップの最適化を行っていた。しかし、リップル磁場の低減により時間ステップの最適化の妥当性が不明確になったため、これを排除した。その他、JT-60 の実験条件の進展に対応して種々の変更を行った。尚、OFMC コードによる実験データ解析は Prism システムで実行されるが、そのための実験データは解析サーバで準備し、解析サーバから Prism へジョブをを転送し、ジョブ終了後の結果は自動的に解析サーバへ転送し、解析サーバで他の実験データとの比較検討を行えるシステムが構築されている。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

本件で改造された OFMC コードは JT-60U 実験データ解析のため JT-60 チームによって日々利用されており，その解析結果は国内外の論文、国内外の会議において発表されている.

４．今後の利用予定：

OFMC コードは JT-60 の装置サイズを取り入れた実験のデータ解析において最も重要なツールであり、今後も実験条件の進展に対応して改良・改造を行う。又、改修のための設計計算においても重要なツールであり、そのための改造も行う予定である。

4.5.7 ジャイロ運動論的ブラゾフ CIP コードの開発

Development of gyrokinetic Vlasov CIP code

井戸村　泰宏
プラズマ理論シミュレーショングループ

１．利用の概要（要約）：

ジャイロ運動論モデルによるトカマク乱流の第一原理シミュレーションはトカマクプラズマにおける乱流輸送を解明・予測する上で重要な研究手法となっている。ジャイロ運動論シミュレーションには、位相空間における粒子分布関数を粒子で表現する粒子コードおよび格子で表現するブラゾフコードという 2 つの計算手法が存在する(図 1)。このうち、前者は比較的メモリ使用量が少ないため、本研究を含めこれまで多くの研究グループで用いられてきた。一方、後者は 5 次元の位相空間をメッシュで表現するために膨大なメモリを必要とするが、熱・粒子源や粒子衝突効果といった実験の状況に近い開放系の物理効果の拡張性に優れている。特に、近年の先進プラズマで観測されている輸送障壁への遷移現象のような乱流と輸送の時間スケールを統一的に取り扱う必要がある問題を解明するには、このような開放系プラズマの長時間乱流シミュレーションが必要不可欠である。こういった背景から、今回、新たにブラゾフコードの開発に着手した。

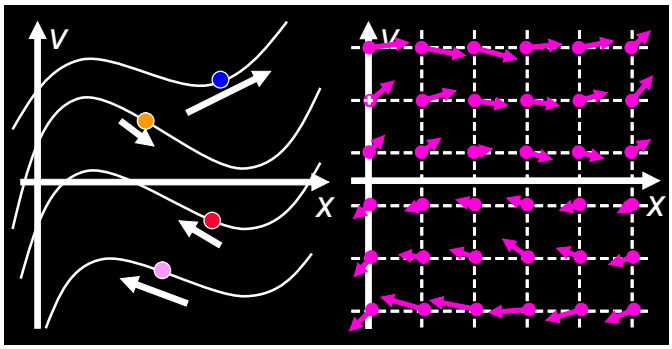


図 1：粒子コード(左図)とブラゾフコード(右図)によるジャイロ運動論シミュレーションの概念図。

２．利用の内容・結果：

開発初年度となる今年度はスキームの選定と数値特性の評価等を行い、計算流体力学分野における先進的スキームの一つであるセミ・ラグランジュ法の一種である CIP(Constrained Interpolation Profile)法を用いてブラゾフコードを開発することに成功した。CIP 法を用いることにより、これまでのブラゾフコードで問題となっていた数値的不安定性を抑えて、微視的乱流の非線形発展を安定に解くことができた。イオン系乱流のテスト問題において、新しいブラゾフコードと従来の粒子コードのベンチマークを行い、ほぼ等しい精度で同様の結果が得られることを確認しコードの妥当性を検証した。また、このベンチマークでは計算コストもほぼ同程度となることを確認した。このベンチマークにより、数値特性や計算コスト等に関して、今後のブラゾフコード開発に向けた指針を得ることができた。

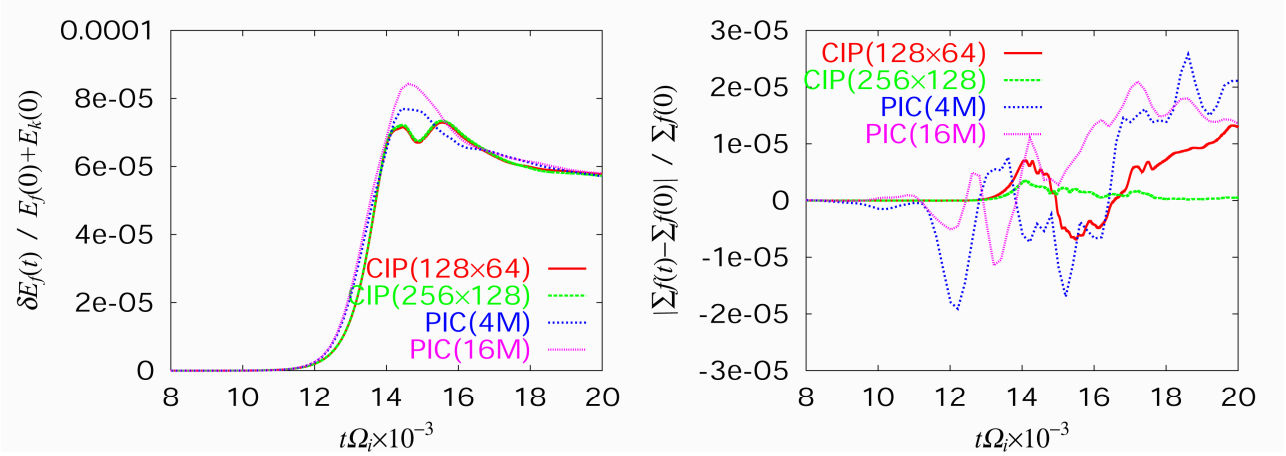


図 2:粒子コード(PIC)とブラゾフコード(CIP)によるイオン系乱流シミュレーションの比較。左図は乱流場のエネルギーの時間発展を示し、右図は粒子保存の破れを示す。両方のコードでほぼ等しい結果が得られている。図中の数字は粒子数と格子数の違いを表す。

3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

[1]“Global profile effects and structure formations in toroidal electron temperature gradient driven turbulence”,
Y. Idomura, S. Tokuda, and Y. Kishimoto,
Nucl. Fusion 45, 1571-1581 (2005).
[2]“Comparisons of Gyrokinetic PIC and CIP codes”,
Y. Idomura, S. Tokuda, and Y. Kishimoto,
32nd EPS Plasma Physics Conference, Tarragona, Spain, 2005, p1.044 (poster).
[3]“Gyrokinetic simulations of ETG turbulence and zonal flows in positive/reversed shear tokamaks”,
Y. Idomura,
Festival de Theorie 2005, Aix-en-Provance, Frace, 2005 (invited).
[4]“電子温度勾配駆動乱流における自己組織化”
井戸村泰宏、
プラズマ・核融合学会第 22 回年会、2005 年 11 月 29 日、東京 (oral)
[5]“微視的乱流のδｆシミュレーション”,
井戸村泰宏,
J. Plasma Fusion Res. 81, 581-592(2005).
[6]“微視的乱流シミュレーションにおける将来に向けての課題”
渡邉智彦, 洲鎌英雄, 井戸村泰宏,
J. Plasma Fusion Res. 81, 581-592(2005).

4．今後の利用予定：

今回の開発によりブラゾフコードによるトカマク乱流シミュレーションの可能性が見えて

きた。しかしながら、その精度は依然として従来の粒子コードと同程度であり、例えば、実験に近い状況の開放系プラズマを長時間にわたって追跡する、といった長時間シミュレーションにおいては精度が問題となる。この問題を解決するために、今後さらに数値計算手法の改良を進める。また、コードのトロイダル配位への拡張にも着手する。

4.5.8 トカマクプラズマの磁気流体不安定性の非線形発展に関する３次元 full-MHD シミュレーション研究

3D full-MHD simulation studies of nonlinear evolution of magnetohydrodynamics instabilities in tokamak plasmas

影井　康弘
プラズマ理論シミュレーショングループ

１．利用の概要（要約）：

プラズマ理論シミュレーショングループでは、数値トカマク実験（NEXT）計画の一環として、トカマクプラズマの磁気流体（MHD）現象の非線形ダイナミクスの解明と予測・制御を目指した 3 次元 full-MHD シミュレーションコードの開発を進めている。本年度は、有限体積-擬スペクトル法スキームに基づくトロイダル full-MHD コードが新たに完成するに至り、本コードを用いて MHD 不安定モードの非線形発展とモード間相互作用の解析を進めた。

２．利用の内容・結果：

磁場の非発散条件（保存則）を保持した高精度なシミュレーションの実現を目指して開発を進めている有限体積-擬スペクトル法に基づく full-MHD シミュレーションコード（コード名：MHFDSP）について、解析モデルをこれまでの円柱形状から、実験プラズマにより近いトロイダル形状へ発展させたトロイダル full-MHD コードの開発に新たに成功した。これにより、円柱モデルでは取り扱えなかったトロイダル性に起因する MHD 不安定モードの解析が新たに行えるようになり、それらを含む複数の MHD 不安定モード間の非線形相互作用の解析を行った。典型的なシミュレーションは、1 ケースあたり 256～512CPU を使用して約 1 週間の計算時間を要する大規模なものであり、これを効率的に行うための並列計算手法の改善と最適化チューニングも進め、256～512CPU の並列計算で約 15%の実行効率を達成した。シミュレーションの結果、コアの高圧プラズマと周縁の低圧プラズマが交換する不安定モードは、線形成長段階においてはトーラス外周部に局在したフィンガー構造として現れるが、閉じ込めが完全に崩壊するまでには至らず、非線形段階において、スケールの異なる別種のモードとの相互作用により空間構造を変えて、図 1 に示すような螺旋状のフィンガー構造を形成しながら停滞・飽和に至ることを明らかにした。この結果は、異スケールのモード間の非線形相互作用が MHD 不安定モードの停滞・飽和の物理機構として働く可能性を示唆しており、引き続き詳細な物理機構の解明を進める必要がある。

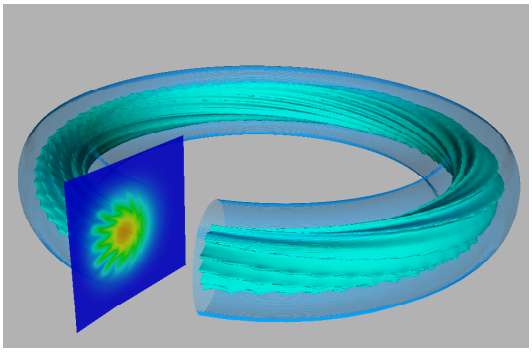


図１　MHD 不安定モードの非線形発展段階に形成される螺旋状フィンガー構造。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1）Y. Kagei, Y. Kishimoto and T. Miyoshi, “A Finite Volume Approach to the Fully Compressible MHD Simulation of High β Tokamak Plasmas”, 47th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, Oct. 24-28, 2005, Denver, USA.

2）Y. Kagei, Y. Kishimoto and T. Miyoshi, “Simulation of Nonlinear Interactions between n=1 Internal Kink and High-n Pressure-driven MHD Instabilities”, Workshop on Active Control of MHD Stability 2005, Oct. 31-Nov. 2, 2005, Madison, USA.

3）Y. Kagei, Y. Kishimoto and T. Miyoshi, “Interactions between Low-n Internal Kink Mode and High-n Ballooning Mode Associated with Saturation”, US/Japan Workshop on MHD Stability Control and Related Confinement of Toroidal Plasmas, Feb. 6-8, 2006, Naka, Japan.

4）影井康弘、岸本泰明、三好隆博、“非線形 MHD シミュレーションによる内部キンクモードの有限ベータ効果”、日本物理学会 2005 年秋季大会、京田辺市、2005 年 9 月 19-22 日

5) 影井康弘、岸本泰明、三好隆博、“内部キンクモードとバルーニングモードが共存する高ベータプラズマの非線形ＭＨＤダイナミクス”、プラズマ核融合学会 第 22 回年会、江戸川区、2005 年 11 月 29 日-12 月 2 日

6) 影井康弘、岸本泰明、三好隆博、“圧力駆動型高 n MHD モードと内部キンクモードの相互作用の解析”、日本物理学会第 61 会年次大会、松山市、2006 年 3 月 27-30 日

４．今後の利用予定：

更に詳細な解析を実行するためには、MHD 不安定モードの空間構造をより正確に捕らえながら効率的にシミュレーションを実行する必要がある。そこで、今年度開発したトロイダル full-MHD コードを、直交矩形格子よりも形状適合性に優れ、計算格子の集積化が可能な三角形状非構造格子コードへ発展させた上で、シミュレーションを実行する。

4.5.9 原子・緩和過程が関与するプラズマ構造形成のシミュレーション

Simulation of structure formation of plasmas dominated by atomic and relation process

岸本　泰明
プラズマ理論シミュレーショングループ

１．利用の概要（要約）：

本課題は、複雑な原子過程が関与した核融合プラズマを含めた各種プラズマの着火時のダイナミックスやトカマクプラズマのディスラプション時にしばしば発生する相対論エネルギー領域の逃走電子とネオンやアルゴンなど高価数（高Ｚ）を持つ希ガスとの相互作用ダイナミック、あるいはこれらの基礎となる放電・雷過程の基礎課程の解明を目的としている。これらの知見に基づいて、プラズマの着火制御や逃走電子抑制の物理機構などを明らかにする。原子・分子過程や輻射課程が混在したプラズマ現象は、長いプラズマ研究の歴史にも関わらずこれまで経験則に基づいて扱われることが多く、その詳細なダイナミックスは未だ明らかになっていない。これらの現象は「無衝突プラズマとしてのマクロなダイナミックス」と「デバイ長内部のミクロなダイナミックス」の相乗効果によって作り出される複雑現象と位置づけられる。

２．利用の内容・結果：

原子・緩和過程を取り入れたEPIC3D（Enhanced Particle based Integrated Code）を用いたシミュレーションにより、高強度電磁波に照射された気体や固体などの媒質の電離過程とそれに伴うプラズマの生成過程の詳細を明らかにした。特に、プラズマ着火時に見られるストリーマやスプライトと呼ばれる複雑な分岐構造を持った電離波伝播現象や構造形成、さらに、そのような放電過程において放射される電磁波のスペクトルやその統計的特性に関して新しい視点を見出した。また、電磁波と媒質との相互作用によって生成された相対論領域の高エネルギー電子によるチェレンコフ放射とそれに伴うプラズマ波乱流が媒質内部の電離過程に本本質的役割を果たすことを見出した。これらは原子・緩和過程が関与したプラズマの新しい複雑現象と位置付けられ、ALTIX3900 による大規模シミュレーションにおいて見出した。

Fig. 1（左）は、固体炭素に高強度の電磁波を照射したときの各時刻におけるイオンの電荷密度分布を示している。入射電磁場によるイオン化によって相互作用表面の狭い領域に局在した高いプラズマ密度分布が形成され、その領域から内部に向かって対流的（convective）に電離が進行し、t=90fsec 前後では、C^{+2} に対応する平坦な密度分布が形成される。この過程は C^{+2} の電離波の伝播に対応し、その伝播速度は約 0.7×10^{8}m/sec 程度である。さらに、t=95.7fsec では、２価の平坦な密度分布に対して左端表面から 1.2μm 程度内側に密度の隆起（hump）が発生する。それが媒質内部に向かって再び対流的に伝播し、電磁波との直接的な相互作用が終了する t=150fsec 付近では C^{+4} に対応する平坦な密度分布が形成される。この C^{+4} の電離波の伝播速度は C^{+2} のそれより速く、0.9×10^{8}m/sec に

達する。このように、相互作用の前半では C^{+2} へのイオン化が、後半では C^{+4} へのイオン化が多段的に誘起されることが示された。

Fig. 1（右）は t=90fsec 前後での媒質内部での電場構造(a) およびイオン電荷密度(b)を示している。電磁波との相互作用で発生したプラズマ波が乱流状態となり、その乱流電場によって電離が進行することが分かった。このプラズマ波励起は、加熱された高エネルギー電子によるプラズマ波のチェレンコフ放射によるものであることが解析から明らかになった。また、この乱流電場は媒質中を光速の 1/3 程度の速度で伝播するとともに、波と粒子との相互作用を通して電磁波が伝播しない媒質内部の加熱に寄与することが分かった。

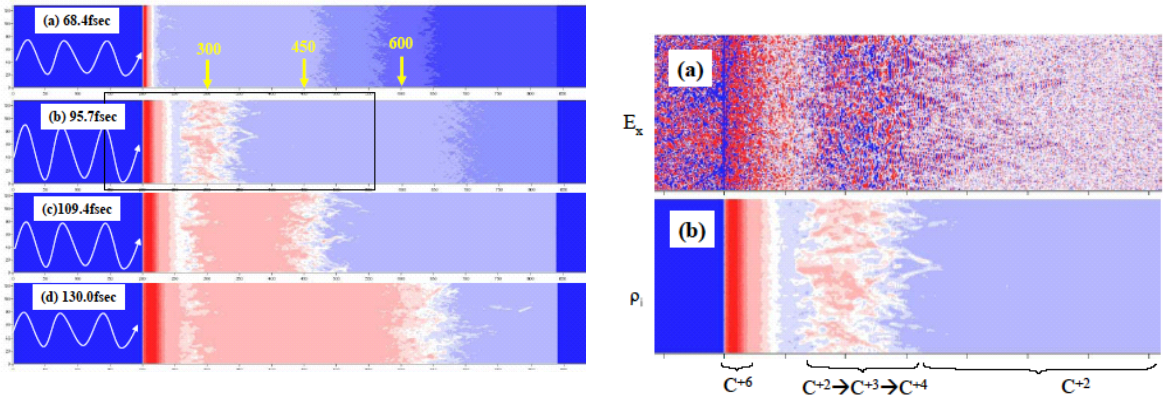


Fig. 1　Ion density dis- tribution in 2 dimensional simulation domain at four different times. Propagation of the ionization front of charge state 4 is seen having a complex finger-like structure

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1. 「多階層ダイナミックスが支配するプラズマの構造形成に関する研究」(English version :Research on structure formation of plasmas dominated by multiple hierarchical dynamics)
   岸本泰明（Y. Kishimoto）
   平成１６年度　地球シミュレータ利用成果報告書（平成１７年発刊）
   Annual Report of the Earth Simulator Center： April 2004-March 2005, p261-26
   （Internet　http://www.es.jamstec.go.jp 掲載）

2. 「粒子コードによるレーザープラズマ相互作用シミュレーションの発展」
   （特集／レーザー核融合とレーザープラズマ応用の発展）
   坂上仁志、岸本泰明、千徳靖彦、田口俊弘
   プラズマ・核融合学会誌、vol. 81 Supplement, p.64-75 (2005)

３．A paradigm of kinetic simulation including atomic and relaxation processes
－A sudden event in lightning process－
Y. Kishimoto and T. Masaki
J. Plasma Phys. accepted for publication (2006)

４．Ionization dynamics in high power laser-matter interaction
T. Masaki and Y. Kishimoto
J. Plasma Phys. accepted for publication (2006)

５．Multi-stage ionization dynamics of carbon film irradiate high power lasers
T. Masaki and Y. Kishimoto
Journal of Plasma and Fusion Research, 81, No.10, 643-644 (2005)
(Rapid communication)

４．今後の利用予定：

今後、トカマクのディスラプション時に生成される相対論的な逃走電子とネオンやアルゴンなどの高Ｚ物質との相互作用ダイナミックスを中心に、EPIC3D による大規模シミュレーションを ALTIX3900 上で実施する。また、これらの過程で重要な役割を果たす対論的電子からの放射によるエネルギー減衰を含めたシミュレーションモデルを開発し、イオン化過程、再結合過程、衝突緩和過程、輻射過程を取り入れたより現実的なシミュレーションの実現を目指す。

4.5.10 ジャイロ流体モデルによる多スケール乱流シミュレーション

Multi-scale turbulence simulation based on gyro-fluid simulation

岸本　泰明
プラズマ理論シミュレーショングループ

１．利用の概要（要約）：

本研究課題では、トカマクを中心とした核融合プラズマの閉じ込めを支配する乱流輸送において、これまでの時空間スケールを限定した従来の単一階層的な輸送解析を多階層に拡張することにより、異なった時空間スケールの相互作用まで考慮した輸送ダイナミックスを解明することを目的とする。具体的には、流体モデルをベースに、セミマクロスケールのイオン系とミクロスケールの電子系の双方を包含する幅広い時空間スケールのシミュレーションを実現し、乱流間の直接相互作用や帯状流や対流渦などの巨視的な揺らぎを介した間接相互作用、臨界勾配近傍での間欠的ダイナミックスや遷移現象、輸送障壁形成時のトリガーに関わる素過程などを明らかにする。これらは、高性能プラズマ実現に不可欠な輸送制御の理論基盤を与えるものである。

２．利用の内容・結果：

電磁効果と取り入れた局所的なジャイロ流体モデルに基づくコード開発とそれに基づく ALTIX3900 によるシミュレーションを行い、これまで単一階層に限定した電子温度勾配（ETG）乱流およびイオン温度勾配（ITG）乱流による輸送研究を進展させた。特に、磁気シアの小さな磁場構造下では、全体的な揺らぎレベルが高いにも関わらず、帯状流が揺らぎの主要なエネルギーを占める高い閉じ込め状態が実現すること、および、磁気シアが乱流構造を規定する重要なパラメータであることを見出した。Fig.1 は、異なった磁気シアに対して、流体モデルに基づくスラブ配位の静電的な ETG 乱流のシミュレーション結果（揺らぎの波数スペクトル）を示している。磁気シアが弱い極限では揺らぎは帯状流が支配的な構造を示し、磁気シアの増大に伴って揺らぎは当方的になり、大きな磁気シアに対しては有限のポロイダル成分を持ち径方向波数の小さいストリーマ構造を示すことが分かる。これらの結果から、ETG モードのスペクトル構造は磁気シアの影響を強く受けていることが分かる。これらは、変調不安定に基づく理論によって検証された。

さらに、電磁効果を取り入れたシミュレーション研究を実施した。これまでの解析では静電的な Reynolds 応力による帯状流の生成を考えてきたが、プラズマのベータ値が上昇すると Reynolds 応力に加えて Maxwell 応力の効果が無視できなくなる。Maxwell 応力が無視できなくなるとは、それまで磁気面に束縛されていた電子が磁場の揺らぎを通して磁気面から離れることができるため荷電分離を抑制し、その結果、帯状流の生成率を低下させることが予測される。Fig.2 は、これまでの静電モデルに電磁効果を取り入れて行った ETG モード乱流の輸送特性を示している。帯状流の強い場合（s=0.4）は、ベータ値の増大とともに熱輸送係数は減少し、電磁効果による典型的な電子温度勾配モードの抑制現象を再現している。この ETG 乱流輸送のベータ依存性は“大河スケーリング”に対応する。

また、ベータ値の増大に伴って帯状流も減少するが、もともと帯状流は輸送に寄与していないことから輸送への影響はない。一方、帯状流が支配的となる弱磁気シア(s=0.1)の場合は、ベータ値の増大とともに帯状流が減少するため乱流の抑制効果が低下し、その結果輸送係数は増大することが分かった。この依存性は大河スケーリングと逆の依存性を示すものである。また、Fig.2(c)は帯状流の時間発展を示すが、ベータ値の増大に伴い帯状流の成長率が減少する様子が分かる。

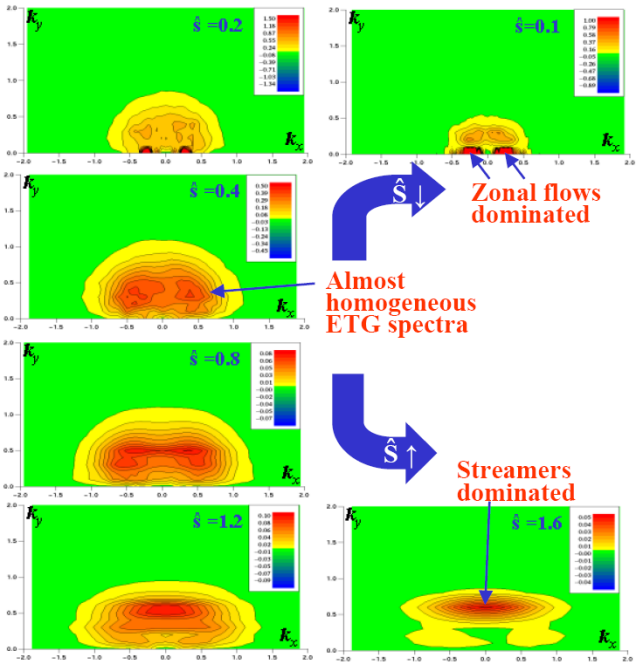


Fig. 1 Fluctuation spectrum (k_x,k_y) of ETG turbulence for different magnetic shear value (s=0.1-1.6)

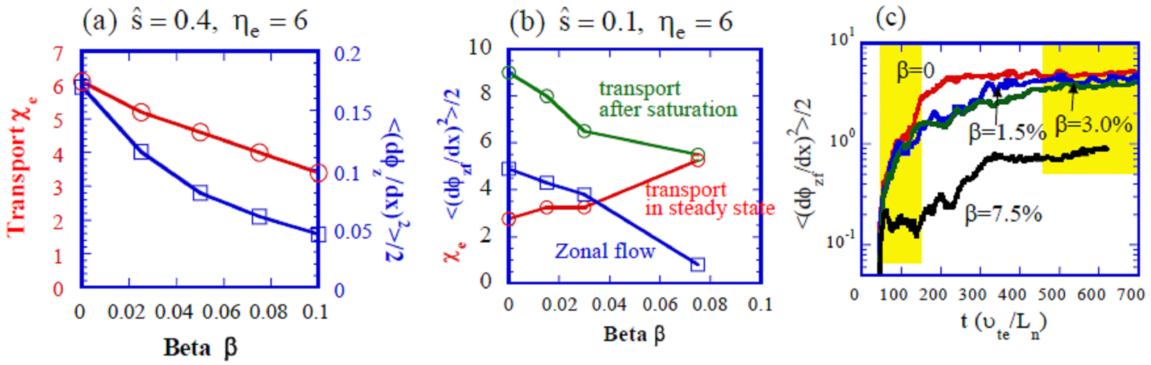


Fig. 2 Transport coefficient and zonal flow energy in high electron temperature gradient regime in the case of (a) moderate magnetic shear case s=0.4 and (b) weak magnetic shear case s=0.1. (c) Time history of zonal flow energy for different values.

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1. Role of magnetic shear in large-scale structure formation in electron temperature gradient driven turbulenc
   J.Q. Li and Y. Kishimoto
   Physics of Plasmas **12**, 054505 (2005)
2. Dynamics of large-scale structure and electron transport in tokamak microturbulence simulations
   J.Q. Li, Y. Kishimoto, N. Miyato, T. Matsumoto and J.Q. Dong
   Nucl. Fusion **45**, No 11, 1293-1301(2005)

3. Dynamics of secondary large-scale structures in ETG turbulence simulations
   Jiquan Li, Y Kishimoto, J.Q. Dong, N. Miyato and T. Matsumoto
   Plasma Science & Tech., **8**, 110 (2006)

4. Large-scale structures and turbulence saturation in gyrofluid ETG simulations
   Jiquan Li, Y Kishimoto, N. Miyato, T. Matsumoto and J.Q. Dong
   J. Plasma Phys. accepted for publication (2006)

5. Effect of mean flow on the interaction between turbulence and zonal flow
   K.Uzawa, Y. Kishimoto, J.Q. Li,
   Plasma and Fusion Research: Letters, **1**, 024 (2006)

４．今後の利用予定：

これまで、イオン系および電子系のいずれかに時空間スケールを固定したシミュレーションを行ってきた。今後は、電子温度勾配モード（ETG）に代表されるミクロスケールの電子系乱流とイオン温度勾配モード（ITG）に代表されるマクロスケールのイオン系乱流の双方を統一的に解析することが可能なジャイロ流体・粒子モデルの開発を行い、これらスケールの異なる二つの自由エネルギー源を持った流体シミュレーションを実施することにより、異なった乱流間の相互作用を考慮した乱流輸送研究を進める。例えば、電子系を強く加熱することによって電子温度勾配モードに起因する帯状流を励起し、それによりイオン系の輸送を抑制するなど、輸送障壁形成をトリガーする物理機構の研究やそれに基づくプラズマの新しい制御手法を開拓する。

4.5.11 流体モデルによるイオン乱流輸送の研究

Study of ion turbulent transport based on a fluid model

宮戸　直亮
プラズマ理論シミュレーショングループ

１．利用の概要（要約）：

本研究では、理論シミュレーショングループで進めている数値トカマク実験(NEXT)計画の一環として、イオンの回転半径程度の微視的乱流から装置サイズの巨視的な不安定性や帯状流までの広い時間・空間スケールにおける非線形シミュレーションが可能な 3 次元電磁流体コードの開発を行っている。本年度は Altix3700Bx2 システムを用いて、微視的乱流であるイオン温度勾配駆動乱流とその乱流から生成される巨視的な帯状流のシミュレーションを行った。

２．利用の内容・結果：

昨年度は 3 次元電磁流体コードを用いて磁場揺動も含んだ電磁的なイオン温度勾配(ITG)駆動乱流シミュレーションを行い、乱流から生成される帯状流との間の非線形相互作用を調べていた。本年度は、この ITG 乱流－帯状流系の振る舞いと、それが乱流輸送に及ぼす影響を詳しく調べるために、磁場揺動を無視して計算量を減らし、シミュレーション上の時間がより長い、あるいはシステムサイズの大きなシミュレーションを行った。シミュレーションには Altix3700Bx2 システム(128-256CPU)を利用し、以下の結果を得た。

○　反転磁気シアトカマク中の帯状流の振る舞いと、その乱流への影響を調べ、安全係数が最小の面付近でのイオン乱流輸送抑制のメカニズムを明らかにした(図 1)。

○　プラズマのサイズを小型トカマクから JT-60 などの大型トカマク程度まで変化させたシミュレーションを行い、プラズマサイズが大きくなると、帯状流の性質が変化する場所で乱流輸送の大きさも急激に変化することを明らかにした(図 2)。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1) N. Miyato, J. Q. Li and Y. Kishimoto, “Study of a drift wave-zonal mode system based on global electromagnetic Landau-fluid ITG simulation in toroidal plasmas”, Nucl. Fusion 45, 425-430 (2005).
2) J. Q. Li, Y. Kishimoto, N. Miyato, T. Matsumoto and J. Q. Dong, “Dynamics of large-scale structure and electron transport in tokamak Microturbulence simulations” , Nucl. Fusion 45, 1293-1301 (2005).
3) N. Miyato, Y. Kishimoto and J. Q. Li, “Zonal flow and GAM dynamics and associated transport characteristics in reversed shear tokamaks”, 19th International Conference on Numerical Simulation of Plasmas and 7th Asia Pacific Plasma Theory Conference, Nara, Japan (July 12-15, 2005).
4) N. Miyato, Y. Kishimoto and J. Q. Li, “Nonlocal behaviour of zonal flows in tokamak plasmas”, 10th IAEA Technical Meeting on H-mode Physics and Transport Barriers, St.

Petersburg, Russia (September 28-30, 2005).
5) J. Q. Li, Y. Kishimoto, J. Q. Dong, N. Miyato and T. Matsumoto, “Dynamics of secondary large-scale structure in ETG turbulence simulations”, Plasma Science and Technology 8, 110-113 (2006).
6) 宮戸直亮、岸本泰明、李継全、“トカマクプラズマ中の帯状流に対する ρ_* の効果”、 日本物理学会第 61 回年次大会、 愛媛大学・松山大学、2006 年 3 月 27 日－30 日

4．今後の利用予定：

反転磁気シアトカマクにおいて大きなシステムサイズのシミュレーションを行うほか、シミュレーションにイオン加熱の効果を導入し、圧力分布の時間発展も追う長時間シミュレーションを行う予定である。

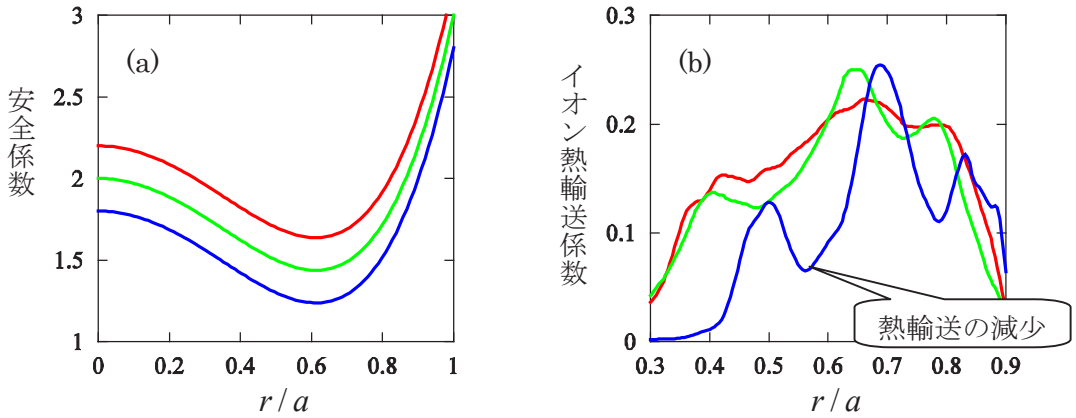


図１： (a)安全係数分布 (b)乱流熱輸送係数分布

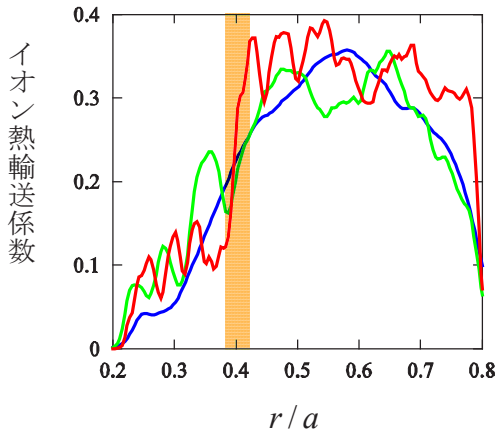


図２： 乱流熱輸送係数分布。プラズマのサイズは赤線の場合が最も大きく、青線の場合が最も小さい。プラズマサイズが大きくなるにつれ、帯状流の性質が変わる半径 $r/a = 0.4$ 付近の乱流輸送係数の変化が急激になる。

4.5.12 回転プラズマにおける突発的な磁気島形成と長時間成長

Rapid onset and long term evolution of the magnetic island formation in rotating plasmas

石井　康友
プラズマ理論シミュレーショングループ

１．利用の概要（要約）：

プラズマ理論シミュレーショングループでは、核融合プラズマの高性能化のための理論・シミュレーション研究を数値トカマク実験（NEXT）計画として推進している。本研究では、大型トカマクプラズマにおけるエネルギー・粒子の閉じ込め性能の劣化をもたらすと考えられる、回転プラズマ中における外部揺動に起因する突発的な磁気島の生成機構を電磁流体(MHD)モデルに基づき、数値シミュレーションにより調べた。本研究では、抵抗値ηや粘性値νの幅広いパラメータ領域において非線形シミュレーションを行う必要があり、多くの計算資源を必要とする。

２．利用の内容・結果：

回転プラズマ中に外部磁場揺動により形成される磁気島の発生から飽和の過程を、非線形MHDコードを用いて調べた。主にPCクラスタAシステムの単一CPUを用いて計算を行った。本研究では、回転プラズマ中に形成される磁気島の成長・飽和過程を調べるとともに、磁気島が突発的に増大する際の臨界値のプラズマパラメータ依存性を調べるために、電気抵抗値η、粘性値ν、平衡磁場分布(q-分布)等の広範な領域に関してパラメータサーベイを行った($\eta=10^{-4}$～10^{-7}、$\nu=10^{-4}$～10^{-7})。その結果、突発的な磁気島の増大に関する臨界値は、外部揺動と抵抗層における散逸の釣合いに強く影響され、既知の依存性とは異なったパラメータ依存性を示す領域が存在することが明らかとなった。また、このような磁気島の成長過程は、抵抗値ηに強く依存することが明らかとなった（図１）。図１に示すように、低ηでは、臨界値通過後の成長過程が２段階に分かれることが明らかとなった。特に後半の成長領域では、抵抗値の現象とともに平均的な成長率が低下している。また、この後半の成長領域では、図２に示すように、初期に形成された磁気島のX-点が引き伸ばされ、２次的磁気島が形成されることにより、成長率が抵抗値に依存することが分かった。

本研究により、回転プラズマ中での外部揺動による磁気島形成における外部揺動と抵抗層での散逸の釣合いの重要性が明らかになるとともに、このような磁気島の非線形成長が、低η領域でη効果が顕著になる得意な磁気再結合過程を伴うことを見出した。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1) Y.Ishii,M.Azumi and A.I.Smolyakov,「Magnetic island Evolution in Rotating Plasmas」, 19th International Conference on Numerical Simulation of Plasmas and 7th Asia Pacific Plasma Theory conference, Nara-city, Japan, July 12-15, 2005
2) Y.Ishii,M.Azumi and A.I.Smolyakov,「Rapid Evolution of the Magnetic Island in the

Rotating Plasmas」, 47th Annual Meeting of the Division of Plasma Physics, Denver, Colorado, Oct.24-28,2005

3) Y.Ishii,M.Azumi and A.I.Smolyakov, 「Long Term Evolution of the Forced Magnetic Island in the Rotating Plasmas」, 7th ITPA MHD Topical Group Meeting and US-Japan Workshop on MHD Stability Control and Related confinement of Toroidal Plasmas, Naka-city,Japan, Feb.6th-9th, 2006.

4) 石井康友 、安積正史、A.Smolyakov, 「回転プラズマにおける外部駆動された磁気島の長時間成長」、日本物理学会第６１回年次大会、松山市、2006.3.27

４．今後の利用予定：

今後は単一CPU計算のみでなく、ある程度の規模の並列計算を行っていく予定である。

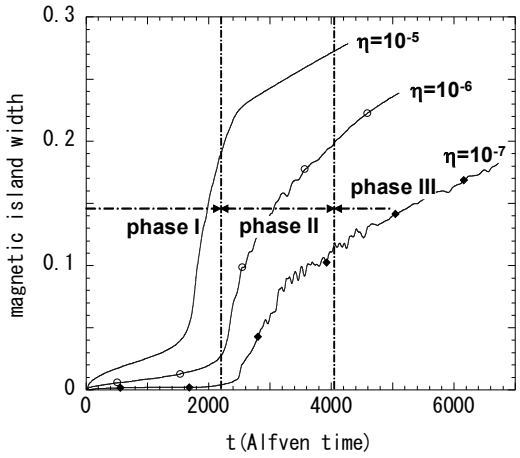


図１　外部揺動により形成される磁気島の時間発展に対する抵抗値ηの影響。これまでは時間発展は３領域に分けられると考えられていたが、低ηプラズマでは４領域（第Ⅱ領域が第１ステップと第２ステップに分割）になることが明らかになった。

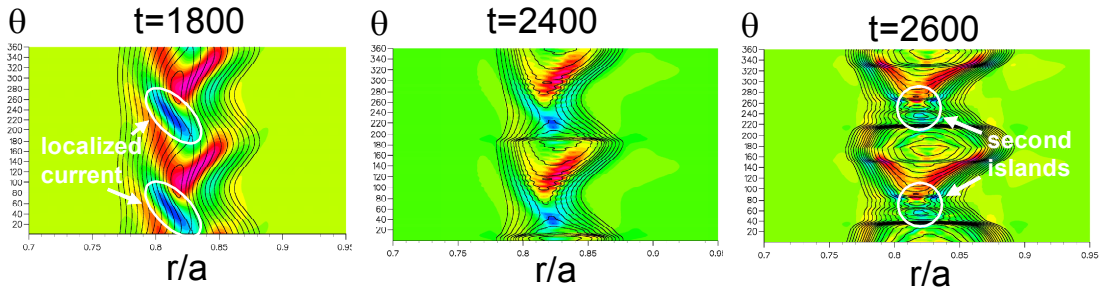


図２　図１のη=10-6の場合に対応した、共鳴面近傍での磁気島とプラズマ電流の等高線

4.5.13 JT-60 フェライト鋼設置改造工事のための数値計算

Numerical Calculations for Ferrite Insert of JT-60

鈴木　優
トカマク本体機器システム開発グループ

１．利用の概要（要約）：

JT-60 ではリップル磁場低減のため真空容器内にフェライト鋼を設置する改造工事を実施した。本工事に際し、トカマク本体機器システム開発グループでは、フェライト鋼の適切な配置形状を定め、その効果を数値的に確認するために、各種リップル計算を行った。また、真空容器内に設置したフェライト鋼の磁化により、実験運転中のプラズマ形状を評価するコーシー条件面法（以下 CCS と略す）制御系が影響を受けるため、CCS 制御系への入力となる、①CCS 計算格子点上及びフラックスループの磁束、②TC プローブ磁場の各物理量のフェライト磁場による補正量を定量評価し、改造後の実験運転に備えた。

これら各種の数値計算に、並列化した専用解析コード FEMAG をはじめとするコード郡での長時間にわたる多数ケースのランが不可欠となった。

２．利用の内容・結果：

ここでは上に述べた各種計算の中でも特に長時間解析が必要となった、CCS 制御用フェライト磁束の近似関数の整備に関し述べる。なお、リップル計算のパラメータサーベイの結果得られた、最終フェライト形状と、フェライト設置によるリップル低減効果をそれぞれ、Fig.1 及び Fig.2 に示す。

① 磁束補正量の評価

磁化したフェライト鋼の影響により、プラズマ閉じ込め空間には、Fig.3 に例を示す様な磁束が生成される。CCS 制御系にこの影響を取り込むため、補正量を算定した。

リアルタイム処理が要求される CCS 側処理能力の負担軽減のため、フェライト設置領域を 4 ブロックに分け、個々のフェライトタイル上の磁場に代わり、各フェライトブロックに一様な外部磁場をかけた際の磁束を下式で近似し、各格子点上の磁束を求めた。

$$\psi = c_1 \times B_r + c_2 \times B_z + c_3 \times B_r / B_T + c_4 \times B_z / B_T$$

上式での近似結果を Fig.4 に示す。

計算した磁場の組合せは以下の 1617 通り、格子点数は R, Z 方向とも 1cm 刻みで 261×361 = 94221 点である。

(BT, Br, Bz) 磁場組合せ

- BT = (1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0, 3.5, 4.0) Tesla　7 通り
- Br = (-0.5 ~ 0.5) Tesla　（0.1 T 刻み）　11 通り
- Bz = (-1.0 ~ 1.0) Tesla　（0.1 T 刻み）　21 通り

フラックスループの磁束の補正量は基本的に上で求めた格子点データから内挿できるが、

フェライト鋼近傍の磁場の計算精度は低いため、プラズマから見てフェライトの裏側に位置するフラックスループ#1, #2, #15 の磁束は大半径方向遠方から積算し求めた。

② TC プローブ磁場補正量の評価

制御に用いる TC プローブ#1, #2, #3, #16, #20 に関し以下のステップで補正量を評価した。まず、フェライトタイルとの相対位置の実測データをもとに、EMSolution を用いて各プローブの磁場成分を外部磁場 BT = (1.0, 2.0, 4.0) Tesla、BP = (0.0, ±0.2, ±0.4, ±0.6) Tesla の組合せにつき求めた。次に、プローブ近傍以外のフェライト鋼の影響を加えるため、EMSolution でモデル化したフェライトタイルを除いた 4 つのフェライトブロックの作るプローブ設置部での磁場を FEMAG により求めた。これらの算定量は、CCS のリアルタイム処理に使用するため、磁束補正量と同様に近似式で与えた。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

以上により整備された CCS 制御用フェライト磁束の近似関数と磁場補正項は、平成 17 年 11 月より開始された運転でオンライン CCS に組み込まれ、実験が順調に進められた。

フェライト鋼設置改造による JT-60 の実験成果は、その後のプレス発表等により報告されている。

４．今後の利用予定：

今回のような大規模な数値解析を伴う JT-60 本体の改造は未定であるが、今後の運転パラメータに応じ、各種リップル計算を実施する予定である。

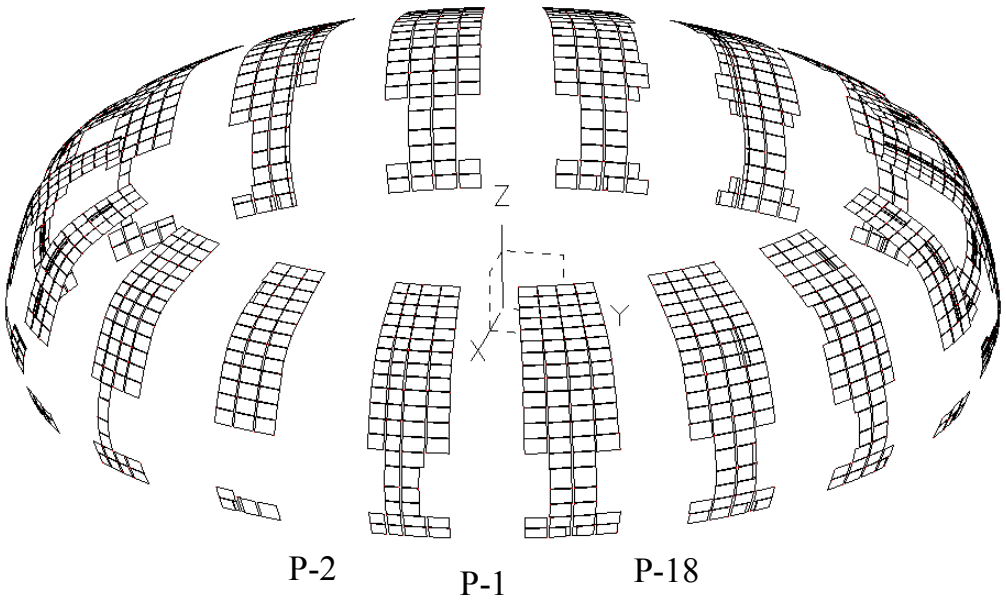


Fig.1　リップル解析実配置モデル

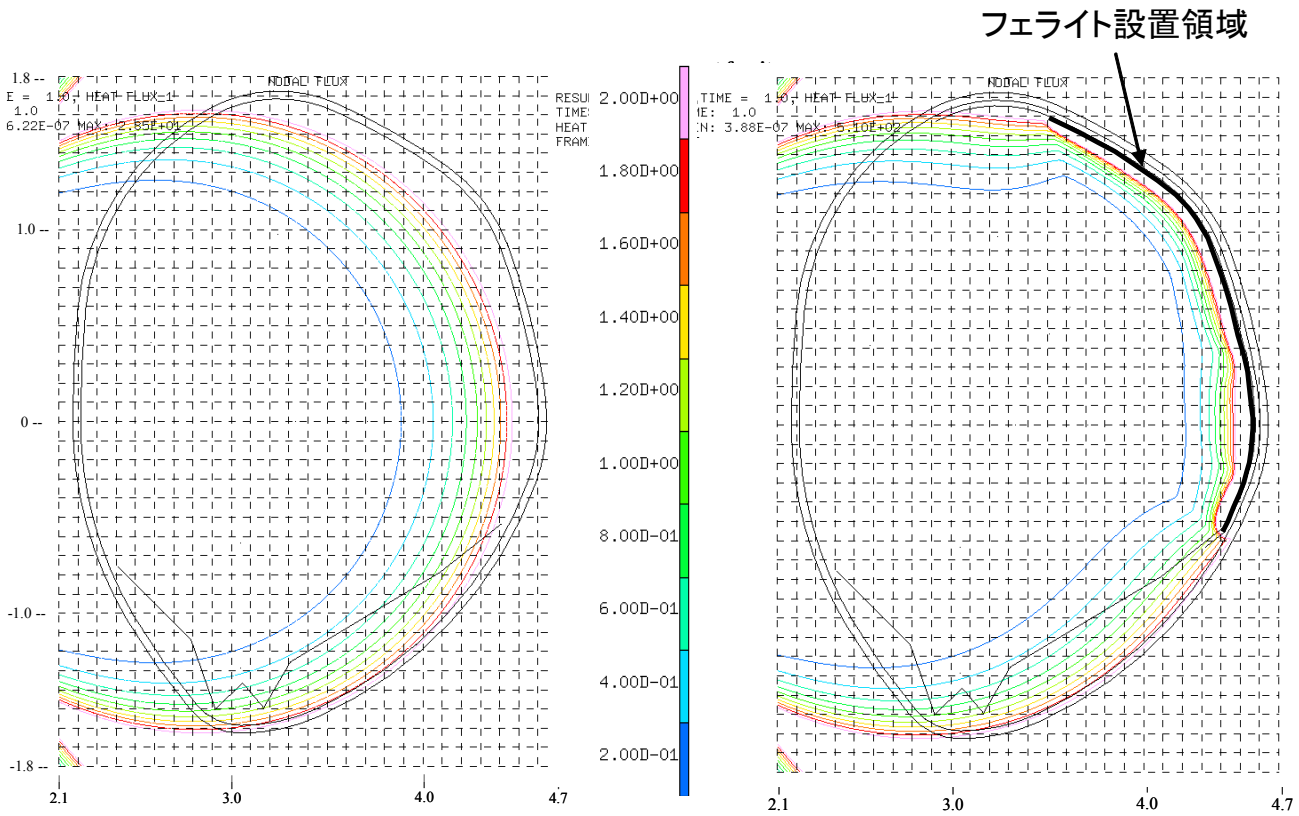


Fig.2　フェライト設置によるリップル低減効果
（リップルコンター図）

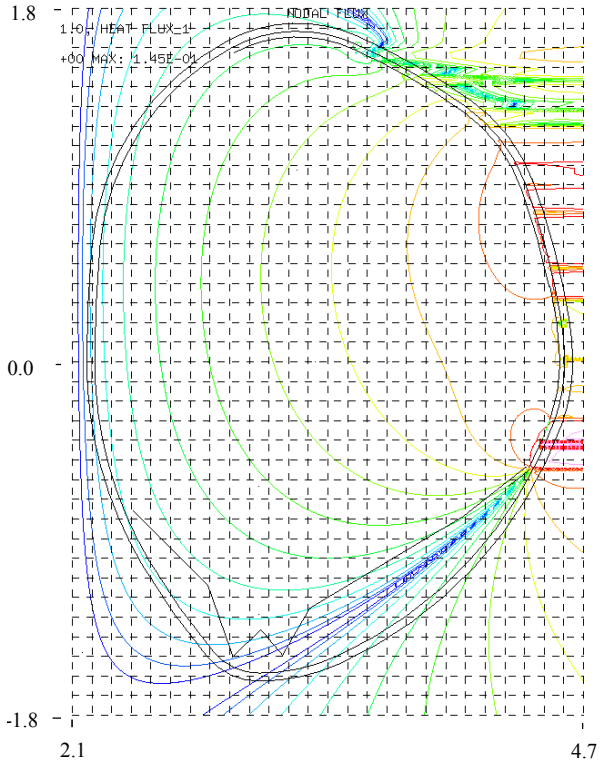


Fig.3 フェライトによる磁束例
(BT=2.0T@R=3.32m, Br=0.25T, Bz=0.5T)

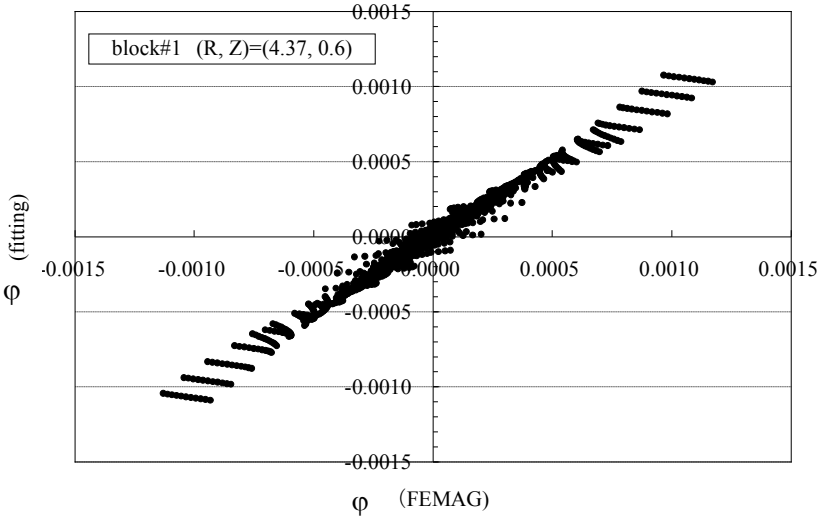


Fig.4　CCS 制御用近似関数のフィッティング結果

4.5.14 ＩＴＥＲ装置の核解析

Nuclear Analysis of the ITER

飯田　浩正
ＩＴＥＲ協力調整グループ

１．利用の概要（要約）：

ＩＴＥＲは核融合出力５００MW、総熱出力約７００MWを発生するエネルギー機関である。このエネルギーの８０％以上が中性子により運ばれ、諸機器の熱負荷となる。炉心プラズマ周りの機器にとって主要な機器設計条件の一つとなることは勿論、炉心から離れた超伝導コイルにおいても極めて重要な設計条件を構成し、詳細な中性子挙動解析が必須である。

また、炉停止後に作業員の近接可能性を確保するための装置内外遮蔽は、限られた空間の中で行われる為、核分裂炉では決して要求されることが無かった極めて高い計算精度が必要である。

上記解析は装置形状の複雑さ、ボイド開口部の多さ等から、現在ではモンテカルロ法が唯一の解析手法である。ＩＴＥＲでは約３０００から８０００の形状の異なるセルで構成されるモデルを使用しており、既存の他の装置（例えばＪＥＴ）の解析に較べると一桁以上複雑なモデルとなっている。このような解析で意義の有る結果を得る為には、使用する計算機の速度が決定的に重要である。

２．利用の内容・結果：

モンテカルロ法放射線輸送計算コードＭＣＮＰを用いＩＴＥＲ装置の以下の諸量を計算し、機器設計の熱負荷条件等の確立を目指した。将来の安全審査などを考えると統計誤差１％以内の結果が望ましいが、計算機速度の制約から、現状では１０％以下となることを目安とした。

＊炉心廻り機器（ブランケット、ダイバータ、真空容器等）の詳細な発熱分布。
＊　極低温（４k）機器（超伝導コイル等）の熱負荷分布、絶縁材等の吸収線量
＊　トカマク装置廻りの停止後放射線線量の分布
＊　トカマク建家内外放射線分布
＊　トカマク装置内外機器の放射線損傷
＊　現場溶接部のヘリウム生成量

上記項目のうち、停止後放射線線量率の計算は、従来の方法をモンテカルロ法に適用することは不可能である。装置運転中の中性子輸送解析と停止後の崩壊ガンマ線の解析を一遍に行う「1-step Monte Carlo 法」考案し、ＩＴＥＲ遮蔽計算に適用するとともに改良を続けた。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：（２００５年４月～２００６年６月）

１．Hiromasa Iida, “Improvement of Equatorial Port Plug Shield-mitigation of gap streaming effects-” IDM No: ITER_D_22HGCD v1.2 (NAG-256), May. 2005
２．Hiromasa Iida, “Neutron Current at the Inlet of the NB Ion Source Tank” IDM No: ITER_D_24DUNP v1.0 (NAG-257), Aug. 2005

３．Hiromasa Iida, “Additional Dose Rate Analyses for Magnet System- Slide Surface for CS, Insulator for Sensors, and TF outboard legs-” IDM No: ITER_D_24DUP7 v1.0 (NAG-258), Aug. 2005

４．Hiromasa Iida and L. Lu, “Required Thickness for the Ceiling Slab of Hot Cell Repair Room from Radiation Shielding Point of View” IDM No: ITER_D_23LHZE v1.0 (NAG-259), Feb, 2006

５．H. Iida, L. Petrizzi, Y. Wu, P. Batistoni, U. Fisher, T. Nishitani, E. Polunovskiy, S. Zheng ,Y. Meng, ” One-Step Monte Carlo Method - dose rate calculation after shutdown-” IDM No: N 73 RI ?? 05-04-04 NAG-260, June, 2006

６．H.Iida, “Re-assessment of Dose on PTFE in the Vacuum Vessel Support with the latest Support Design” , IDM No: ITER_D_222NE5 v1.0,NAG-261, May., 2006

７．H. Iida, L. Petrizzi, E. Polunovskiy, G. Federici, " Effect of Shield Blanket Mixture Change on the Nuclear Heat in the TF Coil inboard Legs ", IDM No: ITER_D_222NE5 v1.0,NAG-261, May., 2006

８．H. Iida,, L.Petrizzi, V. Khripunov, G. Federici, E. Polunovskiy “Nuclear Analyses of Some Key Aspects of the ITER Design with Monte Carlo Codes”, Fusion Engineering and Design 74 (2005) 133-139

４．今後の利用予定：

将来の機器設計の変更に伴う解析、安全審査対応の解析は、フランス CEA の計算機を主体として行うことになると予想される。しかしながら、計算システムの整備など計算環境が整うまで暫くの時間を要し、それまでの間は JAEA の計算機群が引き続き最も有力な計算機施設であり、引き続きこれまでと同様に使用する。

4.6. 次世代原子力システム研究開発部門

4.6.1 FBR 炉心損傷事故の３次元解析

Three-Dimensional Analyses of Core Disruptive Accidents in FBR

山野　秀将

FBR サイクルグループ

１．利用の概要（要約）：

これまでの高速増殖炉（FBR）における炉心損傷事故評価では、安全解析コード SIMMER-III が２次元コードであるが故に、周方向運動を模擬できず炉心中心への燃料集中を生じやすく、また、制御棒案内管の模擬に制約が存在するため、保守的な評価を余儀なくされてきた。最近、SIMMER-III を３次元に拡張した SIMMER-IV が開発されたことで、従来の２次元解析では取り扱えなかった実際の集合体配位を適切に模擬できると同時に、崩壊炉心物質の３次元的な運動を現実的に模擬できるようになってきた。本研究では、長時間計算を必要とする実規模体系での炉心損傷事故シミュレーションに適用し、既存の計算結果との比較により３次元解析の有効性を示すとともに、現実的な炉心損傷事象推移を明らかにすることを目的としており、大型並列計算機の利用は必要不可欠である。

２．利用の内容・結果：

炉心損傷時の核的動特性と結合した多相流多成分流のシミュレーションは極めて短時間に進展する上に複雑な流動を計算しなくてはならないため、タイムステップは 1.0×10^{-5} s 程度以下に制限される。また、実規模体系を模擬するには従来の 2 次元解析の数十倍の計算時間を必要とする。ちなみに、典型的な高速炉炉心の損傷事故の解析では単一 CPU を用いた場合、２次元解析では 2 日弱だが、３次元解析では 2 ヶ月を要した。計算時間の短縮化を図るため、平成 17 年度は SIMMER-IV の流体力学部の並列化を進めた。その結果、HPC2500 の 16CPU 使用時には約 6 倍の速度向上が得られた。また、核計算部はアルゴリズムの制約のため現在は並列化できないことが分かり、新たに並列化に適したアルゴリズムを構築するための検討を行った。

また、平成 17 年度は SIMMER-IV を実機解析へ世界で初めて適用した。図 1 に解析で得られた反応度と出力の履歴を示す。初期の小さな出力ピークは先行破損集合体における燃料の１次元的な重力落下によって生じる。図 2 および図 3 に２次元解析と３次元解析における炉心内の燃料の相変化挙動を示す。この反応度印加により液体燃料が生成されるが、スティール蒸気圧によって燃料は分散する。同時に、未破損集合体の燃料が破損するが、破損燃料は FP ガスによって分散する。これらにより反応度は低下し、マイルドに事象は進展する。その後、SIMMER-III による２次元解析では、2.4 秒以降に定格以上の出力が維持されることによって燃料が溶融して可動性を増し、炉心内側への燃料凝集により 3.9 秒で即発臨界を超過した。他方、SIMMER-IV による３次元解析では、2 秒前後で制御棒案内管が次々と非同時的に破損し、燃料を冷却することによって燃料プールは可動化することなく燃料凝集による反応度上昇は見られない。

以上のように、平成 17 年度は３次元シミュレーションによって制御棒案内管の冷却効果が

燃料凝集による再臨界発生を抑制する可能性を示した。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1. H. Yamano, S. Fujita, Y. Tobita, I. Sato and H. Niwa, “Development of a Three-Dimensional CDA Analysis Code: SIMMER-IV, and Its First Application to Reactor Case,” Proc. Technical Meeting on Severe Accident and Accident Management for Nuclear Power Plants, Tokyo, Japan (March 14-16, 2006).
2. 山野秀将, 飛田吉春, 佐藤一憲, 丹羽元, “３次元安全解析コード SIMMER-IV による炉心損傷事象推移の評価精度の向上,” 日本原子力学会 2005 年秋の大会, H15, 八戸 (September 13-15, 2005)

４．今後の利用予定：

高速炉の炉心損傷事故の事故シナリオを明らかにするとともに、３次元シミュレーションによる新たな再臨界回避方策を提案することを目的として、実規模体系かつ長時間のシミュレーションを実施する予定である。また、本コードの並列化効率は並列化されていない核計算部に依存しており、今後は並列化可能な核計算モジュールの導入を図っていく予定である。

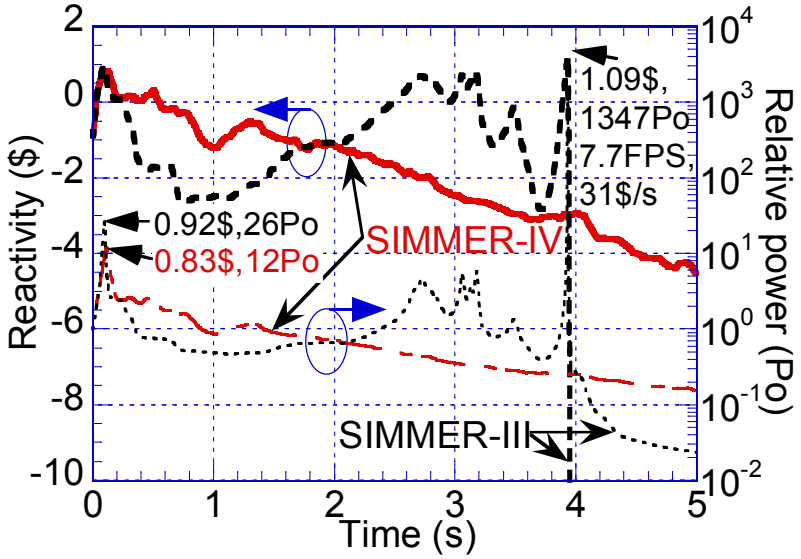


図１　反応度と相対出力の比較

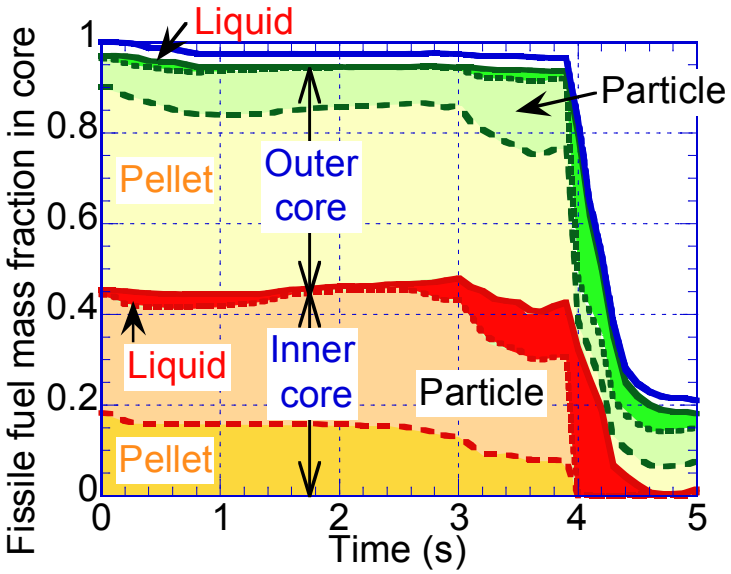


図 2　燃料成分(SIMMER-III による 2 次元解析)

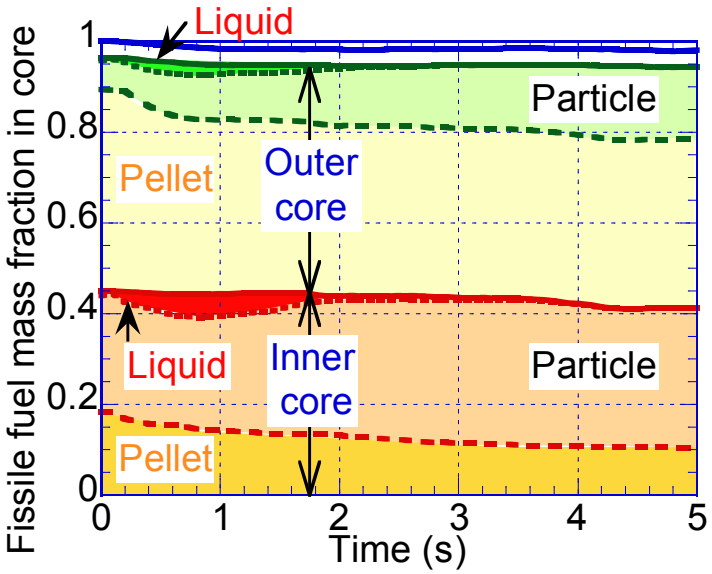


図 3　燃料成分(SIMMER-IV による 3 次元解析)

4.6.2 高速炉燃料集合体変形解析コードの開発

Development of a FBR Fuel Bundle-duct Interaction Analysis Code

伊藤　昌弘
核燃料工学グループ
機構担当者：上羽智之（核燃料工学グループ）

１．利用の概要（要約）：

高燃焼度のワイヤスペーサ型高速炉燃料集合体では、被覆管とダクトとの材料スエリング差に起因する燃料ピンとダクトとの機械的相互作用であるBDI(Bundle-Duct-Interaction)が寿命制限因子となる。核燃料工学グループでは、このBDIが発生した場合のバンドルの変形挙動を解析する”BAMBOO”を開発している。本コードは、バンドルの主要な変形機構をモデル化しており、炉外バンドル圧縮試験の結果や海外高速炉の照射試験データを基に解析機能の検証とモデルの改良を行っている。本解析では、217本ピンバンドルといった大規模体系における多数点不連続の接触・分離解析を多数ケース実施するため、大型計算機の利用は必要不可欠である。

２．利用の内容・結果：

図１にBAMBOOコードの解析モデルを示す。図に示すように、燃料ピンをワイヤピッチの1/12の長さを１要素とした梁要素の結合でモデル化しているため、要素両端の節点位置では、ワイヤと被覆管が一列に並ぶ「ピンチプレーン」とワイヤがダクトと直交する「ノーマルプレーン」が交互に現れる。BAMBOOコードでは、これら節点におけるオーバーラップ量を計算する接触判定処理を行うが、「ノーマルプレーン」となる軸方向位置の節点では燃料ピン同士の接触が発生する可能性が低いことから、この軸位置での燃料ピン同士の接触判定処理を省略することにより、計算機資源であるメモリー使用量を少なくし、計算負荷軽減を図っていた。しかし、ディスパージョン（燃料ピン配列乱れ）や燃料ピンの周方向歪差による自己湾曲モデルを導入した結果、これらの現象を考慮するとノーマルプレーンでも燃料ピン同士の接触が発生する可能性があるため、１７年度はノーマルプレーンにおいても燃料ピン同士の接触判定を行うように改良した。

図２に接触判定処理を改良する前後のバンドル横断面図を比較して示す。ここで示した図は、７本ピンバンドル照射変形解析結果のノーマルプレーンにおける断面図であるが、改良前の図は中心ピンのワイヤと隣接ピンが重なっているのに対し、改良後の断面図では重なっている箇所はなく、接触・分離解析が適切に行われていることが分かる。また、ノーマルプレーンにおける燃料ピン同士の接触を考慮したことにより接触点数は増加するが、接触・分離解析の収束計算は安定化するため、解析時間増大への影響は少ないことを確認した。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

１．T.UWABA,Masahiro ITO, Shigeharu UKAI and Michel PELLETIER

“Development of a FBR Fuel Bundle-duct Interaction Analysis Code-BAMBOO Analysis Model and Verification by Phenix High Burn-up Fuel Subassemblies. Journal of Nuclear Science and Technology, Vol.42, No.7, pp.608-617, July 2005

４．今後の利用予定：

燃料集合体ピンバンドルの照射変形をより詳細に評価するため、スペーサワイヤと被覆管との機械的相互作用を考慮する解析モデルを開発する予定。

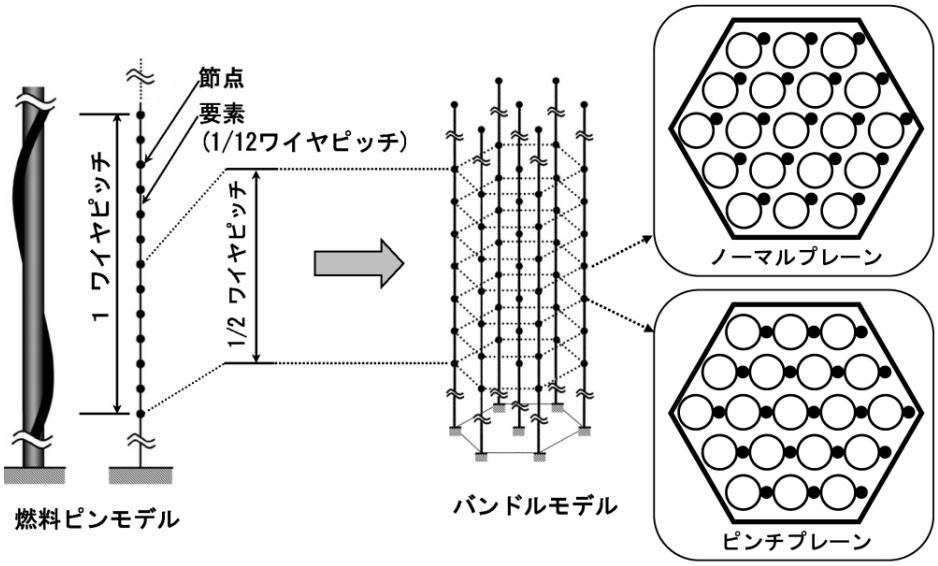


図１　BAMBOO コード解析モデル

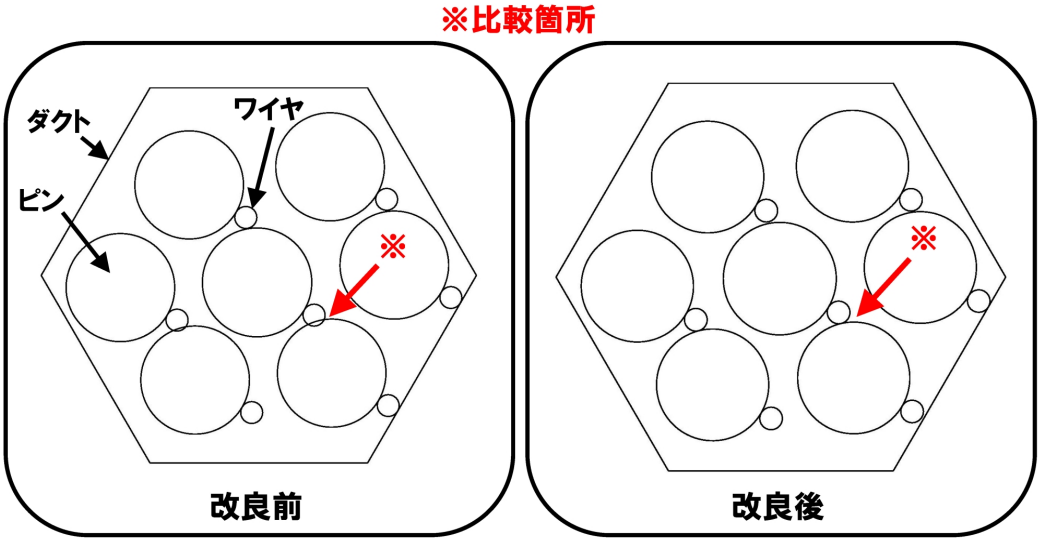


図２　接触判定処理改良前後におけるバンドル横断面図比較

4.6.3 モンテカルロコードを用いた高速炉炉物理解析

Reactor Physics Analyses on Fast Reactors by Using the Monte-Carlo Code

沼田　一幸、神　智之、大木　繁夫、杉野　和輝、横山　賢治
炉心性能評価グループ

１．利用の概要（要約）：

炉心性能評価グループでは、現在の高速炉用決定論的手法では十分な信頼性で解析が行えないような複雑な体系の計算、決定論的手法で用いるためのモデル化の検証、決定論的手法で求められた最確結果の妥当性確認のために、詳細あるいは忠実なモデル化ができる連続エネルギーモンテカルロコード MVP を用いている。MVP を用いての効率的な解析作業の進行のためには、大型計算機を用いた並列計算が不可欠となっている。以下、MVP を用いた解析作業効率化の具体例を示す。

２．利用の内容・結果：

（１）LLFP 核変換率に対する補正因子の評価

FBR 実用化戦略調査研究（F/S）では環境負荷低減方策の一環として、高速炉を用いた長寿命核分裂生成物(LLFP)の核変換が検討されている。F/S では LLFP を専用のターゲット集合体に装荷することを想定しており、その LLFP ターゲット集合体は図 1 のように LLFP（ここでは ^{99}Tc）に加えて核変換率を向上させるために中性子減速材（ここでは Zr-H）を装荷するような設計を採用している。従って、決定論的手法では、ピン配置のモデル化が難しいことに加えて、中性子減速材が混在しているために、LLFP ターゲット集合体内の中性子束の空間分布およびエネルギー分布を正確に計算することは非常に困難である。そのため、詳細解析には、ピン配置まで正確にモデル化でき、中性子エネルギーの近似も事実上ないと考えられる連続エネルギーモンテカルロコード MVP を用いている。さて、ピン毎の中性子束や反応率を適切な統計誤差で求めるには、MVP でかなり大きなヒストリー数が必要となり、シングルプロセッサでは設計担当部署から指定された納期内での計算が不可能であった。他方、HPC2500 上で並列化計算を行うことにより、計算時間の大幅な短縮が可能となった。

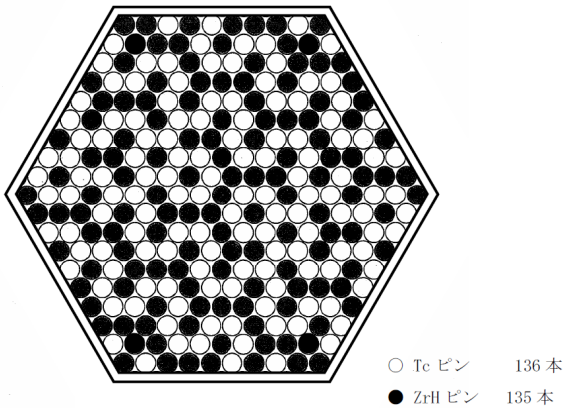


図１　LLFP ターゲット集合体のピン配置

具体的な F/S における設計への適用としては、設計計算で用いるような簡略モデルを用いた決定論的手法と忠実モデル化した MVP による結果の比を補正因子として求めておき、設計計算基準値に補正することにより設計計算最確値としている。図 2 に核変換率補正因子を決定する要因を示す。これを見ると、LLFP ターゲット集合体の非均質効果が非常に大きく、MVP

による計算が重要であることが分かる。

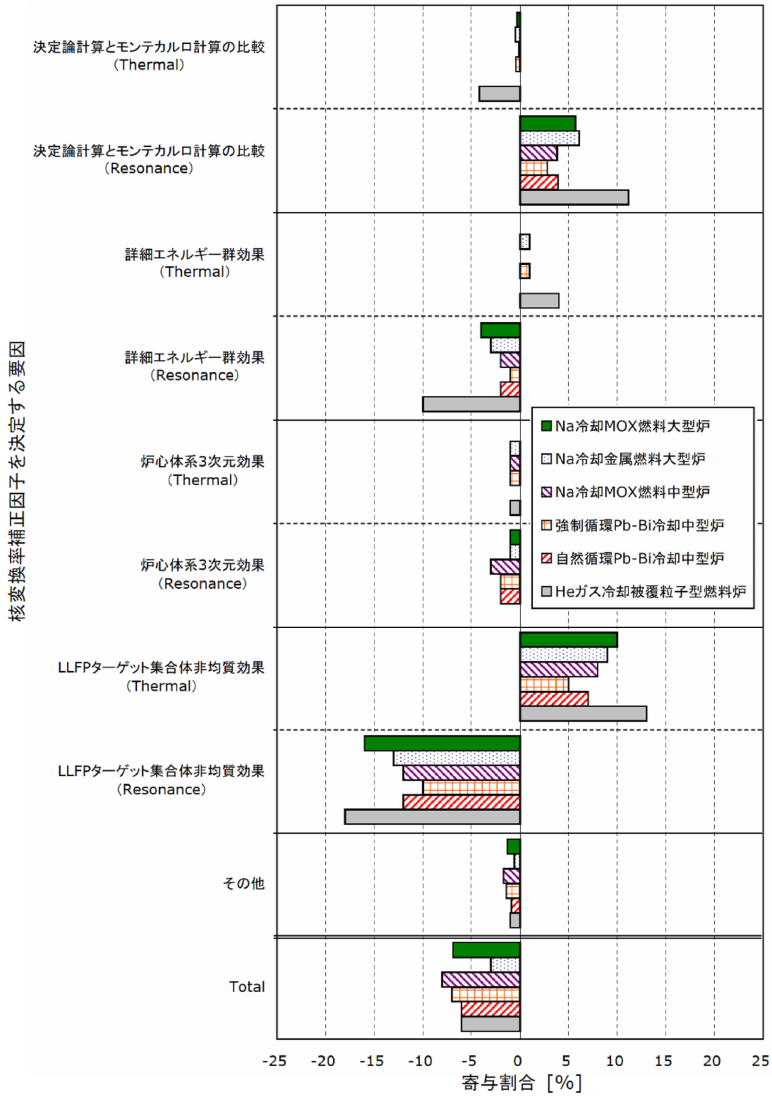


図２　核変換率補正因子を決定する要因

（２）炉物理実験ベンチマーク問題作成における検証計算

炉物理実験ベンチマークの作成のために決定論的手法による解析を進めている。決定論的手法ではモデル化誤差を考慮して可能な限り詳細なモデルとなるよう様々な補正を加えているが、これらのモデルそのものの妥当性を検証することは難しい。一方、モンテカルロ法では燃料集合体の形状を忠実に模擬して中性子エネルギーを連続で取り扱えるため、決定論的手法のようなモデル化誤差を含まない。このため、決定論的手法の妥当性を確認するための参照解として利用している。一例として表１に高速実験炉「常陽」MK-I の最小臨界炉心の臨界性解析結果を示す。決定論的手法とモンテカルロ法（MVP）の臨界性（実効増倍率）計算結果は 0.1%Δk/kk'以内で一致しており、この結果から適用した決定論的手法の妥当性を確認することができる。また、このような決定論的手法による最終結果の妥当性確認だけではなく制御棒の非均質モデル化等、決定論的手法のモデル化の検討等にも利用している。

さて、モンテカルロ法では統計誤差を適切な範囲にまで低減するために決定論的手法に比べて計算時間を多く必要とする。特にモデルの検討ではパラメータサーベイ的な繰り返し計算も必要となる。このため、効率よく検討を進める上で並列計算による計算時間の短縮が重要な役割を果たしている。

表１　高速実験炉「常陽」MK-I 最小臨界炉心の臨界性解析結果

	決定論的手法			モンテカルロ法 MVP(JENDL-3.2)
	JFS-3-J3.2R	JFS-3-J3.3	ADJ2000R	
基準計算	0.9801	0.9798	0.9818	0.9965
非均質効果(1)	-0.0004			-
メッシュ補正	-0.0021			-
輸送補正	+0.0176			-
2次元セル補正	+0.0005			-
次世代炉定数効果補正	-0.0005			-
補正後計算値	0.9956	0.9953	0.9973	0.9965
実験値	1.0011			
C/E値	0.9946	0.9942	0.9962	0.9954

(1)非均質効果は基準計算に含まれているので補正はしていない。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

- 神智之、大木繁夫：“LLFP 核変換率に対する補正因子の評価“、JNC TN9410 2005-012
- 横山賢治、沼田一幸、他：“高速実験炉「常陽」MK-I 性能試験再評価と最新炉物理解析手法に基づく解析評価“、JNC TN9400 2005-024 (2005)
- ”International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments”, NEA/NSC/DOC(2006) 1, March 2006 Edition

４．今後の利用予定：

今後も、多様な炉心概念の検討や、決定論的手法で用いるためのモデル化の検討、決定論的手法で求められた最終結果の確認のため、詳細あるいは忠実なモデル化ができる MVP を、HPC2500 上で並列化して実行することにより、効率的に業務を進めていく。

4.6.4 高サイクル熱疲労評価に向けたＴ管合流部の熱流動解析

Numerical Analysis on Fluid Mixing in Tee Piping for Evaluation of High Cycle Thermal Fatigue

上出　英樹
機器開発グループ

１．利用の概要（要約）：

温度差のある流体の混合に伴う温度変動が近傍の構造物に伝わり、熱応力を 100 万回以上も繰り返し負荷することで構造物に損傷が発生する場合がある。このような高サイクル熱疲労損傷について評価手法を確立することを目的に、T 管体系を対象に水流動試験と数値解析を実施している。解析には機構で開発した Pseudo-DNS コード：DINUS-3 を使用した。解析により T 管内の流体の温度変動を、よく予測できることを示した。

２．利用の内容・結果：

T 管体系を図１に示すように３次元直交座標系でメッシュ分割し、メッシュ数は約 60 万である。大洗研究開発センターの HPC2500 を用い、８CPU、メモリー容量４GB で解析を実施した。水平に置かれた主管（直径 150mm）からは 40℃の水が 1.46m/s で流入し、鉛直下方に取り付けられた枝管（直径 50mm）から 25℃の水が 1m/s で流入する。図１の色は 40℃を１、25℃を０とする無次元で温度を表している。枝管から流入した低温の水は主流に押されて主管の下部に沿って流れ、上からみると枝管からの噴流を障害物としたカルマン渦的な様相を呈して流下していることがわかる。

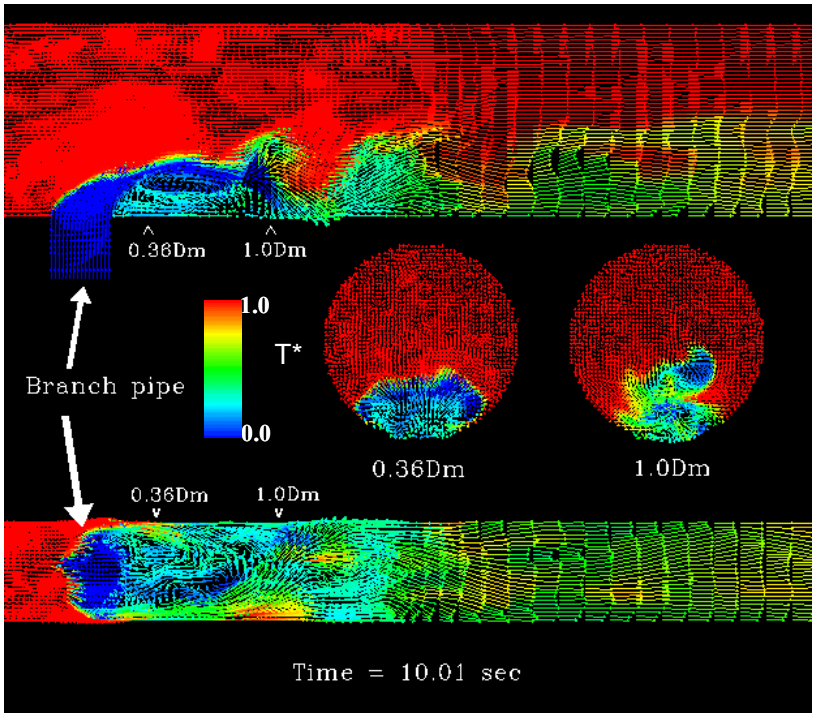
図２は合流点から 55mm 下流の位置での温度変動強度(RMS 値を主管枝管の温度差で規格化)ならびに流速の主管軸方向成分の変動強度（主管入口部平均流速で規格化）について、垂直方向の空間分布を実験と比較した結果を示しており、解析結果が実験とよく一致していることがわかる。図３に、合流点から 150mm 下流で壁面から 5mm 離れた位置での温度変動の周波数特性（Power Spectrum Density）を比較した結果を示す。解析結果は実験で見られた卓越周波数成分をよく予測できている。さらに、実験では主管の上流にエルボを有する体系にて、エルボに起因する速度変動が T 管部の温度変動を増大させることを明らかにした。数値解析でも、エルボによる影響を定性的に評価できる結果を得ている。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1. 川島 滋代、上出 英樹 五十嵐 実、
T 字管合流部における温度変動挙動に関する研究(8) － DNS を用いた枝管噴流前縁での変動原因の検討 －、2005 年日本原子力学会秋の大会、八戸工業大学、G43 (2005).
2. H. Ogawa, M. Igarashi, N. Kimura, and H. Kamide,
"Experimental Study on fluid mixing phenomena in T-pipe junction with upstream elbow,"
Proc. 11th Int. Top. Mtg on Nuclear Thermal-Hydraulics (NURETH-11), Avignon, France, Oct. 2-6 (2005).

4．今後の利用予定：

熱流動解析によりエルボで発生する２次流れとその時間変動が、エルボの下流に位置する T 管部の混合に及ぼす影響を解明する計画である。



主管中心軸を含む
垂直断面

Dm：主管内径（150mm）
Db：枝管内径（50mm）

図中の位置は主管と枝管の交点からの距離

主管中心軸より 65mm 下方の水平断面

図１　T 管内の瞬時速度分布ならびに温度分布の数値解析結果

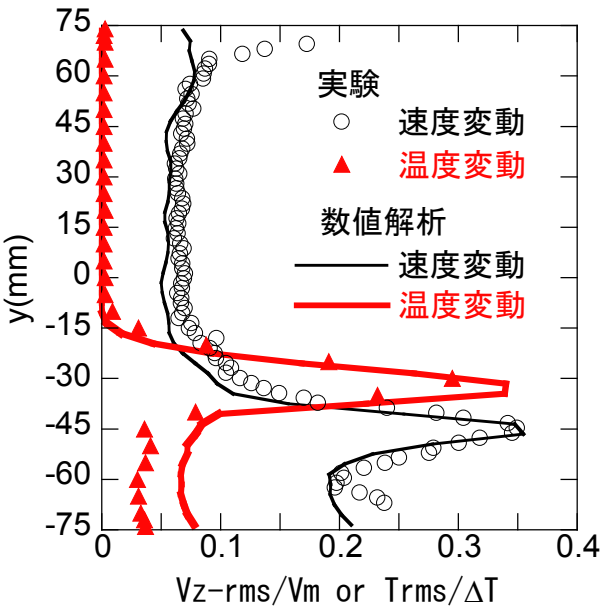


図２　速度変動、温度変動強度分布の比較

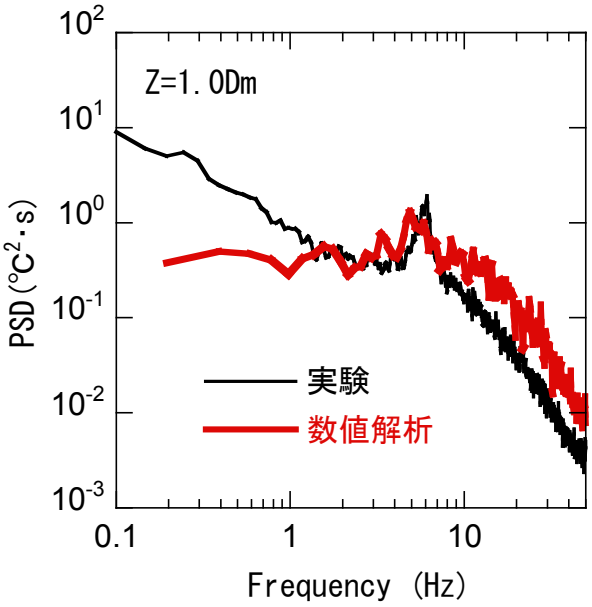


図３　温度変動周波数特性の比較

4.6.5 SIMMER-IV コードを用いた EAGLE プロジェクト炉内中規模試験解析

SIMMER-IV Calculation of the Middle-Scale In-Pile Test in the EAGLE Project

豊岡　淳一
炉心安全工学グループ

１．利用の概要（要約）：

EAGLE 炉内中規模試験の目的は、特異かつ複雑な試験体系において燃料溶融から背後にナトリウム（以下、Na）を有するステンレススティール壁（以下、SS 壁）の破損まで一貫した試験データを得ることにある。試験パラメータを選定する際、また試験結果の分析解析等では固体・液体・気体、といった異なる相状態の物質を同時に取り扱わなければならないため、JAEA において用いられている安全解析コード SIMMER の三次元版である SIMMER-IV コードを用いることとした。同コードを用いる場合、例えば FCI 現象（Fuel Coolant Interaction）などにおいては複雑な演算処理や並列計算が必要となり大型計算機の利用が不可欠である。

２．利用の内容・結果：

従来の解析では幾何形状を適切に模擬できない代わりに伝熱面積を合わせることにより諸現象の予測、熱輸送計算、解析コードの見直しを計ってきた。熱流動計算において三次元効果の役割は非常に重要なもので、特に気液二相流における対流パターンを考慮した SS 壁破損に関わる解析において、Na による SS 壁の冷却効果について知見を得た。同様に沸騰プールから SS 壁への伝熱現象が CDA（Core Disruptive Accident）評価において重要であることが分かった。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

- 2005 年 JNC 報告書（JNC TN9400 2005-036）
- 2006 年日本原子力学会　春の年会にて口頭発表

４．今後の利用予定：

現状 SIMMER-IV コードは多相多成分の取り扱いだけでなく多速度場にも対応するようになった。また解析コードの高度化も検討事項であるため、CDA 評価での解析コードにおける物理モデルの最適化を推し進めていく予定である。

参考文献：

- Sa. Kondo, et al., “Status and Achievement of Assessment Program for SIMMER-III, A Multiphase, Multicomponent Code for LMFR Safety Analysis,” Proc. 8-th Int. Top. Mtg. on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-8), Kyoto, Japan, September 30 – October 4, 1997.

- Sa. Kondo, et. al., “Phase 2 Code Assessment of SIMMER-III, a Computer Program for LMFR Core Disruptive Accident Analysis”, JNC TN9400 2000-105.
- H. Yamano, et. al., “SIMMER-IV: A Three-Dimensional Computer Program for LMFR Core Disruptive Accident Analysis, Version 2.A Model Summary and Program Description”, JNC TN9400 2003-070, August 2003.

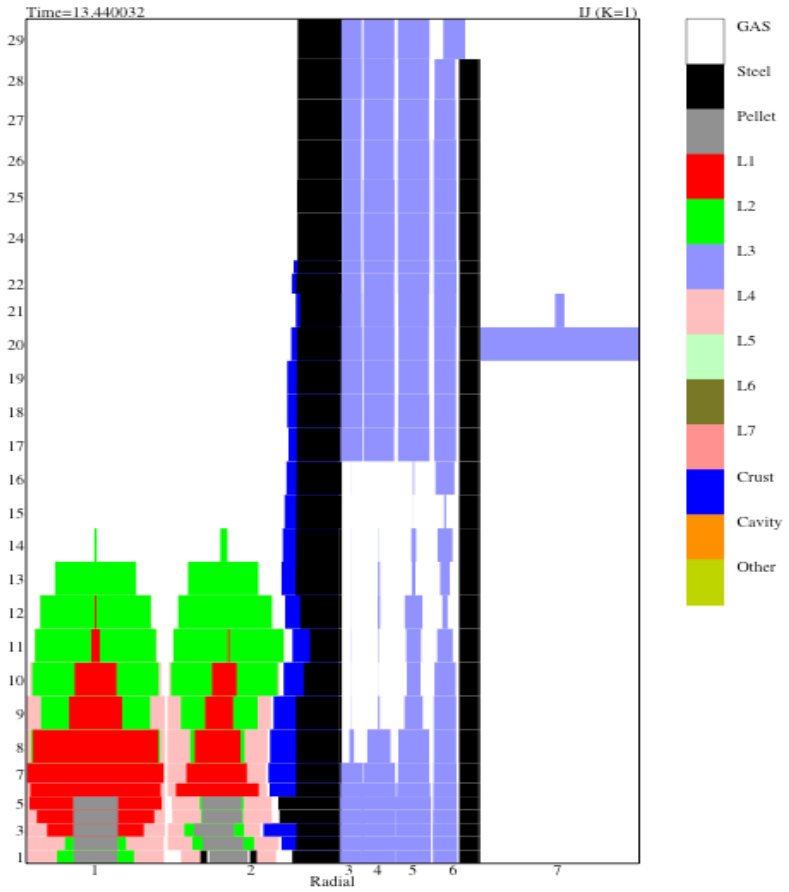


図 1.　SIMMER-IV コードを用いた解析におけるプロット図の例

4.6.6 高速炉の熱流動現象に関するシミュレーション

Numerical Simulations of Thermal Hydraulic Phenomena in Fast Reactors

大島　宏之
熱流動技術開発グループ

１．利用の概要（要約）：

熱流動技術開発 Gr では、高速炉サイクルシステムに関する熱流動課題に対して、数値解析評価手法を開発するとともに、それらを用いた現象解明、設計評価等を実施している。HPC2500 を用いて H17 年度実施した解析評価例を示す。

２．利用の内容・結果：

(1) 原子炉容器上部プレナム内カバーガス巻込みに関する研究

ナトリウム冷却高速炉の実用化において、原子炉容器内でカバーガスがナトリウム中へ巻き込まれるガス巻込み現象を防止することが重要である。このため数値解析を援用したガス巻き込み発生予測手法の開発を行っている。この開発の一環として、1/1.8 スケール上部プレナム水流動試験（1/4 セクタモデル）の数値解析を実施し、数値解析による流況再現性を検証した。解析コードには有限要素法コード SPIRAL を用いた。数値解析結果の流動可視化例を図 1 に示す。これまで様々な小スケール実験への適用解析から得られた知見をこの解析にも反映することにより、実機スケールに近い体系においても流況を適切に再現し、ガス巻き込み予測が可能であることを確認した。

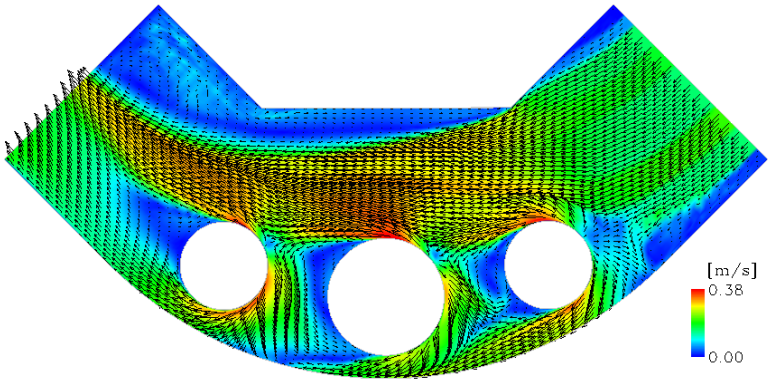


図 1　1/1.8 スケール流動試験解析結果例

(2) 蒸気発生器内伝熱管破損時影響評価手法の構築

ナトリウム冷却高速炉の蒸気発生器安全設計において重要となるナトリウム－水反応現象を機構論的なモデルを用いて解明することを目的として、多成分混相流解析コード SERAPHIM を開発した。ここではナトリウムと水の化学反応モデルを分子動力学等を用いて構築し、単純な体系にて試験評価を実施した。また、SERAPHIM で使用する各種物理パラメータに対する感度解析を行い、反応初期時における各種パラメータの効果を確認した。さらに、水酸化ナトリウムの蒸発が、長時間にわたって最高温度を抑制する効果を有することを確認した。図 2 に解析結果例として Na-水反応試験 SWAT-1R を対象とした解析における温度分布を示す。

(3) 変形燃料集合体解析手法の開発

高燃焼度燃料の熱流力特性評価を目的として、従来から用いてきたサブチャンネル解析手法に加えて、3次元詳細解析手法（有限要素法）を組み合わせたワイヤースペーサ型燃料集合体内熱流動評価手法の整備を行っている。今年度は詳細解析手法の検証の一環として液体金属(NaK)を作動流体とした模擬燃料集合体熱流動試験への適用解析や各種乱流モデルの検証解析を実施した。

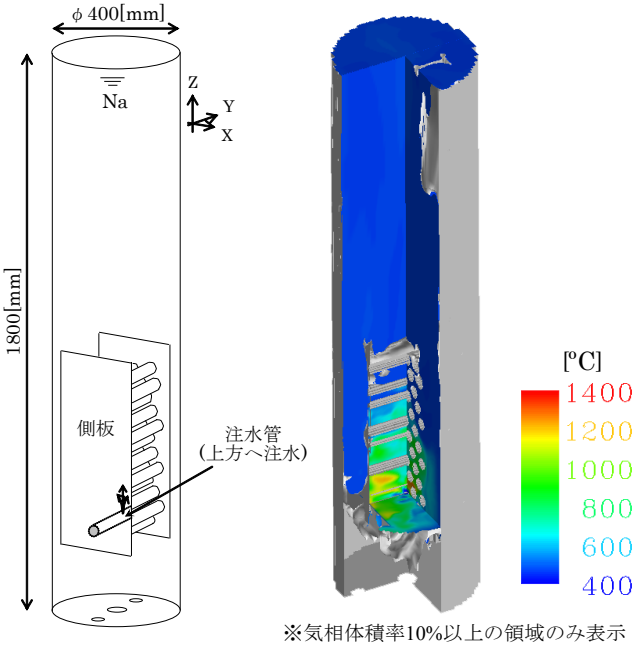


図 2　SWAT-1R 試験解析体系および高温領域の広がり（気相温度解析結果：1.0 秒後）

(4) 乱流プロモータ効果確認解析

T 字配管合流部において温度の異なる流体が混合する場合、温度揺らぎが発生し配管破損を引き起こす可能性がある。このため温度揺らぎの影響を緩和する方策として乱流プロモータを提案した。ここではその効果を定量的に把握するため、配管合流部の流れ場・温度場を準直接シミュレーションコード DINUS-3 により求めた。これより、壁面近傍の温度ゆらぎ強度の実効値が乱流プロモータを設置することにより減少するという結果が得られ、低減化効果を確認した。

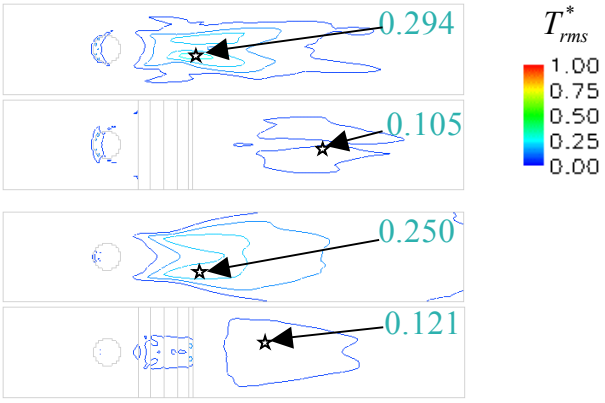


図 3 壁面近傍の規格化温度ゆらぎ強度実効値の比較（図中の数値は断面内最大値）

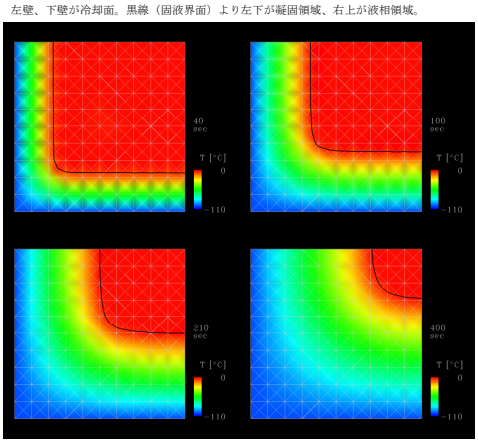


図 4 融解・凝固問題解析結果例

(5) 融解・凝固現象に対する数値解析手法の開発

核燃料サイクルには燃料や廃棄物の融解・凝固プロセスが多く存在するため、それら技術の成立性評価に適用できる融解･凝固現象の数値解析手法を開発している。本解析手法では、X-FEM 法を用いることにより固液移動界面を追跡することが可能となっている。解析手法の妥当性を検証するため、2 次元融解・凝固問題を解析し、FIELDVIEW で可視化を行った。可視化の結果、図 4 に示すような固液界面挙動が得られ、検証用データと比較すると精度良

く一致していることが分かった。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

- 内堀　昭寛, 大島　宏之, “ナトリウム冷却高速炉のガス巻込みに関する研究(5)－1/1.8 スケール液面部分モデル水流動試験の数値解析－”, 日本原子力学会 2005 年秋の大会, G51.
- T. Sakai, et al., “Study on the Gas Entrainment Design Method by CFD data on Steady Cylindrical Systems for a Sodium-cooled Reactor”, 2005 Int. Congress on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP’06), Paper No. 6409, Reno, NV USA, June 4-8, 2006.
- A. Uchibori, T. Sakai and H. Ohshima “Numerical Prediction of Gas Entrainment in The 1/1.8 Scaled Partial Model of The Upper Plenum”, Fifth Korea-Japan Symposium on Nuclear Thermal Hydraulics and Safety (NTHAS5), Jeju, Korea, 2006.
- T. Takata, A. Yamaguchi, “Numerical Methodology of Sodium-Water Reaction with Multiphase Flow Analysis”,Nuclear Science and Engineering, 150, 221-236, 2005.
- T. Takata, A. Yamaguchi, H. Ohshima, A. Watanabe, “Computational Sensitivity Study on Sodium-Water Reaction Phenomenon”, Journal of Nuclear Science and Technology, Vol.43, No.5, pp.514-525, 2006.
- 須田一則, 渡部 晃, 山口 彰, 大島宏之, “多次元コード SERAPHIM による反応領域最高温度の感度解析 －反応初期から中期における反応生成物及び温度特性－” ,日本原子力学会 2006 春の年会 要旨集 L28, 2006.
- M. Tanaka, et al., Numerical Simulation of the Flow Characteristics in T-Junction with Turbulence Promoter, Int. Conf. on Jets, Wakes and Separated Flows, P-027, Oct. 5-8, Toba-shi, Japan, 2005.
- 村上諭、田中正暁、檜原秀樹、岩本幸治、”乱流プロモータによる温度ゆらぎ緩和効果の解析的検討”、日本原子力学会 2006 年春の年会.
- H. Ohshima, Y. Imai, “Validation Study of Thermal-Hydraulic Analysis Program “SPIRAL” for Fuel Pin Bundle of Sodium-Cooled Fast Reactor”, The 11th Int. Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics (NURETH-11), Paper No. 423, Avignon, France, October 2-6, 2005.
- 内堀　昭寛，大島　宏之, “X-FEM を用いた融解・凝固現象の数値解析(1) －1 次元融解・凝固問題に対する手法開発と検証解析－”，日本原子力学会 2005 年春の年会，H45
- 内堀　昭寛，大島　宏之, “X-FEM を用いた融解・凝固現象の数値解析(2) －2 次元融解・凝固問題に対する手法開発と検証解析－”，日本原子力学会 2006 年春の年会，L42

４．今後の利用予定：

各種熱流動解析手法のモデルの高度化、大規模解析への適用性向上を図るとともに、検証解析および適用解析を実施する予定である。

4.6.7 ２次元および３次元の電磁場解析法を使った、蒸気発生器伝熱管の渦電流探傷システムの解析と最適化

Analyses and Optimizations of Eddy Current Inspection System of Steam Generator Tubes using 2D and 3D Electromagnetic Analysis

Mihalache Ovidiu Marius
ナトリウム技術グループ

１．利用の概要（要約）： In the in-service inspection of Monju steam generator tubes using eddy currents (ECT), cracks should be detected before they penetrate the steam generator (SG) tube wall. Because the eddy current probes move inside of the tube, detection of smaller defects located on the outer tube surface is a difficult task and optimized probes are required to visualize them, using ECT. Two dimensional and three dimensional electromagnetic numerical simulations are used to understand the influences of sodium layer, support plates and welds on the ECT signal and to design and optimize better ECT inspection system to detect smaller defects located on the outer SG tube surface in the specific conditions of Monju SG tubes.

２．利用の内容・結果：Numerical simulations of electromagnetic signal from defects in ferromagnetic SG tubes is extremely difficult, and accurate simulations resembling experimental measurements could be performed only for fine quadratic finite element mesh, that proper approximate the electromagnetic field at the interface SG tube-air. Two electromagnetic finite element codes were developed in the laboratory: a 2D axisymmetric approach and a full 3D code. The 2D electromagnetic code is very accurate (Fig 1) but is limited only to the axisymmetric geometries. The 3D code can simulate the electromagnetic influences of the 3D geometries of the Monju SG structure, and 3D ECT system (Fig 2) but realistic simulations, with results similar with experimental measurements could be obtained only for very fine finite element mesh. Numerical 3D simulations were parallelized to decrease the simulations time. ECT signal and visualization of the signal/noise ratio can be 3D computed for various ECT system configurations to optimize small defect detection in ferromagnetic SG tubes (Fig. 3). Experimental measurements (Fig. 4) confirmed the 3D numerical simulations and simulations-optimized ECT probe were designed to improve small outer SG tube defect detection, even when the defects are located under support plate (Fig. 4).

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

[1] O. Mihalache, T. Yamaguchi, Kouji Date, M. Ueda, T. Yamashita, “Detection Tests of Small Defects in SG Tubes using Multiple Vertical and Horizontal Remote Field ECT Coils” *„Annual Meeting of the Atomic Energy Society Japan*, Oarai, 24-26 March, 2006.

[2] O. Mihalache, “Detection of Small Defects in Magnetic SG Tubes using Multiple Vertical and Horizontal Remote Field Eddy Currents Coils”, *The 11th Monju-FBR Centre Symposium*, Tsuruga, Japan, March 7-8, 2006.

[3] O. Mihalache, T. Yamaguchi, Kouji Date, M. Ueda, T. Yamashita, “Detection of Small Defects in Magnetic SG Tubes using Multiple Vertical and Horizontal Remote Field Eddy Currents Coils”, *The 9th Symposium on Nondestructive Surface Testing*, Tokyo, Japan, February 2-3, pp. 57-62, 2006.

[4] O. Mihalache, T. Yamaguchi, M. Ueda, T. Yamashita, “3D Simulation of Detection of Small Defects in SG tubes using Multiple Vertical and Horizontal Remote Field ECT Coils” ,*Annual Meeting of the Atomic Energy Society Japan*, Hachinohe Institute of Technology, Aomori, 28-30 Sept., 2005.
[5] O. Mihalache, T. Yamaguchi, M. Ueda and T. Yamashita, ” Experimental Confirmation of 3D Numerical Simulations of Remote Field Signal from Defects in Magnetic Steam Generator Tubes” , *Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation*, Portland, Maine, 25 July, 2005.
[6] O. Mihalache, T. Yamaguchi, M. Ueda, T. Yamashita, “Advancement in 3D Remote Field ECT Simulations for Monju SG Tubes” ,*Annual Meeting of the Atomic Energy Society Japan*, Tokai University, Shizuoka, March, 2005.

４．今後の利用予定： In the future we are planning to use the supercomputer for large scale three-dimensional electromagnetic simulations to simulate the eddy current response from smaller defects located in Monju FBR steam generator tubes under ferromagnetic support plates and near weld and in the presence of sodium layers and islands on the outer tube surface. 2D electromagnetic analyses provide in most of the cases only qualitative information and are restricted to the axisymmetric geometries. Designing and optimizations of new eddy current probes will be based on the knowledge gained from three dimensional simulations, combined with a limited number of experimental measurements. The three-dimensional approach will open the possibility to include a realistic three dimensional model of the Monju complicated support plate electromagnetic influence, to study the effect of presence of multiple steam generator tubes, bundled closely together in a helical pattern, and their curvatures. Realistic finite element 3D simulations can be performed only on the parallel computer HPC2500 with memory requirements up or maybe more than 200 GB and multiples CPUS (32 or 64) to decrease the computation time.

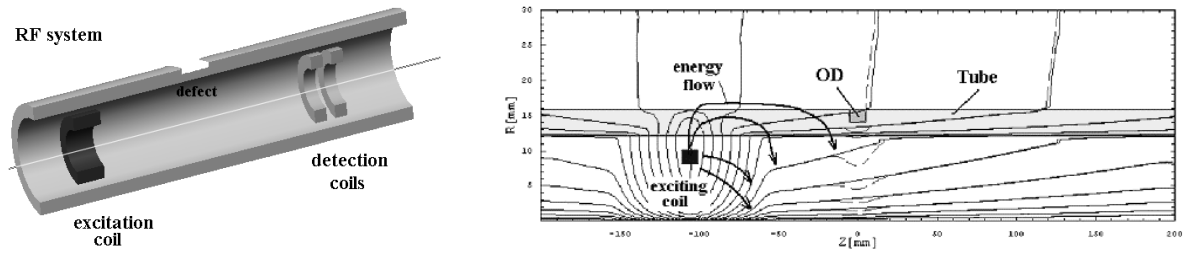


Fig. 1 Remote field eddy current system (left) and 2D simulation (right) of the electromagnetic field disturbance due to an outer defect in a ferromagnetic SG tube.

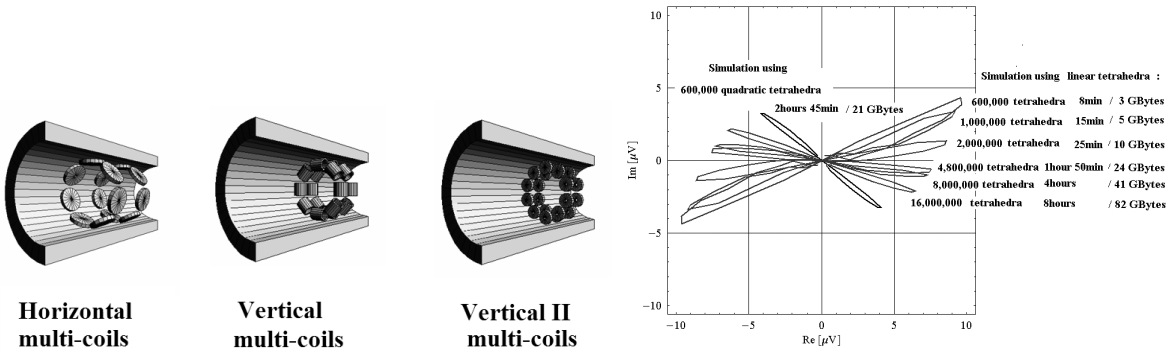


Fig. 2. Eddy current detection system types using multiple coils (left). Accuracy and computational requirements (right) for 3D numerical simulations of ECT signal using parallel processors (16 CPUs)

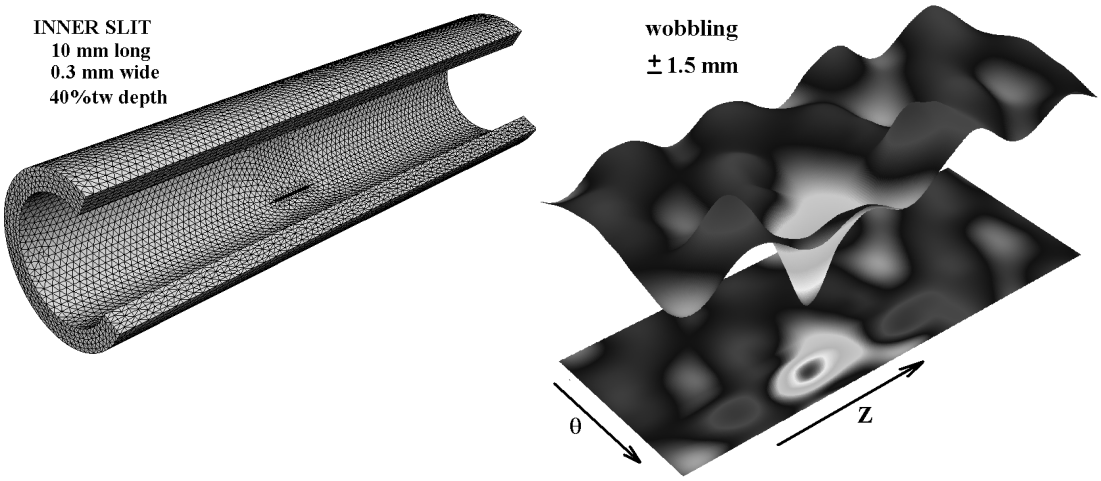


Fig. 3. Finite element mesh (left) and 3D numerical simulation of electromagnetic field disturbance in ferromagnetic SG tube for vibrations of ECT coils in both vertical and horizontal directions

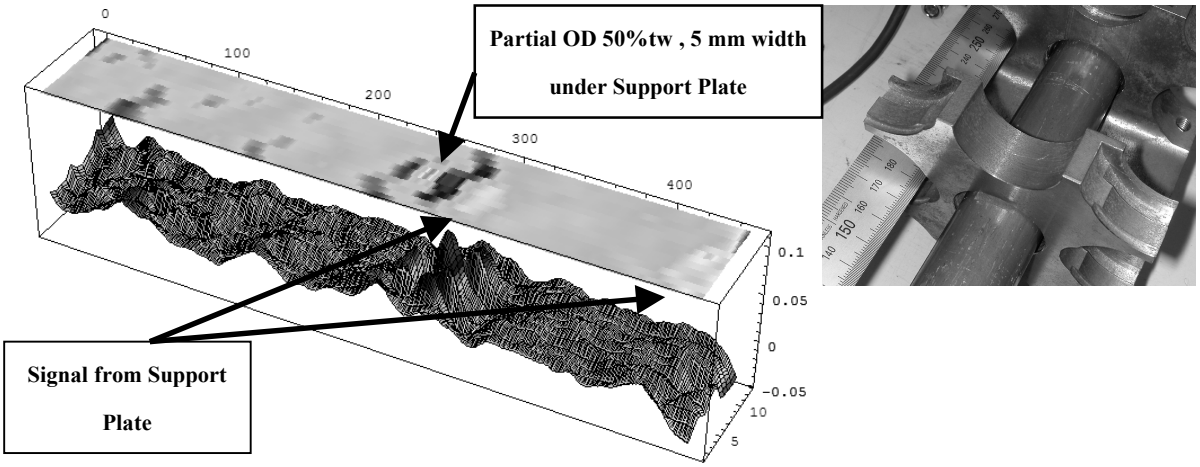


Fig. 4 Experimental measurements of detection of small outer defects in ferromagnetic SG tubes, under support plates, using 3D simulation-optimized multi-coil ECT detection system

4.7 地層処分研究開発部門

4.7.1 モンテカルロ法によるベントナイト分散系の屈曲度の計算

The tortuosity in disperse system of bentonite by Monte-Carlo simulation.

大窪 貴洋
ニアフィールド研究グループ

１．利用の概要（要約）：

放射性廃棄物の地層処分において、人口バリア材として用いられるベントナイト材料の透水性を理解するために、空隙構造を反映する屈曲度の評価が行われている。しかしながら、ベントナイト粒子の分散・凝集構造と屈曲度の関係は必ずしも明らかになっていない。そこで本研究では、ベントナイト粒子を模擬したモデル媒体中での屈曲度を求めるシミュレーションコードを開発し計算を行った。さらに、モデル媒体の計算により得られる屈曲度とNMR実験により得られるそれとの比較を行い、計算手法の妥当性を検討した。

２．利用の内容・結果：

ベントナイト材料の屈曲度を計算するために二次元媒体中を粒子が拡散するシミュレーションコード（モンテカルロ法）を開発し、低密度ベントナイトを模擬したモデル媒体を対象とした計算を行った。低密度ベントナイトのモデル媒体として、板状粒子をランダムに分散させた媒体を構築し計算を行った。この媒体を構築するにあたり、板状粒子のアスペクト比に対して十分に大きいセルを確保しなければ、媒体の屈曲度を反映する正確な計算結果が得られない。ベントナイトを構成するモンモリロナイトのアスペクト比を考慮すると、巨大なメモリ空間を必要とするため、大型計算機（HPC2500）を用いて計算を行った。平成17年度の成果として、以下のような結果を得た。

媒体の屈曲度は、多孔度の関数として表現できることが経験的に知られている。そこで屈曲度の計算結果は、多孔度で整理した。はじめに粒子の形状効果を把握するために、板状粒子のアスペクト比と多孔度をパラメータとした媒体を構築し、屈曲度の計算を行った。また、NMR測定によって得られた実測の屈曲度との比較を行った（図１参照）。図１からわかるように、多孔度が減少するにつれて屈曲度が増加する。この傾向は、板状障害物のアスペクト比が大きい程、顕著になる。

NMR実験と計算値との比較から、アスペクト比160の粒子を分散させた媒体が実験値とよく一致している。この結果は、電顕等から確認されている粘土粒子のアスペクト比とほぼ一致し、モンテカルロ法による屈曲度の計算が妥当であることがわかった。

次にアスペクト比を160で固定し、粒子の配向性を考慮した媒体について屈曲度の計算を行った。ここで、配向した媒体として、粒子の長辺方向についての傾きを90度中心の正規乱数とした角度分布により与え、媒体の中に分散させることで構築した（図２参照）。配向性のパラメータとして、正規乱数の分散値により評価し、粒子の配向性の影響を調べた。図３に

正規乱数の分散値として 3～9 を与えた媒体の計算結果を示す。また、磁場（7T）によって水中に配向して分散した粘土粒子の NMR 測定の結果についても図３に示す。図３からわかるように、分散を６として分散させた媒体についての計算結果が、実験値と良く一致し、磁場によるベントナイト粒子の配向性の程度がわかった。さらに、詳細に配向性を検討するために、NMR によって得られた粘土粒子の配向方向に対する鉛直方向と垂直方向の屈曲度の比について、計算値と比較した（図４参照）。図４からわかるように、分散として６を与えた媒体の結果が、実験値とよく一致しており、図３の結果と調和的であった。

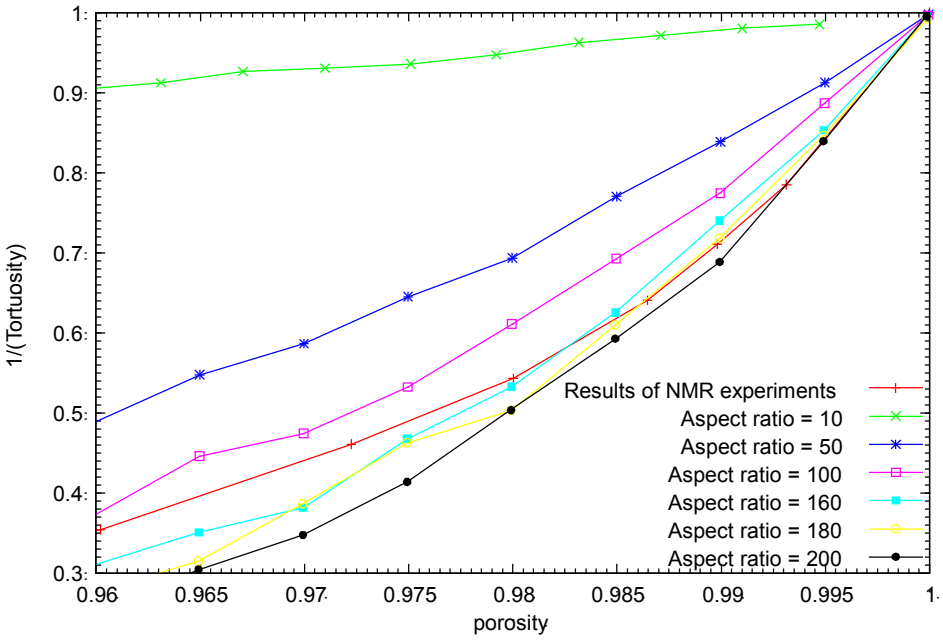


図１　アスペクト比の異なる粒子を分散させた媒体の多孔度と屈曲度の関係

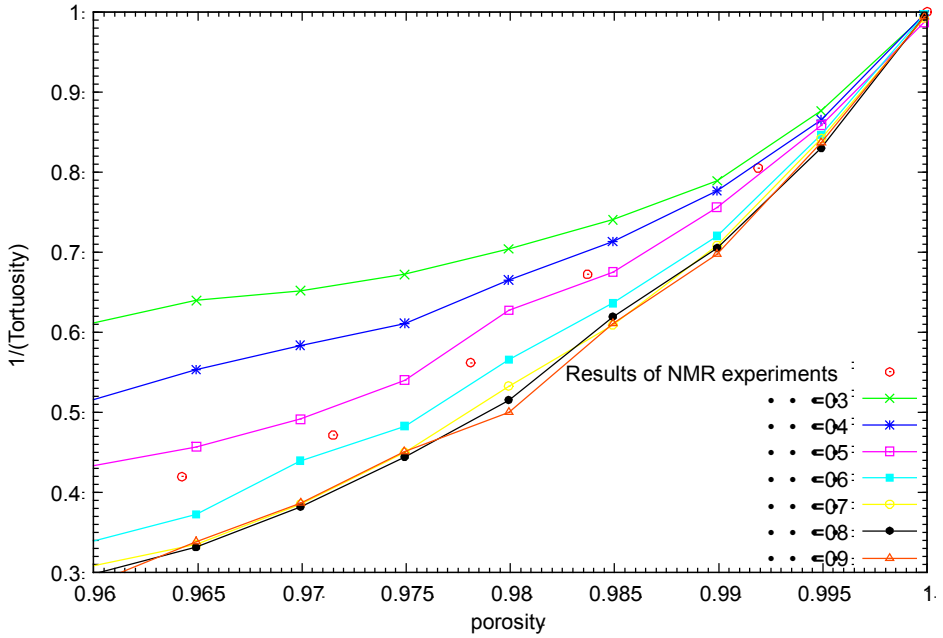


図２　配向性の異なる媒体の多孔度と屈曲度の関係

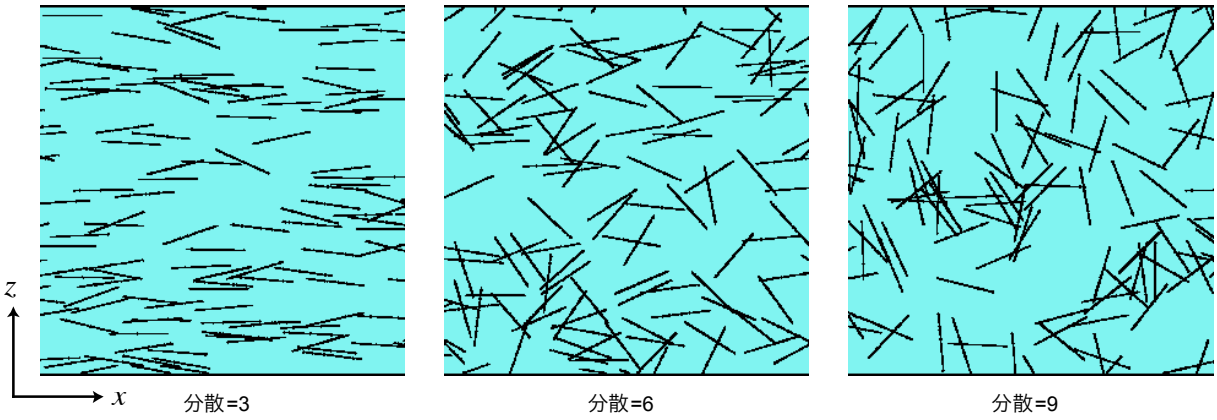


図３　角度分布を正規乱数で与えて配向させた媒体

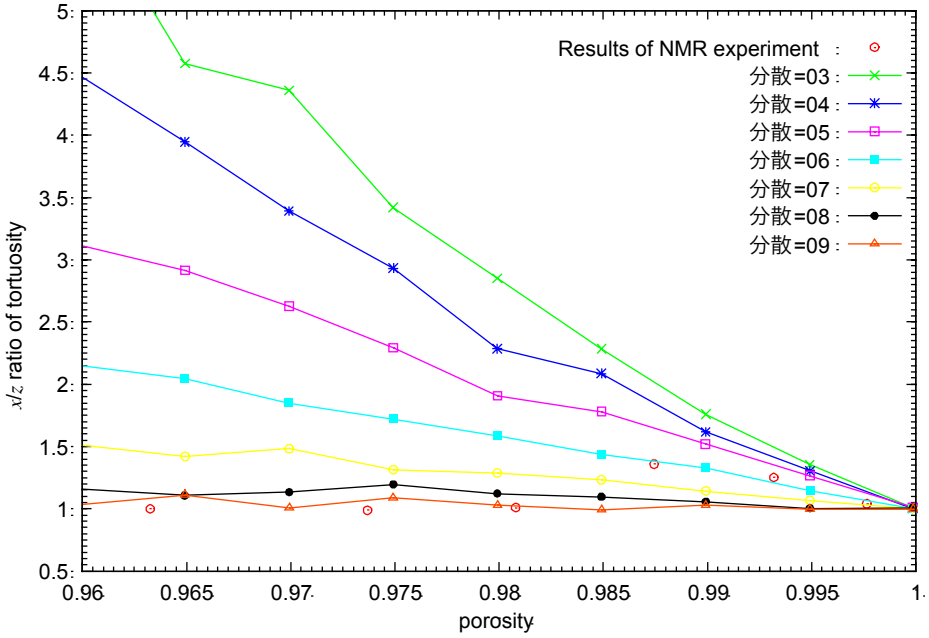


図４　配向性の異なる媒体の多孔度と屈曲度異方性の関係

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

T. Ohkubo, Diffusivity of fluids in structured plate-like obstacles by Monte Carlo simulation, Transport in Porous　Media, submitted

４．今後の利用予定：

　より低い多孔度で形成される高密度ベントナイト材料の屈曲度の評価を行うために、三次元セルを用いた計算コードの開発および計算を行い、粘土粒子の配向性や多孔度と屈曲度の関係について検討する予定である。

4.8 大洗研究開発センター

4.8.1 JMTR を用いた照射試験における中性子束、スペクトル等照射パラメータの評価

Evaluation of Irradiation Parameters such as Neutron Flux/Spectrum in Irradiation Test of JMTR

雨澤 博男、竹本 紀之
JMTR 技術課

１．利用の概要（要約）：

JMTR を用いた照射試験における中性子束、スペクトル等照射パラメータの評価を行い、JMTR 利用者に報告することを目的として原研大型計算機システムを利用している。JMTR 技術課(平成 17 年 9 月までは計画課）では、「JMTR の計画管理」のテーマのもとに、JMTR を利用した照射試験に関し、照射場の設定、照射パラメータの予測、評価等のため、3 次元モンテカルロコード MCNP による解析を実施している。利用者に報告された解析データは、軽水炉材料、核融合炉材料等の開発研究、大学研究等に生かされている。照射パラメータ評価データを利用者へ報告するにあたっては、詳細で正確なデータを迅速に提供することが求められており、そのための技術開発及び正確な評価データを迅速に提供していくためには、大型並列計算機の利用が必要不可欠である。

照射技術課（平成 17 年 9 月までは照射第 1 課）では、照射試験に必要な照射試料を入れる容器である照射キャプセルの設計において、照射試料部の温度を評価するために必要な JMTR 炉内の核加熱率(γ加熱率及び中性子による加熱率)の解析を 3 次元モンテカルロコード MCNP により実施している。利用者が要求する試料部温度で照射試験を行うためには、正確かつ詳細な核加熱率データが必要であるため、大型並列計算機の利用が必要不可欠である。

２．利用の内容・結果：

JMTR 炉心を 3 次元でモデル化（図 1 参照）し、3 次元モンテカルロコード MCNP（核データライブラリについては、中性子について FSXLIBJ3R2、γ線について MCPLIB を使用）により PC クラスタＡ（24 並列）を利用した並列計算により、JMTR を利用して行うまたは行われた中性子照射試験に関して、照射試料位置における照射パラメータを解析評価している。その結果は、利用者に報告している。なお、定常業務として解析評価している照射パラメータは、高速／熱中性子束及び照射量であるが、特に利用者からの希望により、中性子スペクトル、γ線量、γ線スペクトル、照射損傷量（dpa、He 生成量等）の評価も実施している。

MCNP により計算した中性子束の評価精度については、照射試料と共に照射キャプセルに封入され照射された中性子照射量を測定するためのフルエンスモニタとの比較による検証が行われている。図 2 に示すように 1998 年から 2001 年までに検証された MCNP による中性子束の計算値はフルエンスモニタによる測定値と比較して、高速中性子束（1MeV 以上）について±10%、熱中性子束（0.683eV 以下）について±30%となっている。

平成 17 年度においては、17 本の照射キャプセルについて、596 点の照射試料位置に対して照射パラメータの評価結果を利用者に報告した。なお、利用者へ報告した結果については、

照射利用の契約に基づいて実施されている、という性格上、機構内、機構外を問わず JMTR 技術課からその内容について紹介することは原則として不可能である。

照射キャプセルの設計に必要な核加熱率の計算は、３次元モンテカルロコード MCNP により PC クラスタＡ（24 並列）を利用した並列計算により行われている。その結果は、照射キャプセルの設計に反映されている。

平成 17 年度の JMTR 技術課における技術開発では、中性子照射により材料中に生成したトリチウムの JMTR を利用した照射試験における解析精度について、専用に開発したトリチウム測定用モニタを JMTR で照射し、その後、専用に開発した測定装置を用いて、トリチウム生成量の測定（図 3）を行い、その測定結果と、MCNP により解析したデータを比較することにより、トリチウムの生成量を-1ー+8%程度で解析評価できることを確認した。この成果は、核融合ブランケット材料の研究開発に役立てられている。

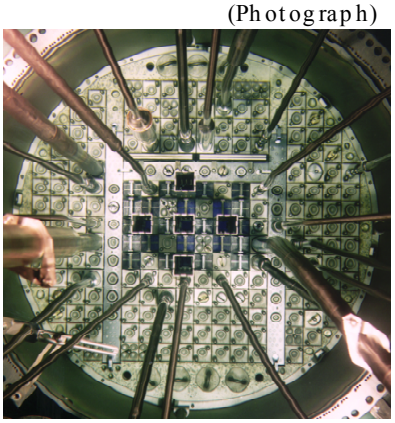
３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1) Y. Nagao, et al., Development of tritium production measurement method for in-pile tests of fusion blanket in the JMTR, Fusion Engineering and Design, vol. 81, 2006, p.619-623.

４．今後の利用予定：

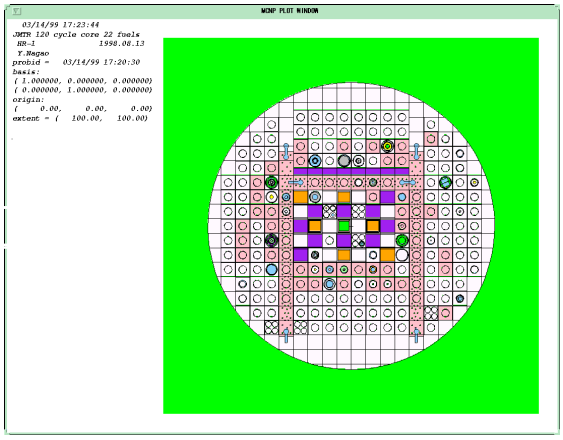
引き続き JMTR を用いた照射試験における照射パラメータの解析評価、照射キャプセル設計における核加熱率評価を継続して実施する予定である。

(Photograph)



Top view of JMTR core

(Image on Work Station)



MCNP calculation model

図 1　JMTR 炉心の MCNP 計算モデル

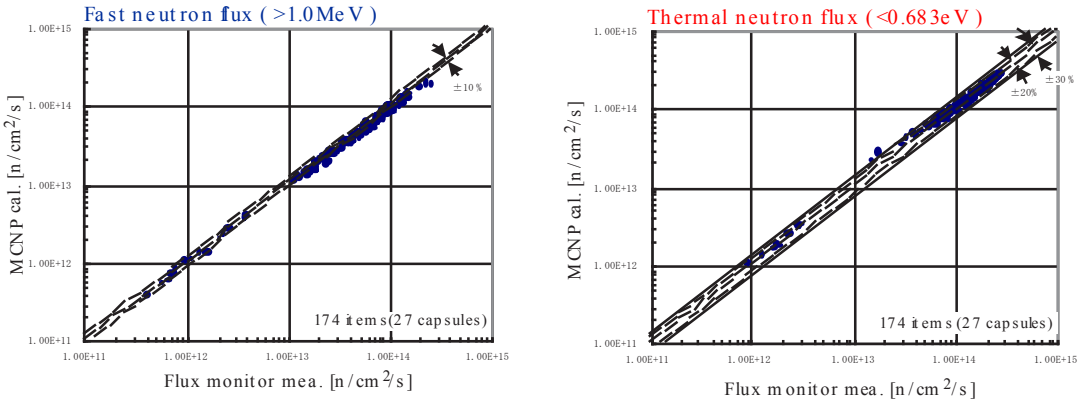


図２　MCNP で計算した中性子束のフルエンスモニタ測定値との比較（1998-2001）

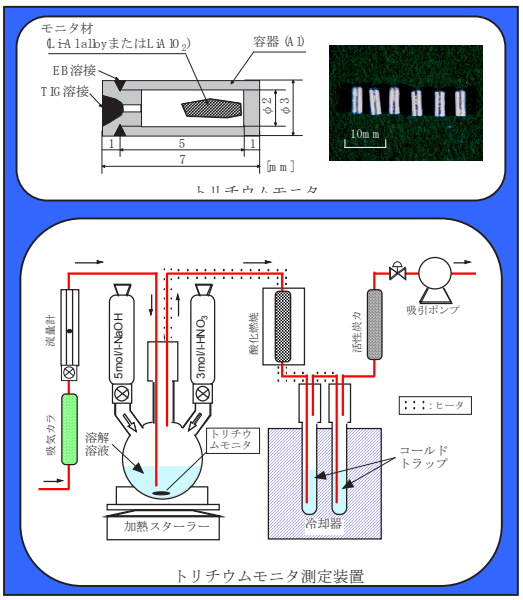


図３　トリチウムモニタとトリチウムモニタ測定装置

4.9 計算科学技術推進センター

4.9.1 大規模分子動力学法による金属中転位のピンニング挙動解析

A large scale MD simulation for the pinning behavior of a dislocation in metals

蕪木 英雄
計算科学技術推進センター

１．利用の概要（要約）：

原子炉材料の照射硬化現象のミクロな機構を探るため、分子動力学法を用いた転位と硬い粒子の相互作用を調べる数値シミュレーションを実施している。具体的には、照射欠陥を模擬した硬い粒子による転位のピン止めの限界応力を、粒子の間隔、転位拡張幅等のパラメータに対して求め、よりマクロな転位動力学シミュレーションのモデル化に使用することを目指す。分子動力学法では、個々の原子を扱うため、転位の運動範囲を確保し、現実の規模に出来るだけ近づけるためには、多大な粒子数を確保する必要があり、大規模並列計算機の利用が不可欠である。

２．利用の内容・結果：

約 120 から 230 万原子の銅及びアルミニウム結晶について、Altix3700Bx2 システム及び Prism システムの 64 プロセッサを利用した並列計算を行った。230 万原子というのは、約一辺 400Å前後の直方体である。この系においてピンニングサイトの粒子を導入し、外部からせん断応力を加えて転位と相互作用させ、ピンニングがはずれる状態、応力について詳細に調べた。その結果 17 年度は以下のような結果を得ることができた。

- 約 120 から 230 万原子を用いた分子動力学シミュレーションを行い、銅とアルミニウムにおけるピンニングメカニズムを明らかにした。（図１、図 2）
- 銅において転位が拡張している効果とピンニングの関係をはじめて明らかにした。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

（学会発表）

（ １ ） M.Itakura,T.Kadoyoshi, H.Kaburaki, S.Jitsukawa: “Molecular dynamics and quasi-two dimensional dislocation dynamics simulations on the hardening mechanism of FCC metals”, MRS(Materials Research Society) Fall Meeting, Boston, 2005.

４．今後の利用予定：

Altix3700Bx2 システム及び Prism システムを用い、より大きな体系で転位と粒子のピンニング特性について分子動力学シミュレーションを継続する予定。

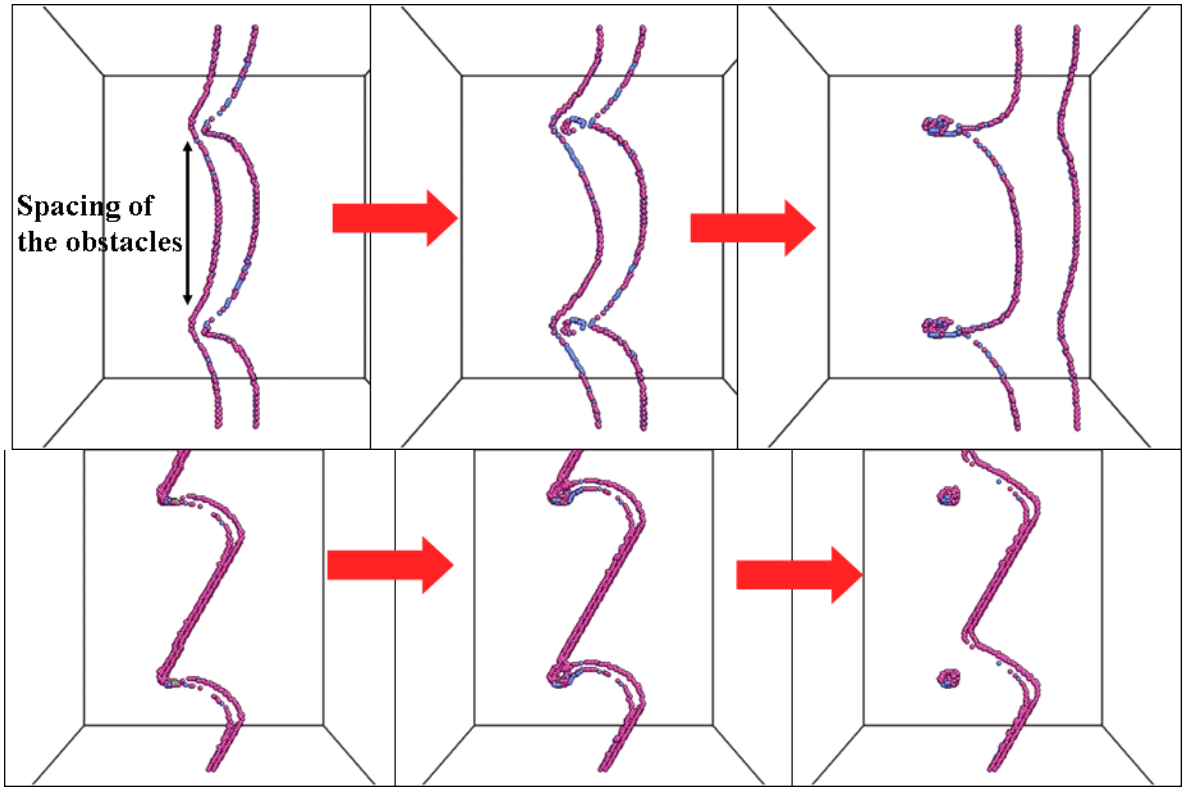


図２　アルミニウム中の刃状転位と粒子のピンニング特性

4.9.2 3 次元仮想振動台構築のための組立構造解析

Assembly structure analysis for the construction of 3D virtual vibration test bed

羽間　収
高度計算機技術開発室

１．利用の概要（要約）：

近年、原子力プラントの巨大地震に対する耐震性能の安全性確認が急務とされているが、実大実験は実施が困難であるため、計算化学を活用した新しい技術開発が必要とされている。そこで、高度計算機技術開発室では、原子力プラント全容解析のための３次元仮想振動台の構築を目指し、プラント全体の地震時の振動・変形応答を解析できる枠組み・シミュレーション技術の開発を行っている。原子力プラント全容解析を実現するために、入力から解析、出力までを部品ごとに扱い、部品間の相互作用を考慮することで全体解析を可能とする組立構造解析技術に取り組んでいる。膨大な部品点数の原子力プラント全容解析を実施するためには、莫大な計算機資源が必要となり、大型並列計算機の利用が不可欠である。

２．利用の内容・結果：

3 次元仮想振動台の構築に向けた第一歩として、大規模解析に対応するための部品組立有限要素解析手法の提案および解析ソフトウェアの実装を行った。従来の大規模解析においては、解析よりもむしろメッシュデータの生成ならびに境界条件の設定といったプリプロセス部がボトルネックになっていた。そこで、工学設計との整合性を向上し、メッシュ生成の煩雑さを緩和できる組立構造解析の枠組みを提案・実装した。従来は、複数の部品を連続に接合した一体物としてメッシュを作成していたのに対し、本手法においては部品ごとにメッシュ生成を行い、解析する。部品間の接合作用については解析時に剛性ばねを導入することで解決した。また、原子力プラントの全容解析には膨大な部品点数が必要となるため、異機種計算機間通信ライブラリ STAMPI を導入し、部品を ITBL グリッドに展開する分散並列解析手法の提案・実装も図った。提案手法・ソフトウェアの適用例として、大洗研究開発センターにある高温工学試験研究炉（HTTR）の炉および冷却系統の外殻構造を対象にし、静応力解析を実施した。17 年度は以下のような結果を得ることができた。

- 手法の妥当性を検証するため、図 1 に示すような半球形くぼみを有する弾性体の引張問題を解いた。くぼみ周辺およびそれ以外の領域を 2 部品として考慮したところ、部品接合による精度低下は見られず、応力分布および集中度は光弾性試験で得られたものとよく一致した。
- 部品間に導入した剛性ばねの強さと線形ソルバーの時間および接合精度間に関するトレードオフ関係を明らかにできた。前処理に対角ブロック LU 分解、ソルバーに共役勾配法を適用し、剛性ばね強さを弾性係数の 10 倍程度に設定することで、従来の一体解析と比較して 1.5～3 倍の計算時間内に収められ、部品間変位については小数点以下 8 桁まで

一致させることができた。

- 図 2 に示すような HTTR 実構造問題に対し、Altix の 128CPU を用いた大規模並列計算を実施した。解析規模で 2300 万自由度にも上る問題を約 8 時間で解くことができた。変位ならびに相当応力分布を可視化したものを図 3 に示す。本手法・解析ソフトウェアの性能を Altix 上において調査したところ、128CPU 利用時効率を元にした際、512CPU 利用時において 75.4%の並列化効率を保てることが分かった（表 1)。これらの結果、プラント全容解析の実現に向けた技術革新が図れる可能性を見出せた。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

論文等：

- 西田、松原、田、羽間、鈴木、中島、谷、原子力プラントのための3次元仮想振動台の構築、日本原子力学会　論文集、投稿中

プレス等：

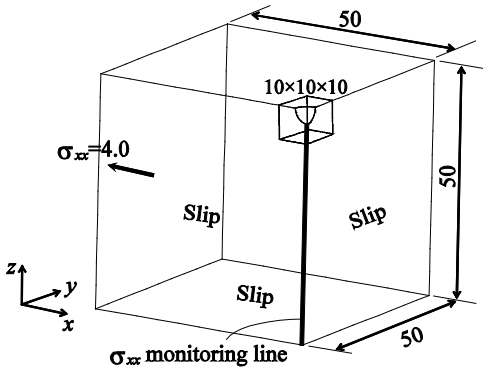
- 「大規模システムの地震応答解析で大規模解析技術コンクールに入賞」,日本原子力学会誌, Vol. 48, No 2, pp. 8-9, 2006.

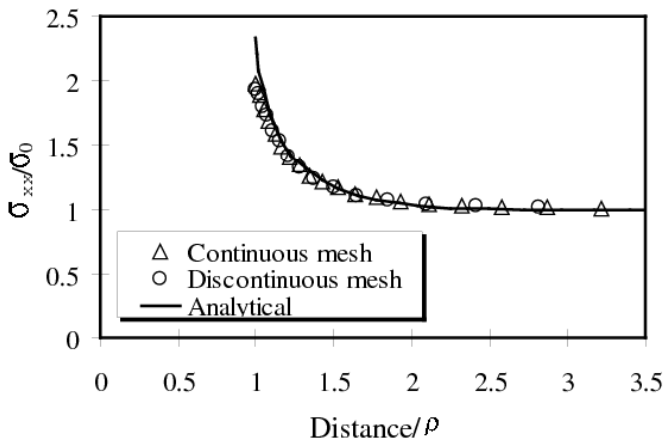
受賞：

- SC|05 Analytics Challenge － Honorable Mention

４．今後の利用予定：

今年度は静弾性問題を対象とした。来年度は動弾性問題を扱う予定である。具体的には、実際の地震波データを入力とした際の HTTR 構造の応答をシミュレーションにより追跡する予定である。動的問題はさらに計算資源を必要とするため、Altix の 512CPU ならびにさらなる ITBL グリッドの活用を目指す。





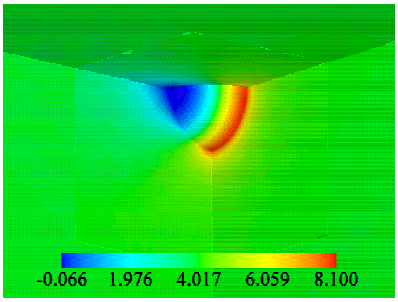


図１　半球形くぼみを有する弾性体の引っ張り

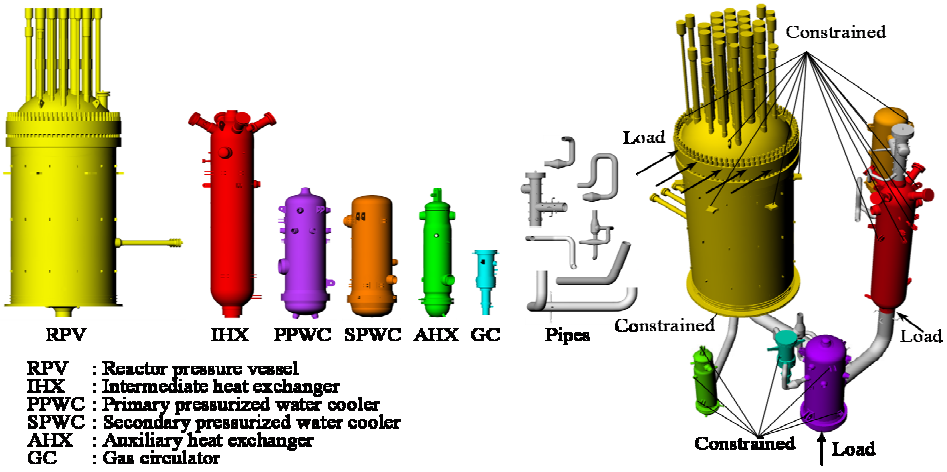


図２　HTTR 構造および問題設定

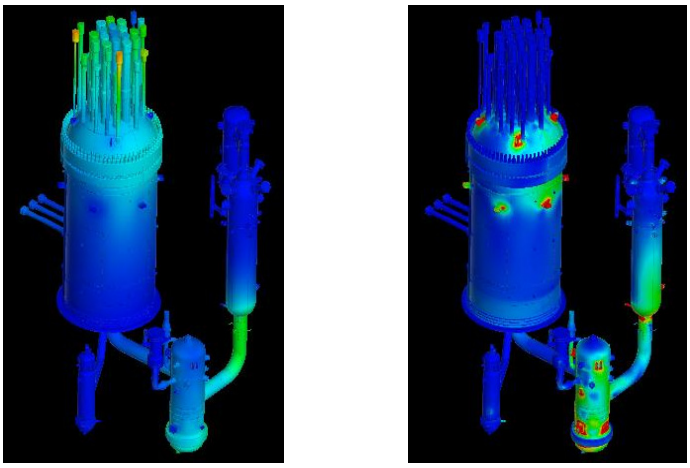


図３　シミュレーションより得られた HTTR 構造の
変位分布（左）および相当応力分布（右）

CPU 数	経過時間（秒）	並列化効率　（%）
128	5604.4	100.0
256	2923.8	98.4
512	2004.8	75.4

表 1　提案手法の Altix 上での並列化効率

4.9.3 金属ガラスのせん断変形に関する分子動力学法シミュレーション

Molecular Dynamics Simulation of Shear Bands in Metallic Glass

清水 大志
シミュレーション技術開発室

１．利用の概要（要約）：

シミュレーション技術開発室では、原子力材料の物性に関してミクロからマクロに至るマルチスケーリングモデル手法を構築するための研究開発を推進している。このうち、ミクロスケールに位置する分子動力学(MD)法における大規模シミュレーション技術の実証テーマとして、金属ガラスの物性研究、特にその変形機構の解明をとりあげた。なお、金属ガラスは耐腐食性、耐照射性などが優れているなどのユニークな性質を有しており、原子力材料としての応用可能性の探求を念頭に置いている。本研究では、多数の原子を用いた系に対し大規模かつ長時間の MD 計算を行なうことから、大型並列計算機システムの利用が必要不可欠である。

２．利用の内容・結果：

並列分子動力学ステンシル(PMDS)を応用し、レナードジョーンズ(LJ)モデルによる 2 元素系、埋め込み原子法(EAM)ポテンシャルによる 2 元素系および EAM ポテンシャルによる 5 元素系の並列 MD シミュレーションコードを作成した。これらのモデルでは原子間相互作用にカットオフを用いることから、本コードは並列化手法として領域分割法を採用し、高い並列化効率を得ている。プログラム実行においては、東海 Altix3700、PC クラスタ A/B、那珂 Prism および東京 pSeries システムを利用し、16～128CPU による並列計算を実施した。また、大規模な原子データの可視化解析を行なうため、可視化ソフトウェア AtomEye の並列化を行なった。これによって MD 計算と結果の解析を同じ並列計算機上で実行出来るようになり、シミュレーション研究の効率が大幅に向上した。

ほとんどの金属ガラス(BMG)においては、約 2%の単軸歪ε_yによりせん断帯が形成される。本研究では、この現象の臨界条件が萌芽的せん断帯(ESB)の進展により、生成にはよらないという理論を提案する。ESB が進展するためには、遠方にて加えられたせん断応力$\tau_\infty \approx E\varepsilon_y/2$が準定常状態摩擦力を越えていなければならないが、このときのせん断局所化への抵抗は極めて高速、すなわち原子振動と同程度のタイムスケールをもつような散逸プロセスによることから、分子動力学(MD)シミュレーションによって追跡することが可能となる。この理論に基づいて前述の様々な系(各々2 万原子)について計算を行なった結果、ε_y の予測として 2.1～2.9%という範囲の値が得られた。

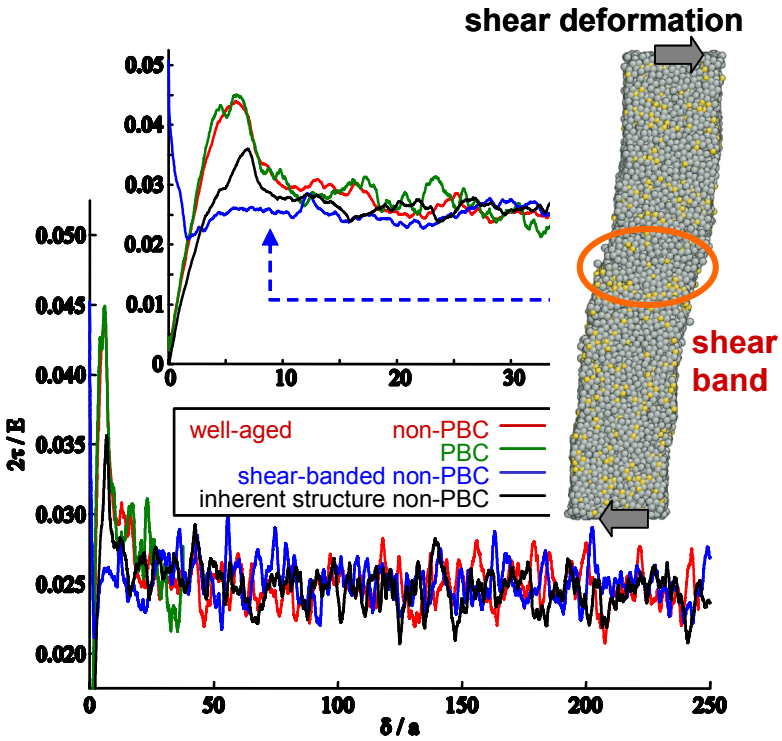
３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

[1] F.Shimizu, S.Ogata, H.Kaburaki and J.Li, “Approaching the Universal Yield Point of Bulk Metallic Glasses from Molecular Dynamics Simulations”, Materials Research Society 2005 Fall Meeting, Boston (MA) USA, November 2005.

[2] J.Li, F.Shimizu, S.Ogata and H.Kaburaki, “Approaching the Universal Yield Point of Bulk Metallic Glasses from Molecular Dynamics Simulations”, TMS 135th Annual Meeting and Exhibition, San Antonio (TX) USA, November 2005.
[3] F.Shimizu, S.Ogata and J.Li, “Yield Point of Metallic Glass”, Acta Materialia (accepted 2006).

４．今後の利用予定：

金属ガラスの変形におけるせん断帯進展のダイナミクスを捉えるための、より大規模な体系(～2 千万原子)を用いたシミュレーションに着手しており、これを継続して実施する予定。



図：LJ 系の応力-歪曲線とせん断変形のスナップショット。液体を急冷して得られたサンプルにおいても、良くエージングされたガラスと同じ抵抗力(応力)の値が得られた。

4.9.4 大規模分子動力学法による金属中の照射欠陥の挙動解析

A large scale MD simulation for the behavior of an irradiation defect in metals

門吉　朋子
シミュレーション技術開発室

１．利用の概要（要約）：

シミュレーション技術開発室では、原子炉材料の照射硬化現象についての基礎研究として、分子動力学法を用いた数値シミュレーションを実施している。具体的には照射によって生成される不動な転位ループが可動な完全転位ループに遷移する条件について調べている。分子動力学法では、個々の原子を扱うため、転位の運動範囲を確保し、現実の転位密度に近づけるためには、多大な粒子数を確保する必要があり、大規模並列計算機の利用が不可欠である。

２．利用の内容・結果：

約 180 万原子のアルミニウム結晶について、Altix3700Bx2 システム及び Prism システムの 64 プロセッサを利用した並列計算を行った。180 万原子というのは、約一辺 300Å前後の直方体であり、最大で直径約 130Åの転位ループを一個挿入することができるが、この系において外部からせん断応力を加え、また、温度を与えることにより転位ループの可動化について詳細に調べた。その結果 17 年度は以下のような結果を得ることができた。

- 約 180 万原子を用いた分子動力学シミュレーションを行い、不動転位ループが可動になる遷移条件とメカニズムを明らかにした。
- 照射欠陥が可動な転位へ遷移する原因が温度であることをはじめて明らかにし、その遷移臨界温度を決定した。（図１）

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

（論文発表）

（１）T.Kadoyoshi, H.Kaburaki, F.Shimizu, H.Kimizuka, S.Jitsukawa, J.Li: “Molecular dynamics study on the formation of stacking fault tetrahedara and unfaulting of Frank loop in fcc metals”, to appear in Act.Mat.

４．今後の利用予定：

Altix3700Bx2 システム及び Prism システムを用い、より大きな体系で転位ループと転位との相互作用について分子動力学シミュレーションを継続する予定。

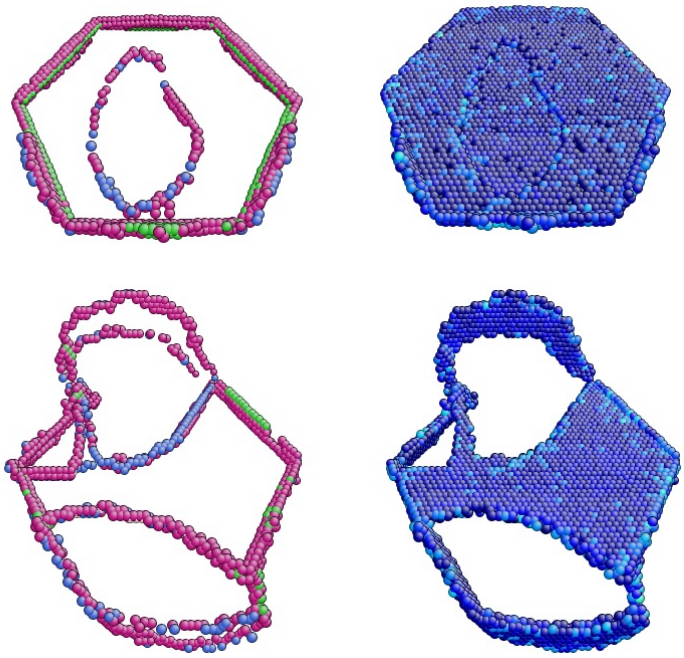


図１　格子間原子型不動転位ループの完全転位ループへの遷移過程

4.9.5 隙間腐食における溶液化学の格子ボルツマンシミュレーション

Lattice Boltzmann Simulation of Solution Chemistry for Crevice Corrosion

海老原　健一
シミュレーション技術開発室

１．利用の概要（要約）：

原子力材料におけるき裂進展の機構解明のためのマルチスケーリングモデル手法の構築の一環として、応力腐食割れの要因の１つである隙間領域における水質変化のシミュレーションを実施した。このシミュレーションにおいて、水質変化は、化学物質の反応を伴う移流拡散過程、及び金属表面の電気化学反応過程に従い、また隙間領域では、隙間入り口の大きさと深さが著しく異なる。このため、シミュレーションは、短い時間間隔と細かい空間格子による長時間の計算が要求される。シミュレーション手法は、粒子的手法であり、複雑形状境界や境界形状変化の導入が比較的容易とされる格子ボルツマン法を用いた。さらに、シミュレーション結果の妥当性を検証するため、実験結果との比較が必要となる。これらのことから、大型計算機による長時間かつ大規模な計算が、多数の異なる条件の場合について必要となる。

２．利用の内容・結果：

計算は、主に、並列計算機 Altix3900 の 8CPU 並列、及び PC クラスタ A タイプ Altix350 の 2CPU 並列によって実施しました。計算手法は、隙間内の化学物質の移流拡散の計算、及び電位の計算については、2 次元の格子ボルツマン法を、化学反応の計算は、VCS（Villars-Cruise-Smith）のアルゴリズムを用いた。電位及び化学反応の計算は、収束計算であることから、多くの計算時間を必要とした。計算条件及び結果を以下に示す。

計算領域は、三方を壁境界、一方を化学物質の出入を許す境界とする２次元矩形領域とした。化学物質は 15 種類、化学反応は 10 種類とした。壁境界において、酸化膜が壁を覆った場合の腐食電流と、金属元素の溶け出す割合を与え、領域内で平衡に達するまでの時間、及びそのときの化学物質の濃度分布(図１)と電位分布(図２)を計算した。これらの結果は、隙間入り口の大きさと深さの比に関係することから、隙間の深さを変化させた計算を行い、隙間深さの実験条件への外挿によって、平衡に達するまでの時間を見積もった(図３)。また、溶液のｐＨ(水素イオンの濃度)についても、深さを大きくすると一定値に近づくことを確認した(図４)。その結果、これらの値は、実験の結果とほぼ同程度の値になることが分かった。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

Ken-ichi Ebihara and Hideo Kaburaki, “Lattice Boltzmann Simulation of Solution Chemistry for Crevice Corrosion”, Mathematics and Computers in Simulation (印刷中)

４．今後の利用予定：

計算領域をき裂内に近い形状に拡張し、また境界条件等を検討し、より現実に近い条件における化学物質の分布等を見積もれるようなモデルに発展させることを計画している。

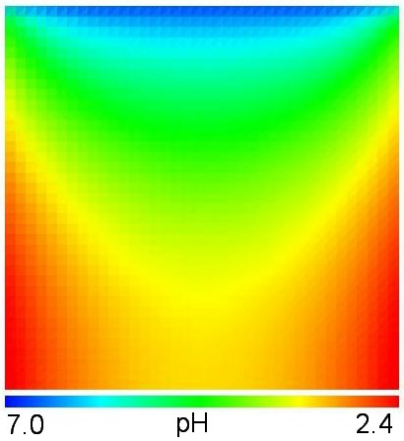


図 1：ｐＨ分布（水素イオン分布）
（上：隙間口、下：隙間底）

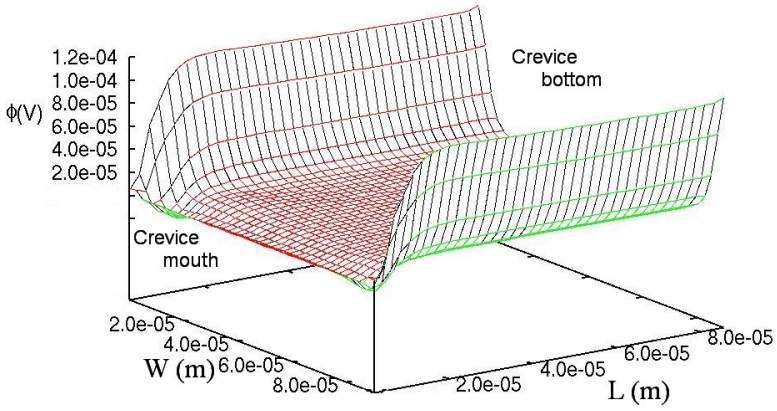


図 2：電位分布

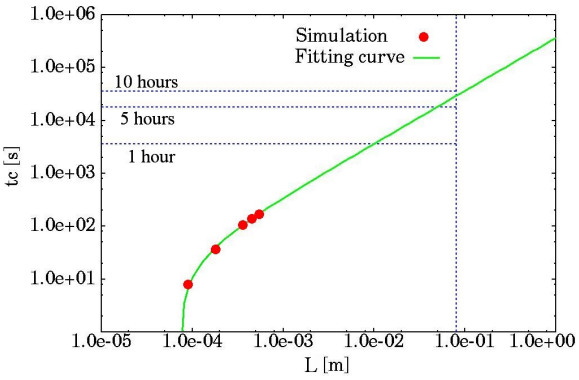


図 3：平衡状態までの時間（外挿による推定）

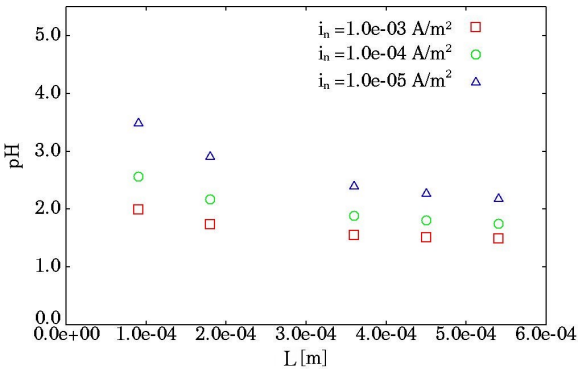


図 4：ｐＨと深さの関係（ｐＨの収束）

4.9.6 第一原理計算による金属における不純物の粒界偏析と脆化の研究

First-principles study on the grain boundary embrittlement of metals by impurity segregation

山口　正剛
シミュレーション技術開発室

１．利用の概要（要約）：

炉心シュラウドにおける応力腐食割れのメカニズムや、高経年化に伴う原子炉圧力容器鋼のリンの偏析による粒界脆化メカニズムに対して、その解明に貢献すべく取り組んでいる。具体的には、ニッケルや鉄の結晶粒界に対する様々な不純物元素や溶質元素の影響（粒界偏析、脆化）を、「第一原理計算」によって調べている。第一原理計算とは、量子力学の基本方程式であるシュレーディンガー方程式を数値的に解いて物質の電子構造を計算する手法である。このため膨大な計算時間が必要であり、大型並列計算機の利用が必要不可欠である。

２．利用の内容・結果：

Bcc Fe のΣ3(111)傾角対称粒界に対して、圧力容器鋼に含まれる約１０種程度の元素（C, N, O, Si, P, S, Cr, Mn, Ni, Cu, Mo 等）の影響を第一原理計算により調べた。その結果、経験事実の通り、C は粒界を強化すること、P,S は粒界を脆化させること、などの結果が得られた。また、Cu は粒界に偏析するにとどまらず、Cu 同士で結合して析出しやすい傾向があるが、その傾向も計算で示すことができた。さらに、従来経験的にもよく分からなかった事柄を示した。たとえば酸素原子は粒界で酸化物を作って強度低下をもたらすことは知られていたが、酸化物を作る以前の酸素原子が鉄の粒界に偏析したときにも粒界強度の低下が大きいこと、などを示すことができた。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

学会発表等：

「軽水炉材料の照射損傷機構に関する研究会」電中研（東京）2005.10.28
山口正剛、西山裕孝、志賀基之、蕪木英雄
「リン偏析による鉄の粒界脆化－第一原理計算による研究－」

日本金属学会、2006 年春期学術講演大会：早稲田大学（東京）2006.3.22
山口正剛、西山裕孝、志賀基之、蕪木英雄
「硫黄の偏析による鉄とＮｉの粒界脆化－第一原理計算による研究－」

2005 Materials Research Society, Fall Meeting: 2005.11.28 米国ボストン
M. Yamaguchi, Y. Nishiyama, M. Shiga, H. Kaburaki
“First-principles calculations on the embrittlement mechanism of bcc iron (Fe) grain

boundaries by impurity segregation”

論文：

M. Yamaguchi, M. Shiga, H. Kaburaki: Science 309(2005)1677d

“Response to Comment on Grain Boundary Decohesion by Impurity Segregation in a Nickel-Sulfur System”

４．今後の利用予定：

引き続き、様々な元素の影響を計算して調べていく予定である。

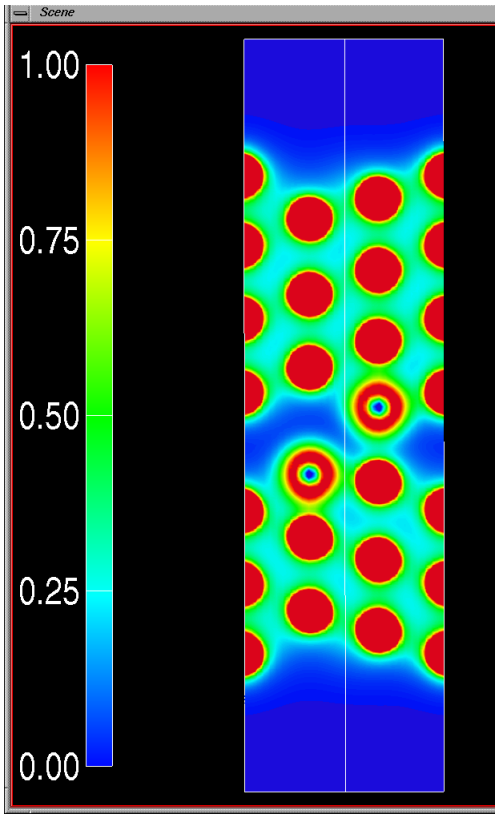


図１：FeΣ3(111)粒界中に硫黄(S)が偏析したときの電子密度分布。

4.9.7 水素化マグネシウムを基にした水素貯蔵材料のデザイン

Design of MgH_2-based Hydrogen Storage Materials

ディニョ　ウィルソン
大阪大学大学院工学研究科精密科学・応用物理学専攻
機構担当者：金澤　昌之（情報システム利用推進室）

１．利用の概要（要約）：

固体高分子形燃料電池(PEFC)を自動車に搭載する際，問題になるのが，「如何に大量の水素を安全に効率良く貯め込むか？」という，いわゆる水素貯蔵技術の確立である．水素貯蔵技術として，高圧水素，液体水素，水素吸蔵合金，炭素材料など，これまでに非常に多くの検討がなされてきたが，恐らく他に妥当なものがないという理由で，高圧タンクに水素を圧縮させるという方法に落ち着いているのが実状である．しかし，この方法は燃料電池自動車の普及を想定したとき，非常に危険な方法であることは言うまでもない．そのような背景の中，マグネシウムは，高水素吸蔵能(7.66 wt%)，軽量，低コストであるという理由から水素貯蔵材料として，未だなお有力視されている．しかしながら，高水素放出温度(>573 K)・低反応速度という欠点があり，これを如何に克服するかが，マグネシウムが水素貯蔵材料となりうるかどうかの生命線となっている．そこで，我々は，その水素化物 MgH_2 からの水素分子の脱離反応を密度汎関数理論(DFT)に基づく第一原理計算により解析し，続いて，水素放出温度低減を図るために，実験的によく検討されている遷移金属とのメカニカルアロイングによる効果を検討してきた．さらに，これまでの研究により得られた知見から，水素化マグネシウムをベースにした高機能性合金水素化物をデザインした．

２．利用の内容・結果：

・水素化マグネシウムと 3d 遷移金属との相互作用

水素化マグネシウムと 3d 遷移金属とのメカニカルアロイングされた系を想定し，水素化マグネシウムと 3d 遷移金属との界面における相互作用を検討した結果，Sc または Ni を混合した際に，水素放出温度が 500 K まで下がることが分かった．これは，d 電子の詰まり方が少ないまたは多いことが，水素化マグネシウムとの電子の授受の観点から好都合であることに起因している．

・水素化マグネシウムを基にした合金水素化物のデザイン

Mn または Fe を水素化マグネシウム間に挿入したり，水素化マグネシウムを正にイオン化させたりすることにより，水素化マグネシウムのスピン分極が誘引され，元々イオン性の Mg-H 結合が非常に弱くなることが分かった．また，Mn または Fe の添加量，および水素化マグネシウムの電荷量を上手く制御することにより，水素放出温度を実用化レベルと言われる 400 K に調節できると考えられる．

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1. Muneyuki Tsuda, Wilson Agerico Dino, Hideaki Kasai and Hiroshi Nakanishi,
“Magnetized/charged MgH_2-based hydrogen storage materials”,
Applied Physics Letters 86 (2005) 213109.

2. Muneyuki Tsuda, Wilson Agerico Dino, Hideaki Kasai, Hiroshi Nakanishi and Hiroshi Aikawa,
“Mg-H dissociation of magnesium hydride MgH_2 catalyzed by 3d transition metals”,
Thin Solid Films 509 (2006) 157.

４．今後の利用予定：

これまでの研究から得た知見を基に，新規な水素貯蔵材料を DFT に基づいた第一原理計算により，継続してデザインしていく予定である．

4.9.8 Pt と CO の相互作用における合金化・歪みに関する第一原理計算

Ab Initio Study of Alloying and Straining Effects on CO Interaction with Pt

津田　宗幸
大阪大学大学院工学研究科精密科学・応用物理学専攻
機構担当者：金澤　昌之（情報システム利用推進室）

１．利用の概要（要約）：

クリーンエネルギー源である水素を燃料として発電する固体高分子形燃料電池(PEFC)は，都合上，その水素を炭化水素系物質から改質して得る場合が多い．その場合には，水素中に一酸化炭素(CO)の混入が避けられず，これが，PEFC の一般的なアノード触媒である白金(Pt)表面に強く化学吸着し，その活性サイトを塞ぐ，いわゆる「CO 被毒」が生じる．これを防ぐためには，通常 Ru に代表される他金属元素との合金化が行われている．本研究では，その他に Pt 表面の歪みも含めて，それらが Pt-CO 相互作用に及ぼす効果を，原子レベルで非常に精度の高いシミュレーション解析として確立されつつある，密度汎関数理論(DFT)に基づいた第一原理計算を援用し解析を行った．見かけの単純さとは裏腹に，Pt-CO 相互作用の解析は，計算に使用する理論に非常に敏感で，補正を行わずに実験値を再現できる手法はごく限られている．我々は，そのような高い理論を使用し，合金化および歪みが Pt-CO 相互作用に及ぼす効果を系統的に解析し，CO からの電子の供与という決定因子を得ることに成功した．

２．利用の内容・結果：

我々は，密度汎関数理論(DFT)に基づいた第一原理計算を行うことによって，白金(Pt)と一酸化炭素(CO)との相互作用における合金化および表面歪みの効果を系統的に解析した．その結果，隣接合金種(Ru, Sn, および Mo)や表面の圧縮歪みは，Pt 表面第一層の Pt 原子の価電子数を増加させる．その価電子が増加された Pt 原子は，CO が吸着する際の，CO から Pt への電子の供与を妨げる傾向にあり，結果として Pt-CO 結合を弱める．本研究より，CO からの供与の程度が，Pt-CO 結合強度を決定することが分かった．

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1. Muneyuki Tsuda and Hideaki Kasai,
“Ab initio study of alloying and straining effects on CO interaction with Pt”,
Physical Review B 73 (2006) 155405.

2. 津田宗幸，Eben Sy Dy，笠井秀明，
「Pt(111)上の CO 吸着における歪みの効果」(口頭)，
第 46 回真空に関する連合講演会，学習院大学，東京，2005 年 11 月．

3. 津田宗幸，笠井秀明，

「合金化・歪みによる白金の耐CO被毒メカニズム」(口頭),
日本物理学会第61回年次大会, 愛媛大学, 愛媛, 2006年3月.

4. Muneyuki Tsuda, Eben Sy Dy and Hideaki Kasai,
“Comparative study of CO mobility on Pt(111) modified by various metals” (Poster),
International Symposium on Surface Science and Nanotechnology (ISSS-4), Omiya Sonic City, Saitama, Japan, November 14-17, 2005.

5. 笠井秀明, 中西寛, 津田宗幸,
「一酸化炭素の吸着性が制御された触媒および触媒の製造方法, 並びにその利用」,
特願2006-130825.

４．今後の利用予定：

これまでの研究から得た知見を基に, 水素を交えたより現実的な系をDFTに基づいた第一原理計算により, 継続して解析していく予定である.

4.9.9 計算機マテリアルデザイン(CMD)による磁性表面上での水素のオルソ・パラ転換効率の制御

Control of ortho-para H_2 conversion yield on magnetic surfaces by computational materials design (CMD)

Rifki Muhida
大阪大学大学院工学研究科精密科学・応用物理学専攻
機構担当者：金澤　昌之　情報システム利用推進室

１．利用の概要（要約）：

We have done a series of studies on the magnetic properties of novel materials e.g., inhomogeneity of spin density, with the aim of exploring their possible uses as a catalyst for the ortho-para H_2 conversion. To determine the inhomogeneity of spin density distribution of a magnetic material in the calculations, We performed a series of density functional theory (DFT) based total energy calculations using GAUSSIAN 03 adopting Becke's three-parameter functional, Perdew and Wang's gradient-corrected correlation functional, and Dunning, Hay and Wadt's basis sets. The *o-p* H_2 conversion yield can be calculated based on methods that have been introduced in our previous studies, i.e., treating spin-spin interactions (e.g., hyperfine interaction) as perturbation terms in our model.

２．利用の内容・結果：

We have found the important factors that can influence the *o-p* H_2 conversion yield on surface catalysts, e.g., inhomogeneity of spin density distribution. By considering small magnetic clusters, i.e., organometallic compounds of multiple-decked sandwich clusters, viz., $M(C_6H_6)_2$ (M = Transition metal atoms), we compared the *o-p* conversion yield of the interaction between H_2 and $M(C_6H_6)_2$ systems. By substituting M with Mn, Fe and Co atoms, we found that the conversion yield for H_2 on $Mn(C_6H_6)_2$ cluster is greater than those of H_2 on $Fe(C_6H_6)_2$ and $Co(C_6H_6)_2$ clusters. From the calculation results for the spin density distribution of these systems, and by considering spin-spin interactions between electrons of the system (surface and H_2) and protons of H_2, we have found that the inhomogeneity of spin density distribution of H_2-$Fe(C_6H_6)_2$ clusters is lower than that of the H_2-$Mn(C_6H_6)_2$ system. When the H_2 center-of-mass (CM) distance from the atom M is 1.8 A and the H_2 molecular orientation angle $\theta = 10^o$, the magnetic moment of Mn in $Mn(C_6H_6)_2$ system is 3.1 μ B. For the $Fe(C_6H_6)_2$ and $Co(C_6H_6)_2$ systems the magnetic moments are 2.3 and 1.3 μ B, respectively. Qualitatively, our results agree with the experiments of Ashmead et al. (1964), and Selwood (1970). Inhomogeneity of spin density distribution thus can be considered as an important factor in searching for the best catalyst for the *o-p* H_2 conversion.

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

Conferences:

1. "Overcoming Liquid Hydrogen storage problem by Computational Materials Design (CMD)", R. Muhida, W. A. Dino, H. Kasai, 2006 International Workshop on Science and Engineering (Osaka Univ-ITB-De La Salle University-Croatia University), 17 May 2006, Department of Applied Physics Osaka University, Japan.
2. "Potential Energy Surface (PES) for Reactive Ion Etching (RIE)　Cluster model of reactive ion etching (RIE) on FeNi Cluster " R. Muhida, M. David, S. Matsumoto, W. A. Dino, H. Akinaga, H. Kasai, H. Nakanishi, 61th (spring) The Physical Society of Japan (JPS) annual meeting , 27-30 March 2006, Ehime, Japan.
3. "Rreactive ion etching (RIE) of an interaction between $FeNi_4$ cluster and CO ions - Molecular orientational effect-" R. Muhida, M. M. Rahman, W. A. Dino, H. Kasai, H. Nakanishi,

Workshop of 21st COE for young scientist in Japan ,
17 March 2006, Osaka University , Japan.

4. "Liquid Hydrogen storage problem: Increasing o-p H_2 conversion yield"
R. Muhida, M. M. Rahman, W. A. Dino, H. Kasai, H. Nakanishi,
The 3rd workshop on environment and Energy (WEE 2006)
8-9 March 2006, Nakashima center, Osaka, Japan.
5. "Hydrogen storage problem: Increasing o-p H_2 conversion yield"
R. Muhida, M. M. Rahman, W. A. Dino, H. Kasai, H. Nakanishi,
Hanoi University of Science-Osaka University Scientific workshop on material science 2006
15 February 2006, Osaka University, Japan
6. "Overcoming hydrogen storage: Increasing o-p H_2 conversion yield"
R. Muhida, W. A. Dino, H. Kasai, H. Nakanishi,
2006 International Science and Engineering Workshop De La Salle University-Manila, Philippines – Osaka University, Japan
Osaka University, 2-3 February 2006, Osaka University, Japan
7. " Cluster model of reactive ion etching (RIE) of interaction between $FeNi_4$ cluster and CO ions"
R. Muhida, M. David, S. Matsumoto, W. A. Dino, H. Akinaga, H. Kasai, H. Nakanishi.
6th International Conference on Reactive Plasma and 23rd Symposium on Plasma Processing (ICRP-6/SPP-23),
24-27 January 2006, Hotel Taikanso, Matsushima, Sendai, Japan.
8. "Overcoming hydrogen storage: Increasing o-p H_2 conversion yield"
R. Muhida, W.A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai,
Asian Physics Symposium 2005 (APS 2005),
7-8 December 2005, Grand Aquila Hotel, Bandung.
9. "Magnetic properties of $V_n(C_6H_6)_{n+1}$ (n=1,2) "
R. Muhida, W. A. Dino, H. Kasai, H. Nakanishi,
International Symposium on Surface Science and Nanotechnology (ISSS-4),
14-17 November 2005, Omiya Sonic City, Saitama, Japan.
10. "Ortho-para H_2 conversion induced by inhomogeneity of spin density distribution. - $Fe(OH)_3$ vs $Mn(C_6H_6)_2$ clusters",
R. Muhida, W.A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai,
45th Vacuum Society of Japan Annual Meeting ,
9-11 November 2005, Gakushuin University, Tokyo.
11. "Increasing o-p H_2 conversion yield using molecular orientation of H_2 on surfaces and inhomogeneity of spin density distribution" ,
R. Muhida, W. A. Dino, Md. M. Rahman, M. David, H. Nakanishi, H. Kasai, K. Fukutani, T. Okano
The International Fuel Cell Workshop 2005,
23-26 September 2005, Kofu, Yamanashi, Japan.
12. "Local magnetic moment of $V(C_6H_6)_2$ -ab initio study-"
R. Muhida, H. Setiyanto, Md. M. Rahman,W. A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai,
60th (autumn) The Physical Society of Japan (JPS) annual meeting ,
12-15 September 2005, Doshishou University, Kyoto, Japan.
13. "Increasing o-p H_2 conversion yield using molecular orientation of H_2 on surfaces and inhomogeneity of spin density distribution" ,
R. Muhida, W. A. Dino, M.M. Rahman, H. Nakanishi, H. Kasai
International workshop on Condensed Material Theory XXXIX (CMT29),
13-16 September 2005, International Institute for Advanced Study (IIAS), Kyoto, Japan.
14. "Effect of inhomogeneity of spin density on ortho-para H_2 conversion yield on $M(C_6H_6)_2$ (M=Mn, Fe, Co) clusters",
R. Muhida, H. Setiyanto, Md. M. Rahman, T. Kishi, W. A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai,
International Symposium on the Manipulation of Advance Smart Materials (ISMASM 2005),
26-27 May 2005, Nara-Ken New Public Hall, Nara, Japan.

15. "Change in magnetic properties of multiple-decked sandwich clusters: $M(C_6H_6)_2$ (M=Mn,Fe,Co) induced by H_2 ",
R. Muhida, N. B. Arboleda, T. Kishi, M. Tsuda, W. A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai,
60th (spring) Physical Society of Japan (JPS) Annual Meeting ,
24-29 March 2005, Tokyo University of Science, Noda, Chiba, Japan.

Publications:

1. "Ab initio study for a chemical reaction between metal transition ions (Cr and Fe) and NaDDC (Sodium diethyldithiocarbamate) "
H. Setiyanto, R. Muhida, Md. M. Rahman, W. A. Dino, H.K. Dipodjono, T. Kishi, S. Matsumoto, H. Kasai,
Journal of the Vacuum Society of Japan, 49 (2006) 137-141.
2. "Ab initio study for structure, electric properties and light emission of linear-trans-quinacridones ",
A. Susanto, R. Mozo, R. Muhida, T. Kishi, M. M. Rahman, W. A. Dino, H. K. Dipojono, H. Kasai,
The European Physical Journal D 38 (2006) 199 - 201.
3. "Molecular orientation dependence of ortho-para H_2 conversion on $Fe(OH)_3$ cluster induced by hyperfine contact interaction ",
R. Muhida, M. David, Md. M. Rahman, W. A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai, K. Fukutani and T. Okano,
The European Physical Journal D 38 (2006) 99 - 101.
4. "Ortho-para H_2 conversion on multiple-decked sandwich clusters of $M(C_6H_6)_2$(M=Mn,Fe,Co) induced by an inhomogeneity of spin density distribution",
R. Muhida, H. Setiyanto, Md. M. Rahman, W. A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai, K. Fukutani and T. Okano,
Thin Solid Films 509 (2006) 223-226.
5. "Density functional calculations for an adsorbed H_2 on $Fe(OH)_3$ by considering molecular orientation of H_2 "
R. Muhida, A. Susanto, T. Kishi, T. A. Roman, W. A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai,
Journal of the Vacuum Society of Japan 48 (2005) 205-208.
6. "Density functional theory investigation for one-dimensional organic-metallic multiple-decked sandwich model",
Md. M. Rahman, R. Muhida, W. A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai,
Journal of the Vacuum Society of Japan 48 (2005) 232-234.

４．今後の利用予定：

By comparing the yield of $Mn(C_6H_6)_2$ with that of $Fe(OH)_3$ catalyst we found that the yield for $Mn(C_6H_6)_2$ was slightly larger than for the $Fe(OH)_3$ catalyst. However, $Mn(C_6H_6)_2$ is not easily produced even less in the industry. We hope to continue this study to find new catalysts that has high inhomogeneity of spin density distribution and easy to apply to the industry. Alternatively, we can modify the catalysts that are commonly used in the industry e.g., dope the catalyst by other atoms, to change the magnetic properties of the catalyst with the aim of getting high inhomogeneity of spin density. Control of the *o-p* H_2 conversion yield by changing the magnetic properties of some catalyst for the *o-p* H_2 conversion also has other important applications e.g., quantum computations. I will consider a promising catalysts for *o-p* H_2 conversion e.g., Fe_3O_4 catalyst. Although this catalyst has yield of 10 times smaller than $Fe(OH)_3$, this material shows complex magnetic behavior and it seems to be a promising candidate for high spin polarization. The spinel structure of this material give us a chance to make many modifications to this catalyst to increase the efficiency/yield e.g., by substituting/doping some atoms (e.g., Pt. Au, Mn, Cr) such as that this material can give us higher inhomogeneity of spin density. By considering a H_2 on top of an Fe atom in the first layer of the Fe_3O_4 (100) surface, I will calculate the *o-p* H_2 conversion yield. As a first step, we substitute two Fe atoms in the third layer (from the surface) of Fe_3O_4 by other atoms. By altering those atoms we will control the *o-p* H_2 conversion yield. We will enlarge the size of our systems (e.g., Fe_3O_4 system) containing around 50-100 atoms, and investigate spin density and spin polarization.

4.9.10 超高強度レーザーの固体照射による高エネルギー電子発生

High energy electron generation from solid target irradiated by ultra-intense laser pulses

中村　龍史
大阪大学レーザーエネルギー学研究センター・高エネルギー密度科学部門
機構担当者：松田俊明（情報システム利用推進室）

１．利用の概要（要約）：

大阪大学レーザー研では高速点火核融合の研究が進められており、その理論的アプローチとして統合シミュレーションコード(FI3:Fast Ignition Integrated Interconnected code)の開発が進められている。そこでは輻射流体コード、相対論 Fokker-Planck コード、相対論電磁粒子コードの開発が進められ、これらを統合することで多階層複雑系のシミュレーションを行う（図１）。本研究では相対論電子粒子コードを用い、超高強度レーザーと固体密度プラズマとの相互作用による高エネルギー電子発生過程について研究を行った。粒子コードは多数の粒子情報を常に保持する必要があるため比較的大規模な計算となる。特に高密度かつ数十ミクロンのスケールの計算を行うには、大容量メモリを搭載した大規模並列計算機が不可欠となる。

２．利用の内容・結果：

高速点火核融合では超高強度レーザーを用い高エネルギー電子を発生させ、爆縮コアの過熱・燃焼を行う。そのためレーザーから電子への高い変換効率が求められ、コーンターゲットが利用されている。更に加熱特性は電子のエネルギーに強く依存するため、レーザーとコーンターゲットとの相互作用により発生する電子のエネルギー特性を理解・制御する必要がある。そこで本研究では統合粒子型 2 次元粒子コードを開発し、コーンターゲットでの電子加速過程の理解を目的として研究を行った。コードにて OpenMP を用い、ITBL 計算機の 16CPU から 32CPU を用いて計算を行った。本年度は以下のような結果を得た。

- 平板ターゲットと比較し、コーンターゲットはコーン側面における大きな相互作用領域、コーン先端部での集光効果、といったコーン形状の特性により発生する電子のスペクトルは大きくことなる。平板ターゲットではレーザーのポンデロモーティブ加速による高エネルギー電子成分（2.5MeV）が発生する。これに対しコーンターゲットでは、コーン側面で発生する数 MeV 電子成分（1.8MeV）とコーン先端部での集光されたレーザーにより加速される非常に高いエネルギー成分(5.0MeV)が観測される(図 2)。吸収率は平板ターゲットが 20 パーセントなのに対しコーンターゲットは 40 パーセント程度と倍程度大きくなる。この結果よりコーン側面の相互作用領域を増やすことが重要であることが分かった。
- コーン側面ではレーザー照射角度が 15 度程度と非常に大きくなる。このような大きな角度での相互作用において、照射表面で電子加速が起こることが明らかとなった。照射表面に誘起される、静磁場及び静電場により電子が固体表面に捕捉され、かつレーザー電

場により強制振動を受けることにより共鳴的にエネルギーが吸収される（図３）。この表面加速の起こる条件とともに、発生する高エネルギー電子のエネルギースケーリングを明らかにした。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1. T.Nakamura et al.,
"Electron lateral transport and surface field generation by oblique incident laser pulses",
35th Annual anomalous absorption conference, Fajardo, Puerto Rico, June 26-July 1,2005.
2. T.Nakamura et al.,
"Hot electron generation by laser-cone interaction",
Proceedings of 4th International conference on inertial fusion sciences and applications, Biarritz, France, Sept.5-Sept.10,2005.
3. T.Nakamura et al.,
"高強度レーザーによる固体照射面における表面電子加速"、
日本物理学会第 61 回年次大会、松山大学、2006 年 3 月 27 日～3 月 30 日.
4. T.Nakamura et al.,
"Generation and transport of fast electrons inside cone targets irradiated by intense laser pulses",
Laser and particle beams, Vol. 24, pp. 5-8, 2006.

４．今後の利用予定：

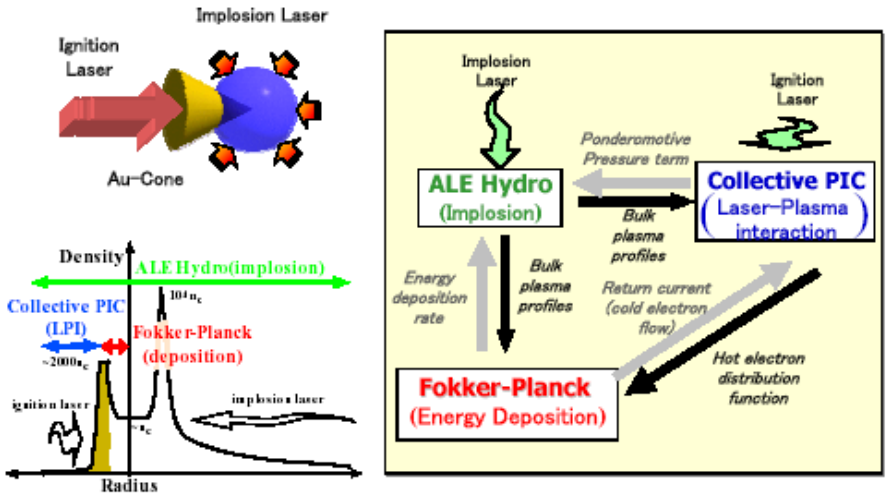


図１：高速点火核融合統合シミュレーションコード概念図

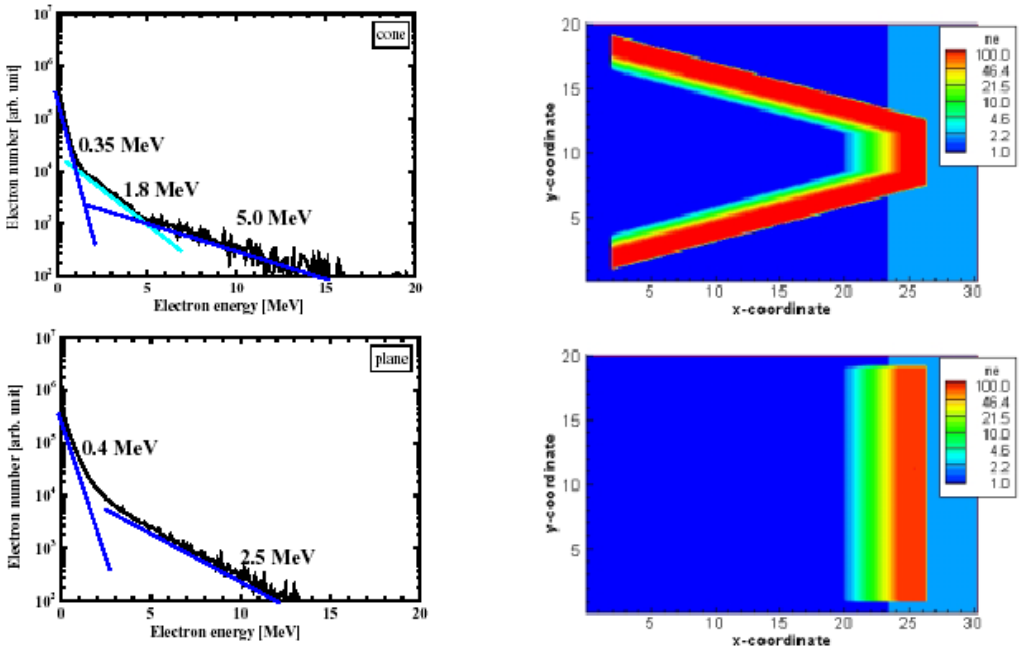


図２：超高強度レーザー照射によるターゲット裏面で観測した高エネルギー電子スペクトルの比較。

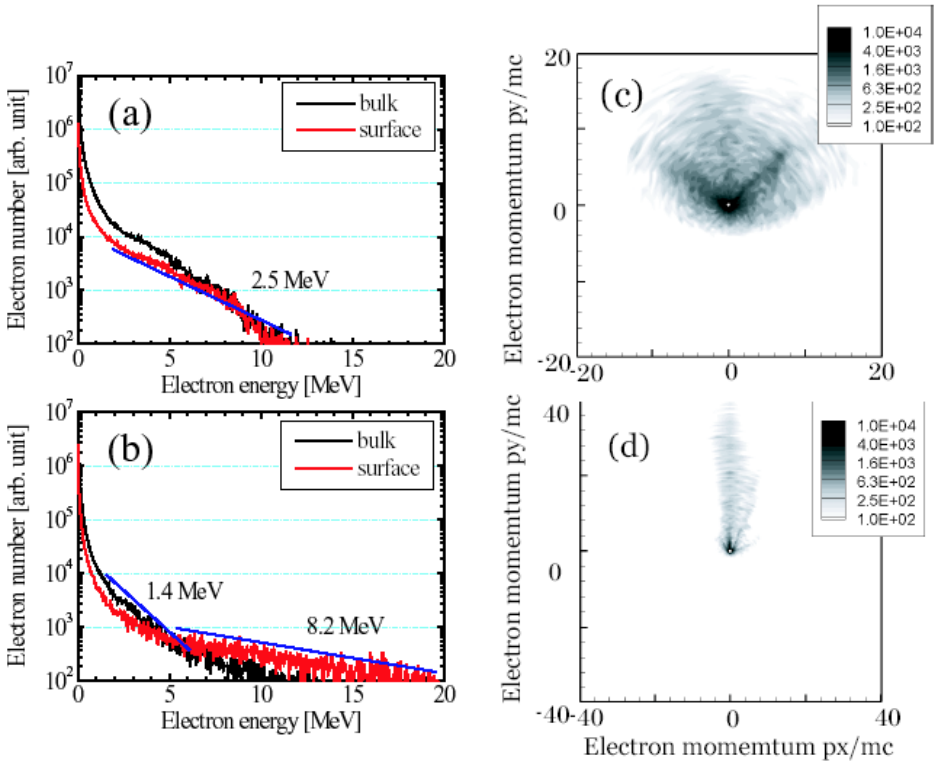


図３：照射角度の違いによる高エネルギー電子特性の違い；エネルギースペクトル(左図)と運動量分布（右図)。45 度照射の場合(a, c)は発生する電子の分布はレーザー伝播方向からレーザー反射方向まで広がりを持っている。75 度照射の場合(b, d)、電子は表面方向に加速されており、かつエネルギーも高くなっている。

4.9.11 計算化学による有機化学反応での水素結合の役割の追跡

Computational study on the rule of hydrogen bonds in organic chemical reactions

山邊　信一
奈良教育大学
機構担当者：松田　俊明（情報システム利用推進室）

１．利用の概要（要約）：

ITBL 計算機に搭載された計算化学のソフトウエア GAUSSIAN03 を用いて、有機化学反応の経路を追跡する研究を実施した。密度汎関数法(RB3LYP)と基底関数 6-31G*を使用して、具体的な反応系のモデルを組み立て、反応の遷移状態構造の精密な決定が研究の主要な内容である。平成１７年度は、ベックマン転位という反応を扱った。酸触媒下でケトンのオキシムよりアミドを生成する反応である。有名な例は、シクロヘキサノンオキシムより、6ーナイロンの原料であるεーカプロラクタムを生成する反応である。従来、この反応機構は未解明であったため、素過程を注意深く追跡した。

２．利用の内容・結果：

ITBL 計算機を並列１６本のＣＰＵを用いて、遷移状態と安定構造決定のシミュレーション計算を行った。３種類の反応基質、アセトンオキシム、アセトフェノンオキシム、及び前述のシクロヘキサノンオキシムと溶媒として H+(酢酸分子)3 及び H+(水分子)6 を用いた。計算結果、反応基質での N.....O 共有結合切断と転位が同時に起こる経路が求められた。図１での３つの反応基質での前者２つが段階的経路、シクロヘキサノンオキシムは協奏的な経路により反応が起こることが求められた。図 2、　図 3 でのこれらの反応機構の違いをフロンティア軌道論により説明した。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

(1) "Is the Beckmann Rearrangement a Concerted or Stepwise Reaction? A Computational Study". Yamabe, S.; Tsuchida, N.; Yamazaki, S. J. Org. Chem. 2005, 70, 10638-10644

(2) "Symmetry or asymmetry in cheletropic additions forming cyclopropanes.", Shinichi Yamabe, Noriko Tsuchida, Tsutomu Minato and Takahisa Machiguchi, Theoret. Chem. Accounts, 113, No.2, 95-106 (2005).

(3) "Gas-phase ion/molecule reactions in C5F8", K. Hiraoka,* K. Fujita, M. Ishida, T. Ichikawa, H. Okada, K. Hiizumi A. Wada and K. Takao, S. Yamabe* and N. Tsuchida, J. Phys. Chem. A, 109 No.6 1049-1056 (2005).

(4) "Reaction Paths of Tautomerization between Hydroxypyridines and Pyridones", N. Tsuchida and S. Yamabe*, J. Phys. Chem A., 109 No.9 1974-1980 (2005).

(5) "Reaction Paths of the Water Assisted Neutral Hydrolysis of Ethyl Acetate", Shinichi Yamabe*, Noriko Tsuchida and Yousuke Hayashida, J. Phys. Chem A., 109, No. 32, 7216-7224 (2005).

(6) "Tropone is a mere ketone for cycloadditions to ketenes", Junko Okammoto, Shinichi Yamabe*, Tsutomu Minato, Toshio Hasegawa and Takahisa Machiguchi*, Helvetica Chimica Acta, vol. 88, 1519-1539 (2005).

(7) "Revisiting Hydrogen [1,5] Shifts in Cyclopentadiene and Cycloheptatriene as Bimolecular Reactions", Shinichi Yamabe*, Noriko Tsuchida and Shoko Yamazaki, J. Chem. Theory Comput., vol.1, No.5, 944-952 (2005).

４．今後の予定：

有機化合物の基本である，C, H, O で構成される反応基質がプロトン性溶媒中でどのように挙動するのかの計算を継続して実施する予定。

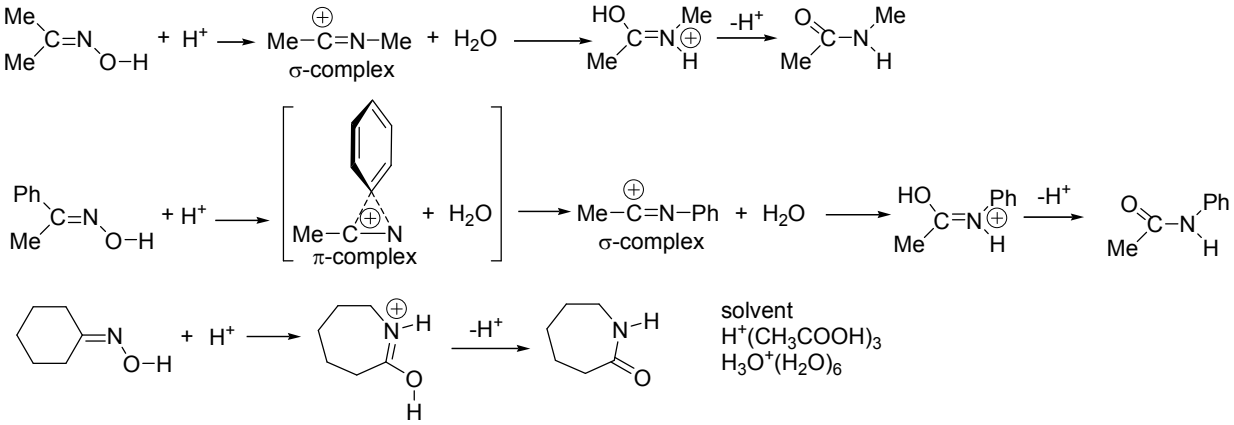


図１　アセトンオキシム、アセトフェノンオキシム、及びシクロヘキサノンオキシムのベックマン転位

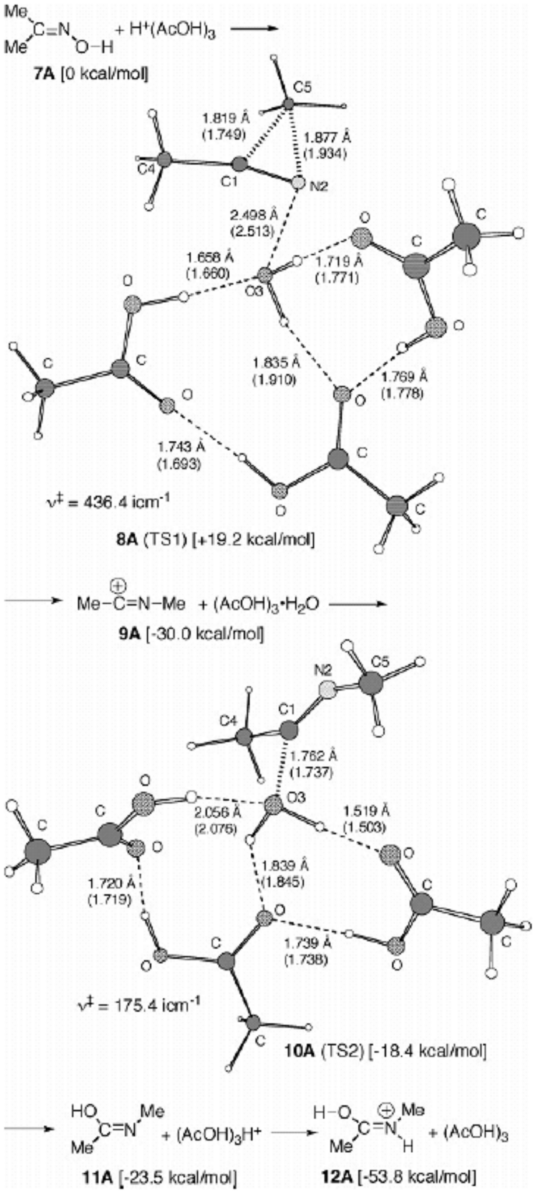


図２　アセトンオキシムのベックマン転位

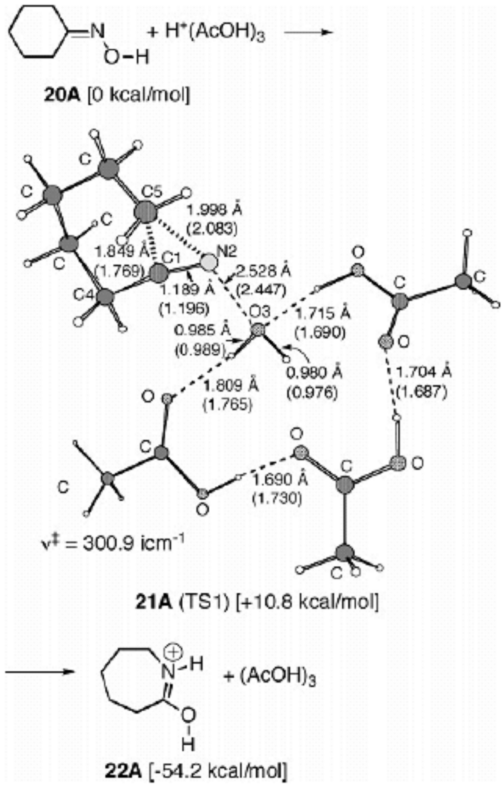


図３　シクロヘキサノンオキシムのベックマン転位

4.9.12 計算化学によるジシレン化合物へのアルコール付加経路の追跡

A computational study on the addition path of alcohols to disilene derivatives

水上　紀子
奈良教育大学　教育学部
機構担当者：松田　俊明（情報システム利用推進室）

１．利用の概要（要約）：

ITBL 計算機に搭載された計算化学のソフトウエア GAUSSIAN03 を用いて、ケイ素－ケイ素二重結合を持つ disilene ($R_2Si=SiR_2$)に対して、アルコール分子がどのような経路を通じて付加反応を起こすのかを調べた。密度汎関数法(RB3LYP)と基底関数 6-31G*を使用して、テトラメチルジシレン(R = CH_3)とテトラメジチルジシレン(R = mesityl)を反応基質とした計算を行った。アルコール分子としては、メタノール CH_3OH, トリフルオロメタノール CF_3OH およびフェノール類 ArOH を用いた。従来、この反応はジシレンとアルコールが１分子同士会合し、４中心型の遷移状態を通ると考えられてきた。ところが、アルコール分子同士は水素結合でつながり易いので、２量体または３量体としてジシレンと会合する可能性がある。計算化学で、この可能性が検討されて来なかった経過もあり，今回いろいろな付加経路を比較吟味した。

２．利用の内容・結果：

テトラメチルジシレンとメタノール分子１(n = 1), ２(n = 2)及び３(n = 3)個の反応経路を求めた。n = 1（図１)より n = 2（図２）の付加経路のほうが、活性化自由エネルギー(□G‡)が小さい結果が求められた。つまり、初めてアルコール２量体での付加経路の有利さを見出した。n = 3 では反応先が付加体ではなく双性イオンにとどまっていた（図３）。Si=Si 上で、アルコール分子３量体では付加中心である共有結合生成の方向性が悪いためである。CF3OH を用いた反応では、更に n = 1 に比べて n = 2 の反応性の大きいことが目立った。フェノール類を７個用いて同様の経路追跡を行ったが、ここでも n = 2 の方が n = 1 より有利である結果が求められた。テトラメジチル体のジシレンはアルコール分子２量体に対して、立体障害が生じるかと予想されたが、やはり合理的な付加経路が求められた。
以上、ケイ素が入った反応基質でも、水素結合の直線性を保持する経路が有利であることが判明した。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

"A new mechanism for the addition of alcohols to disilenes revealed by DFT and ONIOM calculations". Yamabe, S.; Mizukami, N.; Tsuchida, N.; Yamazaki, S. Organometallics, submitted.

４．今後の予定：

ケイ素は第 3 周期に所属しており、同じ周期のリン(P)や硫黄(S)を中心とする化合物への水素結合関与の反応性を継続して検討する予定。

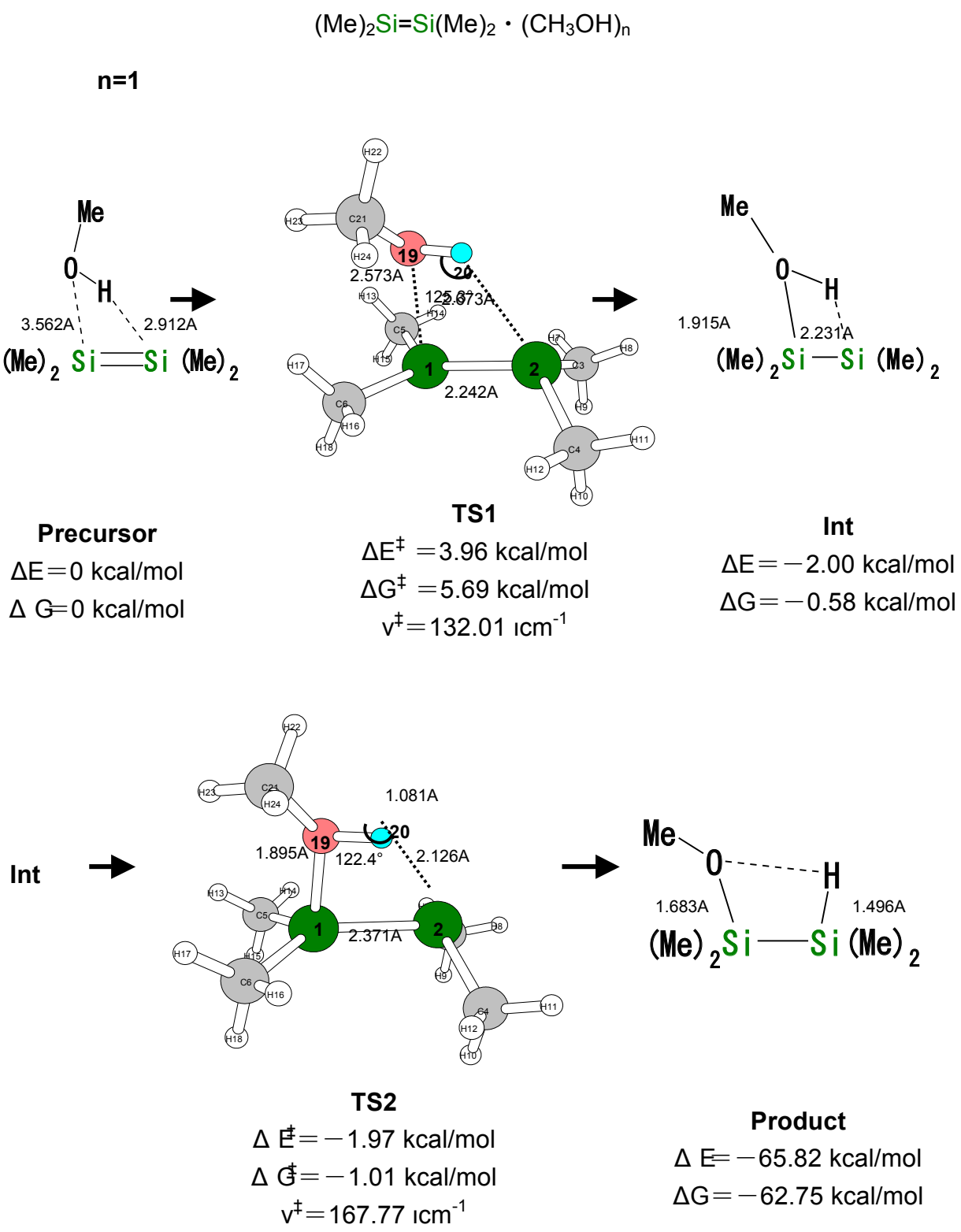


図１　テトラメチルシリレンへのメタノール１分子付加の反応経路

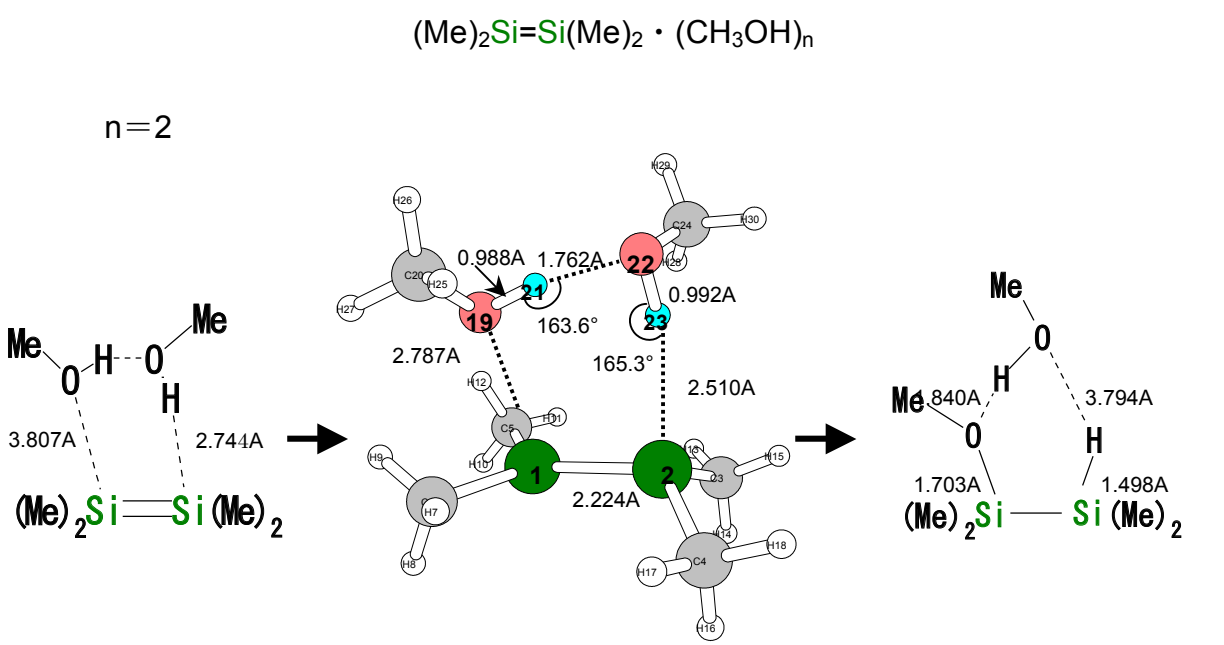


図２　テトラメチルシリレンへのメタノール２分子付加の反応経路

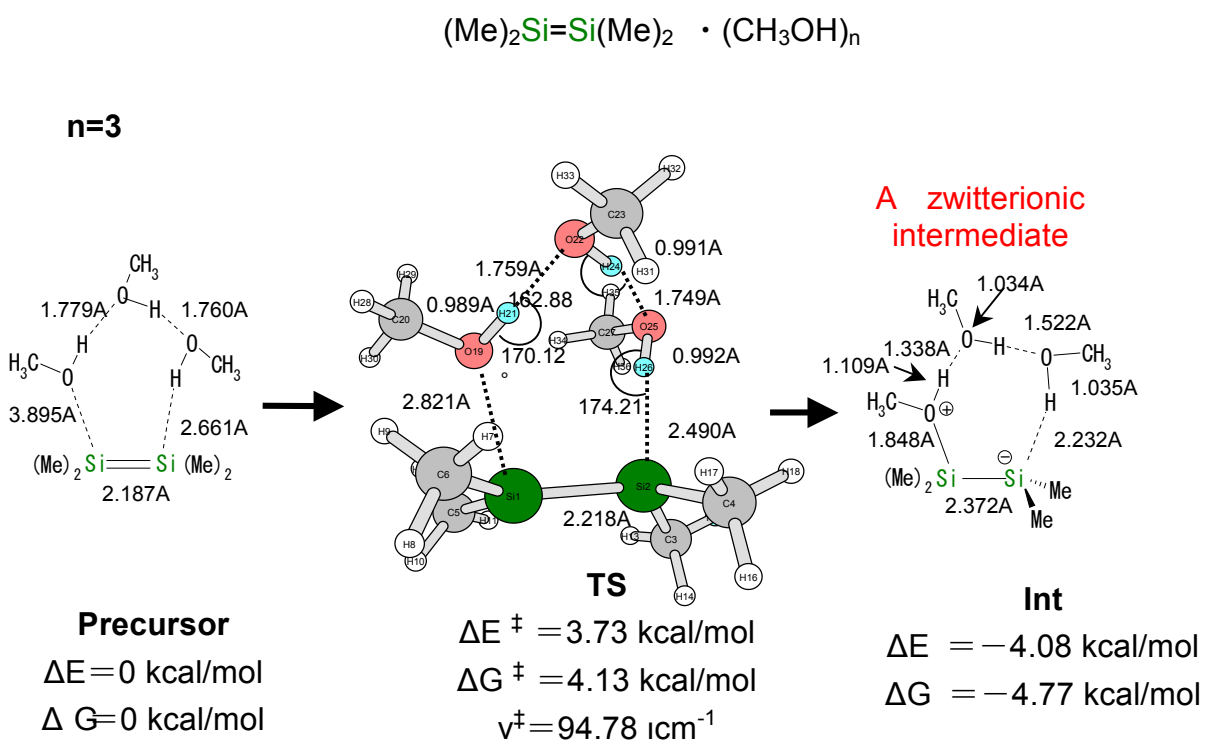


図３　テトラメチルシリレンへのメタノール３分子付加の反応経路

4.9.13 Cu(100)及び Cu(110)表面上における水素原子の量子力学的振る舞い

Quantum States of Hydrogen (H, D, T) Atoms on Cu(1 0 0) and (1 1 0) Surfaces

中西　寛
大阪大学大学院工学研究科精密科学・応用物理学専攻
機構担当者：金澤　昌之（情報システム利用推進室）

１．利用の概要（要約）：

固体表面上の水素の挙動に関する研究は、水素化･脱水素化反応といった触媒反応、クリーンエネルギーシステムとして注目されている燃料電池及びその燃料貯蔵における水素吸蔵反応などの工業的応用に重要な役割を果たすだけでなく、より複雑な構造の吸着子の表面反応を解明する上での基礎付けを行うという点からも非常に重要である。そのため、固体表面上の水素の量子力学的振る舞いについて実験､理論の両面から盛んに研究されている。しかし、問題点として水素の質量は小さいため、実験では水素の量子力学的振る舞いは直接観察することができない。しかし近年、計算機性能の急速な向上に伴い原子番号だけを入力パラメーターとした第一原理計算が実行可能になり、それを援用することによって、理論的な面から水素原子の量子力学的振る舞いの予測が可能になった。まず、水素原子が固体表面から受けるポテンシャルエネルギー曲面（PES: potential energy surface）を密度汎関数法による第一原理電子状態計算によって構築し、どのようなサイトでポテンシャルエネルギーが低くなっているかを調べた。しかし水素はその質量が小さいために固体表面上においてトンネル効果、非局在化などの量子効果が顕著に現れるので、表面近傍での水素の振る舞いを完全に理解するには、量子力学的取り扱いが必要である。そこで構築した PES 上で水素原子に対するシュレディンガー方程式を解くことによって、吸着水素原子の波動関数とその固有エネルギーを計算し、その得られた波動関数の形状や空間的広がり具合、エネルギー準位の特徴などから、固体表面上に吸着している水素原子および同位体原子の振動状態を調べ、水素原子の量子力学的振る舞いを解析している。

２．利用の内容・結果：

面指数を変化させることによって表面結晶構造の変化がその表面上に吸着した水素原子にどのような特異性を与えるかを調べるため、表面の原子として比較的電子構造が単純で実験がよく行われている銅を選び､Cu(100),Cu(110)の表面上における水素原子とその同位体の量子力学的振る舞いを調査した。その結果、Cu(100)表面上の水素原子は PES の構造上から基底状態では hollow(HL)サイトに強く局在し､励起状態では bridge(BR)サイトに広がっていることが明らかになった。Cu(110)表面上では表面第二層の原子がエネルギー障壁となっているため、基底状態では short bridge(SB)サイトもしくは long bridge(LB)サイトに局在し、励起状態もその 2 つのサイトを中心とした振動モードがある結果を得た。また Cu(100)表面上の場合、表面上を拡散するには、HL-BR-HL サイトの拡散を考えた場合トンネル効果による量子論的な拡散と､熱活性化などによって BR サイトにあるエネルギー障壁を越えたことによる直

接的な拡散が予測されるのに対し、Cu(110)表面上においては表面上を拡散する経路はSB-LBサイト間だと考えられるが、トンネル効果による遷移はほとんど期待できず、活性化障壁を越えたことによる直接的な拡散が主に起きることが予測される。また、同位体の重水素原子（D）や三重水素原子（T）の場合も同様に計算したところ、質量の増加に伴って零点エネルギーの減少および存在確率の凝集などの同位体効果が顕著に現れた。また、この計算で得られた水素原子の振動エネルギーは実験結果と良く一致した。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1. N. Ozawa, T.A. Roman, H. Nakanishi and H. Kasai,
“Quantum states of hydrogen (H, D, T) atoms on Cu(1 0 0) and (1 1 0) surfaces”,
Surface Science, in press.

４．今後の利用予定：

これまでの研究から得られた知見を基に、新規な水素透過膜材料、電解質、水素貯蔵材料を第一原理電子状態計算を援用した量子状態計算により、継続して解析していく予定である。

4.9.14 様々な有機分子と表面間の相互作用に関する第一原理計算研究

-実践的ＩＴＢＬ計算機環境の評価とコミュニティ形成を目指して-

Density functional studies on the interactions between various metals and organic molecules

•towards estimating the ITBL environment and forming the research community・

David Melanie Yadao
大阪大学大学院工学研究科精密科学・応用物理学専攻
機構担当者：金澤　昌之（情報システム利用推進室）

１．利用の概要（要約）：

We investigated the adhesion of PBT on metal atoms in terms of the relative stability of the metal/polymer system in the atomic level. PBT is known to bond strongly to metals such as aluminum (Al) and to have very good mechanical strength and it crystallizes rapidly, thus, the mold cycles are short and molding temperatures can be lower than for many engineering plastics
We have also done a series of studies on the electronic properties of metal porphyrins (e.g., Bis-(Im)Fe-porphyrin, platinum (Pt) porphyrin, tin (Sn) porphyrin and platinum on tin porphyrin) with the aim of exploring their possible uses as catalysts for various reduction reactions. The perturbations of porphyrin on the electronic structure of the metals were studied.
All these studies were performed as a series of density functional theory (DFT) based total energy and geometry optimization calculations using GAUSSIAN 03.

２．利用の内容・結果：

We studied the interaction of various metals with polybutylene terephthalate (PBT) on metals by density functional theory. We found that the binding of PBT on aluminum is strongest when the atom is placed linearly with the free oxygen on the carbonyl of the monomer. Minimal interaction occurs when the aluminum is placed near the oxygen linking the carbonyl and the phenyl ring. PBT on Ag showed strongest adhesion while PBT on Au demonstrated weakest interaction
For the porphyrin systems, we have found the imidazole on Fe porphyrin can prevent it from interacting with O_2, and it can be used as switch to control the binding of O_2 on Fe. Platinum porphyrin, on the other hand, does not bond stably with O2. This is because the d_{Z2} orbital of Pt is completely filled and cannot accept electron donation from O_2. The only possible interaction is electron back-donation from Pt to the pi anti-bonding orbital of oxygen, which is high in energy. This led us to study the Pt bonded on Sn porphyrin as a means to free the d-orbitals of Pt for catalysis. The resulting compound gives interesting electronic properties consistent with reduction catalysts/photocatalysts. We are inviting experimentalists to test the findings of our computationally designed material.

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

Refereed Publications:

1. “Polybutylene terephthalate on metals: a density functional theory and cluster models investigation”, Melanie David, Hideaki Kasai, Naoki Ando and Masanori Naritomi, J. Phys.: Condens. Matter, 18(2006) 1137-1142.
2. “A density functional theory-based investigation of adhesion of poly(butylene terephthalate) on aluminum”, Melanie David, Tanglaw Roman, Wilson Agerico Dino, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Naoki Ando and Masanori Naritomi, Thin Solid Films 509 (2006) 215-217.
3. “A Theoretical Analysis on the Interaction Between Tin(II) Porphyrin and Platinum and the

Electronic Characteristics of Their Reaction Product", Dy, E. S. and Kasai, H., Chemical Physics Letters, 422 (2006) 539–542.

4. "Characterization of Platinum Porphyrins and Its Interaction with Oxygen by Density Functional Theory", Dy, E. S., Kasai, H., e-J. Surf. Sci. Nanotech., 3, 2005, 473-475.
5. "Characterization of the Im-(Im)PorFe Bond by Density Functional Theory", Dy, E. S. and Kasai, H., Thin Solid Films, 509 (2006) 212 – 214..
6. "Bis(histidine)/Bis(Imidazole) Heme Complex—Polymer Electrolyte Fuel Cell Application as an Alternative Cathode Electrode Catalyst", Dy, E. S., Dino, W. A., Tsuda, M., Kasai, H., e-J. Surf. Sci. Nanotech., 3, 2005, 233-236.

Presentations and Posters：（＊Presenter）

1. "Polybutylene Terephthalate Adhesion on Metals: A Density Functional Theory Investigation"、M. David*, T. Roman, W. A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai, N. Ando, M. Naritomi, 46th Annual Symposium of Vacuum Society of Japan; November 9-11, 2005, Gakushuin Unversity, Tokyo, Japan
2. "A Density Functional-Based Investigation of Adhesion of Poly(Butylene Terephthalate) on Aluminum", M. David*, T. Roman, H. Nakanishi1, H. Kasai, N. Ando, M. Naritomi, *International Symposium on the Manipulation of Advanced Smart Materials (ISMASM) 2005* , 26th and 27th of May, 2005, Nara-Ken New Public Hall, Nara, Japan
3. "A Study on the Adhesion of Polybutylene Terephthalate on Metals", M. David*, T. Roman, W. Agerico Dino, H. NakanishiA, H. KasaiA, N. Ando, M. Naritomi, The Physical Society of Japan 2005 Autumn Meeting, 22pYE-12, September 22, 2005, Doshisha University, Kyotanabe Campus.
4. "A novel neuroglobin-based oxygen storage device", Eben S. Dy＊and Hideaki Kasai, International Symposium on the Manipulation of Advanced Smart Materials, May 26, 2005, Nara-Ken New Public Hall, Nara, Japan.
5. "Interaction of Oxygen with Neuroglobin-based Heme Nanomaterial", Eben S. Dy* and Hideaki Kasai, 5th OU-DLSU Science Research Workshop, August 1-5, 2005, De La Salle University-Manila, Philippines.
6. "Manipulation of Heme-Oxygen Interaction by an External Disulfide Bond", Eben S. Dy* and Hideaki Kasai, The Physical Society of Japan 2005 Autumn Meeting, September 21, 2005, Doshisha University, Kyotanabe Campus.
7. " ϙAdsorption on Cytochrome C Oxidase", Muneyuki Tsuda*, Eben Dy, Melanie David, Hideaki Kasai, 23rd European Conference on Surface Science (ECOSS-23), Berlin, Germany, September 4-9, 2005.
8. "The Density Functional Study on Pt Porphyrin Oxygen Sensors", Eben S. Dy* and Hideaki Kasai, 61th Annual Meeting, The Physical Society of Japan, (日本物理学会　第61回年次大会), March 28, 2006, Ehime University/Matsuyama University, Japan.

9. “The interaction between tin(II) porphyrin and platinum and the electronic characteristics of their reaction product”, Eben S. Dy* and Hideaki Kasai, Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry, Material-oriented Quantum Chemistry, May 28, 2006, Senri Life Science Center (5F SCIENCE HALL), Osaka, Japan.
10. “*The Interaction Between Tin(II) Porphyrin-Platinum and O_2*”, The 2nd International Workshop on Oxidation Reactions, Eben S. Dy* and Hideaki Kasai, ２００５年度　第３回　２１世紀ＣＯＥ　ナノサイエンス・フォーラム, Spring8, JAERI-CMD, OU Joint-Seminar, May 30, 2006, Icho Kaikan.

４．今後の利用予定：

We are currently performing calculations on the interaction of Sn porphyrins with other metals as well as on the interaction of platinum and other metal porphyrins. We believe that, doing so, we will discover more novel materials with interesting catalytic and photocatalytic properties.

あとがき

本報告書をまとめるにあたり、情報システム管理室内に編集委員会を設け、平成 17 年度における計算機利用実績の統計から、大型計算機のユーザのうち使用実績時間の多かった利用者に協力依頼を行った。多忙な時期にもかかわらず報告書を提出いただき、短時間でまとめることができた、研究者の皆様並びに資料作成にご協力を頂いた関係者各位にこの場を借りてご協力感謝いたします。

さて、この成果実績報告は多部門にわたり優れた研究実績を示しており、これは研究者の能力と努力によることは勿論ではありますが、改めて計算機が研究の場において必要不可欠であることを再認識させられます。

本報告書が、より高性能の計算機導入と研究環境の向上の契機となり、更なる研究活動の発展に役立つことを期待している。

平成 18 年 7 月

編集委員会
委員長：谷　正之
委員　：松本 潔（情報システム利用推進室)、庄司 誠、坂本 健作、
菅谷 寿男、関 暁之
事務局：山崎 和彦、富山 峯秀、石川 幸澄

付録　　平成 17 年度大型計算機システム利用成果一覧

以下は平成 17 年度大型計算機利用に係わる研究成果実績調査により各ユーザから報告された外部発表等のタイトルをまとめたものである

【 安全性研究センター】

1）渡辺正、中村秀夫、
“コールドレグ内温度成層化現象の実験及び解析”、
日本原子力学会 2005 年秋の大会、八戸、9 月 14 日(2005)。

【 先端基礎センター 】

1）P. Avramov, H. Naramoto, S. Sakai, K. Narumi and V. Lavrent’ev, Quantum Chemical Study of Atomic Structure Evolution of the Co_x/C_{60} ($x \leq 2$) Composites, XII-th International Congress of Quantum Chemistry, B189, Kyoto Terrsa, May 21-26, 2006, Kyoto, Japan.

2）P. V. Avramov, A.A. Kuzubov, A.A. Fedorov, F.N. Tomilin, P.B. Sorokin, Structure and electronic properties of Si/SiO_2 clusters, nanoparticles and nanowires, C187, Kyoto Terrsa, May 21-26, 2006, Kyoto, Japan.

3) P. V. Avramov, P.B. Sorokin, A.S. Fedorov, Atomic and Electronic Structure of Si-substituted Single Wall Carbon Nanotubes, Abstracts of 1st NAREGI International Nanoscience Conference, June 14-18, 2005, Nara, Japan, p. 127 (http://www.shinkokaido.jp/).

4）P. V. Avramov, S. Sakai, H. Naramoto, V. Lavrent’ev, K. Narumi, Quantum Chemical Investigation of Atomic and Electronic Structure of 1D Co/C_{60} Composites, Abstracts of 1st NAREGI International Nanoscience Conference, June 14-18, 2005, Nara, Japan, p. 192 (http://www.shinkokaido.jp/)

5）H. Naramoto, S. Sakai, K. Narumi, V. Lavrent’ev, J. Vacik, P. Avramov, Structure Evolution Induced by Physical and Chemical Processes in the Mixtures between Co(Ni) and C_{60}, Abstracts of the 1st International Nanocarbon Workshop, July 30-31, 2005, Hayama, Japan, p. 15.

6）P. Avramov, S. Sakai, H. Naramoto, V. Lavrent’ev, K. Narumi, The role of electronic correlations in Co/M (M=C_{60}, C_5H_5 and C_2H_4) molecular structures and composites, Abstracts of the 1st International Nanocarbon Workshop, July 30-31, 2005, Hayama, Japan, p. 22.

7）P. V. Avramov, H. Naramoto, S. Sakai, K. Narumi , V. Lavrent’ev, Quantum Chemical Study of Atomic Structure Evolution of the Co_x/C_{60} (x=1,2) Composites, J. Phys. Chem., in progress.

8）P. V. Avramov, A.A. Kuzubov, A.S. Fedorov, F.N. Tomilin, P.B. Sorokin, ab initio DFT study of *nc-Si/SiO₂* objects, J. Phys. Chem., in progress

9）Pavel V. Avramov, Pavel B. Sorokin, Alexander S. Fedorov, Dmitri G. Fedorov, Band gap unification of partially Si-substituted single wall carbon nanotubes, submitted to Phys.Rev. B

【 原子力基礎工学研究部門 】

1）Tatsuhiko Sato, Lembit Sihver, Hiroshi Iwase, Hiroshi Nakashima and Koji Niita, “Simulations of an Accelerator-Based Shielding Experiment Using the Particle and Heavy-Ion Transport Code System PHITS”, Advances in Space Research, 35(2), 208-213 (2005)

2）Tatsuhiko Sato and Koji Niita, “Analytical Function to Predict Cosmic-Ray Neutron Spectrum in the Atmosphere”, Radiation Research, in press

3）Tatsuhiko Sato, Koji Niita, Hiroshi Iwase, Hiroshi Nakashima, Yasuhiro Yamaguchi and Lembit Sihver, “Applicability of Particle and Heavy Ion Transport Code PHITS to the Shielding Design of Spacecrafts”, Radiation Measurement, submitted

4）T. Sato, K. Niita, V.A. Shurshakov, B.E. Kalyaev, E.N. Yarmanova, I.V. Nikolaev, H. Iwase, L. Sihver, D. Mancusi, A. Endo, N. Matsuda, Y. Iwamoto, H. Nakashima, Y. Sakamoto, H. Yasuda, M. Takada and T. Nakamura, “Applications of the PHITS Code to Space Researches – Estimation of Dose Reduction Rate due to Water Shielding in Front of Russian Crew Cabin”, 4-th International Workshop on Space Radiation Research, Moscow – St. Petersburg, June 5-9, 2006

5）Yosuke Iwamoto, Shingo Taniguchi, Noriaki Nakao et al.,
“Measurement of neutron spectra produced in the forward direction from
thick graphite, Al, Fe and Pb targets bombarded by 350MeV protons”
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 562 (2006) 789-792

6）Yosuke Iwamoto, Shingo Taniguchi, Noriaki Nakao et al.,
“THICK TARGET NEUTRON YIELD AT 0 DEGREE BY 250 AND 350 MEV PROTONS”
Proc. of SATIF-8, Shielding Aspects of Accelerators, Targets and Irradiation Facilities, Eight Meeting, to be published.

7）高瀬, 他, 炉心燃料チャンネル内大規模二相流シミュレーション, 第 24 回日本シミュレーション学会大会, (2005) pp.161-164.

8）高瀬, 他, 鉛直狭隘流路内大規模気泡流に関する数値的可視化, 第33回可視化情報シンポジウム, (2005) pp.435-436.

9）K.Takase, et al., Predicted Three-Dimensional Bubbly and Liquid Flow Behavior in Narrow Fuel Channel, Int. Conf. Jets, Wakes and Separated Flows, JSME No.05-201, pp.137-144,

Oct. (2005).

10） K. Takase, et al., A Large-Scale Numerical Simulation of Bubbly and Liquid Film Flows in Narrow Fuel Channels, ASME International Mechanical Engineering Congress, IMECE2005-80772, USA (2005).

11） K. Takase, et al., Numerical Analysis of Three-Dimensional Two-Phase Flow Behavior in a Fuel Assembly, Computational Methods in Multiphase Flow III, WIT Press., UK, pp.183-192. (2005).

12） 高瀬, 他, 稠密格子燃料集合体の除熱技術開発（2）大規模シミュレーションによる燃料集合体内二相流動解析, 日本混相流学会 2005 年会, A232, 東京, 8 月, (2005) pp.231-232.

13） 高瀬, 他, 微小流路内大規模気泡流構造に関する数値予測, 日本機械学会2005年度年次大会, Vol.7, No.05-1, 東京, 9 月,（2005）pp.17-18.

14） 高瀬, 他, 微小流路を上昇する大規模な気泡挙動の予測と高詳細可視化, 日本原子力学会 2006 春の年会, (2006).

15） 吉田, 他, 拡張二流体モデルによるスペーサ周囲の噴霧流解析, 日本原子力学会2005秋の大会,(2005).

16） 吉田, 他, 改良二流体モデルによる矩形流路内気泡流解析, 日本原子力学会2006春の年会, (2006).

17） H. Yoshida, et al., Development of Analytical Procedures on Two-Phase Flow in Tight-Lattice Fuel Bundles for Innovative Water Reactor for Flexible Fuel Cycle (FLWR), Proc. of 2006 International Congress on Advanced in Nuclear Power Plants (ICAPP'06), Reno, NV USA, June 4-8, 6169, (2006) .

18 ） H. Yoshida, et al., Current Status of Thermal/Hydraulic Feasibility Project for Reduced-Moderation Water Reactor (2) -Development of Two-Phase Flow Simulation Code with Advanced Interface Tracking Method-, Proc. of 2005 International Congress on Advanced in Nuclear Power Plants (ICAPP'05), May 15-19, 2005, Seoul, KOREA, 5156 , (2005).

19） H. Yoshida, et al., Numerical Simulation of Single Bubbles Rising through Subchannels with Interface Tracking Method, The 11th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics (NURETH-11), 436, (2005).

20） 永吉, 他, 大規模シミュレーションによる稠密燃料集合体内気液二相流特性の解明, (II) 2チャンネル流体混合実験への適用, 日本原子力学会和文論文誌, Vol.4, No.1, (2005).

21） 吉田, 他, 大規模シミュレーションによる稠密燃料集合体内気液二相流特性の解明, (III) 傾斜平板上液膜挙動の解析, 日本原子力学会和文論文誌, Vol.4, No.1, (2005).

22） 吉田, 他, 大規模シミュレーションによる稠密燃料集合体内気液二相流特性の解明, (IV) 地球シミュレータを用いたTPFITコードの燃料集合体内大規模二相流解析",日本原子力学会和文論文誌, Vol.4, No.2, (2005).

23）吉田, 他, 改良界面追跡法による燃料集合体内流体混合相関式の評価, 日本機械学会 2005 年度年次大会, (2005).
24）“選択チャンネル核分裂モデルに基づくチャンネル依存の核分裂ポテンシャルの計算”, 太田雅之, 中村詔司, 原田秀郎, 日本原子力学会「2005 年春の年会」L40,（2005 年 3 月 29～31 日, 東海大学）
25）“選択チャンネル核分裂モデルによる核分裂の解析”, 太田雅之, 中村詔司, 2005 年度核データ研究会,（2006 年 2 月 2～3 日, 日本原子力研究開発機構　原子力科学研究所）
26）M. Ohta and S. Nakamura, “Channel-dependent Fission Barriers of n+235U Analyzed by Selective Channel Scission Model”, Jpn. J. Appl. Phys., (to be published).
27）原かおる、北谷文人、原田秀郎（原子力機構）、秋宗秀俊、宇都宮弘章、海堀岳史、後神進史、芳原新也、牧永あや乃、山県民穂（甲南大）、豊川弘之、山田家和勝（産総研）、「レーザー逆コンプトンガンマ線による ^{152}Sm の光核反応断面積測定」、日本原子力学会 2006 年春の年会（大洗、原子力機構）
28）K.Y. Hara, H. Harada, F. Kitatani, H. Akimune, S. Goko, S. Hohara, T. Kaihori, A. Makinaga, H. Utsunomiya, T. Yamagata, H. Toyokawa and K. Yamada,
“Cross section measurements of the 152Sm(□ n)151Sm reaction near threshold”,
Second Joint Meeting of Nuclear Physics Divisions of the American Physical Society and the Physical Society of Japan, 17-22 September 2005, Hawaii, USA
29）Y.Okamoto, H.Shiwaku, T.Yaita, K.Minato, L.Rycerz, M.Gaune-Escard,
「High-energy XAFS study of molten salt systems」
7th International Symposium on Molten Salts: Chemistry and Technology,
平成 17 年 9 月、Toulouse（フランス）
30）岡本芳浩、Paul A.Madden、湊和生
「LiCl-KCl 共晶塩融体中の希土類塩化物の挙動」
第 37 回溶融塩化学討論会、平成 17 年 11 月、慶応大学（横浜）
31）T. Kobayashi, S. Otosaka and O. Togawa; Three-dimensional Modeling of the Tidal Dispersion of Radionuclides in the Irish Sea, Proceedings of International Symposium on The 13th Ocean Sciences Meeting, OS25J-07, Honolulu, February 20-24 (2006)
32）小林卓也、外川織彦；海洋環境評価システムの検証（Ⅰ）アイリッシュ海における ^{137}Cs の長期拡散シミュレーション、日本原子力学会 2006 年春の年会, 茨城 (2006)
33）日本原子力研究開発機構；「下北海域における海洋放射能予測コードの整備（Ⅲ）」成果報告書 (2006)
34）T. Kobayashi, M. Chino and O. Togawa; Numerical Simulations of Short-term Migration Processes of Dissolved 137Cs Due to a Hypothetical Accident of a Nuclear Submarine in the Japan Sea, J. Nucl. Sci. Technol., 43(5), p.300-310 (2006)
35）KOTULIC BUNTA, J., LAAKSONEN, A., PINAK, M. and NEMOTO, T. 2006, DNA

strand break: structural and electrostatic properties studied by molecular dynamics simulation. *Computational Biology and Chemistry* 30, 112-119.

36） BUNTA, J., DAHLBERG, M., ERIKSSON, L., KOROLEV, N., LAAKSONEN, A., LOHIKOSHI, R., LYUBARTSEV, A., PINAK, M. and SCHYMAN, P. 2005, Solvating, manipulating, damaging and repairing DNA in a computer. *J.Quant.Chem.*, in press

37） Schyman, P., Dahlberg, M., Pinak, M., Bunta, J., Lyubartsev, A., Korolev, N., Lohikosk, R., Eriksson, L. and Laaksonen, A. Modeling, manipulating, damaging and repairing DNA in a computer. Theoretical Biophysics Symposium "TeoBio-05", Orebro, Sweden, June 28-July 1, 2005.

38） Fujimoto, H., Pinak, M., Nemoto, T., O'Neill, P., Kume, E., Saito, K. and Maekawa, H. Molecular dynamics simulation of clustered DNA damage sites containing 8-oxoguanine and abasic site. The 34th Annual Meeting of the European Society for Radiation Biology, Leicester, UK, September 5-8, 2005.

39） Kotulic Bunta, J., Laaksonen, A., Nemoto, T. and Pinak, M. DNA strand break – structural properties studied by molecular dynamics simulation. 4th European Conference on Computational Biology, Madrid, Spain, September 28-October 1, 2005.

40） Kotulic Bunta, J., Pinak, M. and Saito, K. Radiation Damage in DNA: Computational Study of the Strand Breaks. The 1st Asian Congress of Radiation Research, Hiroshima, Japan, November 16-17, 2005

41） PINAK, M. Radiation and non-radiation damage to DNA: onset of molecular instability and carcinogenesis. Theoretical explorations on DNA damage and repair. The 7th Environmental radioactivity workshop, KEK, Tsukuba, Japan, March 7-9, 2006.

42） *Published proceeding*: Pinak, M. and Kotulic Bunta, J. Radiation and non-radiation damage to DNA: onset of molecular instability and carcinogenesis. Theoretical explorations on DNA damage and repair., in press

43） 「日本人成人女性ボクセルファントムの開発」 （2005 年日本原子力学会春の年会）

44） Japanese adult male voxel phantom constructed on the basis of CT-images. Radiation Protection Dosimetry (to be submitted)

45） H. Terada and M. Chino,
"Development of a long-range atmospheric transport model for nuclear emergency and its application to the Chernobyl nuclear accident,"
Proc. 2nd International Conference on Radioactivity in the Environment , Nice, France, October 2 - 6 (2005).

【 量子ビーム応用研究部門 】

1） Arauzo-Bravo, M., Fujii, S., Kono, H., Ahmad, S. & Sarai, A. (2005). Sequence-Dependent

Conformational Energy of DNA Derived from Molecular Dynamics Simulations:Toward Understanding the Indirect Readout Mechanism in Protein-DNA Recognition. *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 16074-16089.

2） Arauzo-Bravo, M., Fujii, S., Kono, H. & Sarai, A. (2006). Disentangling the Role of Tetranucleotide in the Sequence-Dependence of DNA Conformation: A Molecular Dynamics Approach. *Asian Pacific Conference of Bioinformatics, APCB06*, 227-236.

3）藤井聡，竹中繁織，河野秀俊，郷信広 & 皿井明倫．(2005)．分子動力学による DNA 構造の配列依存的特性の解析．第 43 回日本生物物理学会年会，札幌.

4）Marcos, A.-B.，河野秀俊，藤井聡 & 皿井明倫．(2005). Molecular Dynamics Simulations of DNA: Application to the Specificity of Protein-DNA Recognition. 第 43 回日本生物物理学会年会，札幌.

5）藤井聡，河野秀俊，郷信広 & 皿井明倫. (2005)．分子動力学による DNA 配列の構造特性の解析－蛋白質による DNA 配列の間接認識の理解に向けて－．第 5 回日本蛋白質科学会年会，福岡.

6） A. Kitao, K. Yonekura, S. Maki-Yonekura, F. A. Samatey, K. Imada, K. Namba, and N. Go: Switch interactions control energy frustration and multiple flagellar filament structures, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 103, 4894-4899, 2006

7）宮下敦巳、大沼敏治、吉川正人、岩沢美佐子、中村智宣、土田秀一、“第一原理分子動力学シミュレーションによるアモルファス SiO2/SiC 界面の生成”、 応用物理学会「SiC 及び関連ワイドギャップ半導体研究会」第 14 回講演会 (11 月 10 日～11 日、京都大)(2005).

8）大沼敏治、宮下敦巳、岩沢美佐子、吉川正人、中村智宣、土田秀一、“第一原理計算による SiO2/4H-SiC(0001)界面における熱酸化過程の動的シミュレーション”、応用物理学会「SiC 及び関連ワイドギャップ半導体研究会」第 14 回講演会 (11 月 10 日～11 日、京都大)(2005).

9） A.Miyashita, T.Ohnuma, M.Yoshikawa, M.Iwasawa, T.Nakamura, H.Tsuchida, “Generation of amorphous SiO2/SiC interface by the first-principles molecular dynamics simulation”, The First International Symposium on Development of Silicon-based Functional Materials, (21 Nov. 2005, Kiryu).

10） M. Maekawa, A. Kawasuso, M. Yoshikawa, A. Miyashita, R. Suzuki, T. Ohdaira,“Structure of SiO2/4H-SiC interface probed by positron annihilation spectroscopy”,Phys.Rev.B 73 014111 (2006).

11）宮下敦巳、大沼敏治、岩沢美佐子、吉川正人、土田秀一、“アモルファス SiO2/SiC 界

面構造の第一原理計算による生成”、春季第 53 回応用物理学関係連合講演会 (3 月 22 日～26 日、武蔵工大)(2006)

12）大沼敏治、宮下敦巳、岩沢美佐子、吉川正人、中村智宣、土田秀一、“SiO2/4H-SiC(0001)界面における熱酸化過程の第一原理分子動力学シミュレーション”、春季第 53 回応用物理学関係連合講演会 (3 月 22 日～26 日、武蔵工大)(2006)

13） T. Hosokai, K. Kinoshita, A. Zhidkov et al., “Observation of strong correclation between quasimonoenergetic beam generation by laser wakefield and laser guiding inside a preplasma cavitychannel”, Phys. Rev. E 73, 036407 (2006)

14）T. Ohkubo, A. Zhidkov, T. Hosokai, K. Kinoshita, M. Uesaka, “Effect of density gradient on short-bunch injection by wave breaking in the laser wake field accelelration” Physics of Plasmas 13 (2006)

15）T. Ohkubo, S.V. Bulanov, A. Zhidkov, et all, “Wave-breaking injection of electrons to laser wake field in plasma channels” Phys. Rev. E (2006) submitted

16）T. Hosokai, K. Kinoshita, A. Zhidkov et al., “Effect of external static magnetic field on emittance and total charge of electron beams generated by the laser wake field acceleration” Phys. Rev. Letters, (2006) submitted

17）A. Maekawa, A. Zhidkov, K. Nemoto et al., Intensity and density effects on self-injection scheme in a

18）A. Yamazaki, H. Kotaki, I. Daito, M. Kando, S. V. Bulanov, T. Zh. Esirkepov, S. Kondo, S. Kanazawa, T. Homma, K. Nakajima, Y. Oishi, T. Nayuki, T. Fujii, K. Nemoto. Quasi-monoenergetic electron beam generation during laser pulse interaction with very low density plasmas. Physics of Plasmas 12, 093101 (2005).

19） Sergei V. Bulanov, Mitsuru Yamagiwa, Timur Zh. Esirkepov, James K. Koga, Masaki Kando, Yutaka Ueshima, Kanji Saito, Daisuke Wakabayashi. Spectral and dynamical features of the electron bunch accelerated by a short-pulse high intensity laser in an underdense plasma. Physics of Plasmas 12, 073103 (2005).

20）Alexander S. Pirozhkov, Sergei V. Bulanov, Timur Zh. Esirkepov, Michiaki Mori, Akito Sagisaka, and Hiroyuki Daido. Attosecond pulse generation in the relativistic regime of the laser-foil interaction: The sliding mirror model. Physics of Plasmas 13, 013107 (2006).

21）Alexander S. Pirozhkov, Sergei V. Bulanov, Timur Zh. Esirkepov, Michiaki Mori, Akito Sagisaka, Hiroyuki Daido. Generation of high-energy attosecond pulses by the relativistic-irradiance short laser pulse interacting with a thin foil. Physics Letters A 349, 256–263 (2006).

22） T. Esirkepov, M. Yamagiwa, and T. Tajima. Laser Ion-Acceleration Scaling Laws Seen in Multiparametric Particle-in-Cell Simulations. Physical Review Letters 96, 105001 (2006).

23）Alexander S. Pirozhkov, Sergei V. Bulanov, Timur Zh. Esirkepov, Michiaki Mori, Akito

Sagisaka, and Hiroyuki Daido. Attosecond pulse generation in the relativistic regime of the laser-foil interaction: The sliding mirror model. Physics of Plasmas 13, 013107 (2006).

24) Alexander S. Pirozhkov, Sergei V. Bulanov, Timur Zh. Esirkepov, Michiaki Mori, Akito Sagisaka, Hiroyuki Daido. Generation of high-energy attosecond pulses by the relativistic-irradiance short laser pulse interacting with a thin foil. Physics Letters A 349, 256–263 (2006).

25) T.Otobe, "Enhanced ionization of N2 molecule under the intense laser field ", International Symposium on Ultrafast Intense Laser Science, Hawaii, U.S.A
10 Nov, 2005

26) 乙部智仁 「強光子場中にある N2 分子の enhanced ionization」平成 18 年日本物理学会春季大会 愛媛県 松山大学 成 18 年 3 月 27 日

27) 乙部智仁 「First-principle calculation for ionization of large molecules」 分子構造討論会 東京都 タワーホール船堀場所 2005 年 9 月 28 日

28) 乙部智仁「First-principle calculation for ionization of large molecules」LPHYS'05 京都 けいはんなプラザ 2005 年 7 月 4 日

29) S.V. Bulanov, M. Yamagiwa, T.Zh. Esirkepov, J.K. Koga, M. Kando, Y. Ueshima, K. Saito, D. Wakabayashi Spectral and dynamical features of the electron bunch accelerated by a short-pulse high intensity laser in an underdense plasma Phys. Plasmas, Vol. 12, No. 7, 073103 (2005)

30) T. Esirkepov, S.V. Bulanov, M. Yamagiwa, T. Tajima Electron, Positron, and Photon Wakefield Acceleration: Trapping, Wake Overtaking and Ponderomotive Acceleration
Physical Review Letters, Vol. 96, 014803 (2006)

31) M. Yamagiwa, S.V. Bulanov, T.Zh. Esirkepov, J. Koga, M. Kando, Y. Ueshima, K. Saito, D. Wakabayashi Simulation of electron bunch generation by an ultrashort-pulse high-intensity laser-driven wakefield
Laser Physics, Vol. 16, No. 2, pp. 252-258 (2006)

32) T. Ikeda, M. Hirata, and T. Kimura,
"Hydrolysis of Al3+ from constrained molecular dynamics",
J. Chem. Phys. 124, 074503 (2006).

33) 寺倉清之、池田隆司、Mauro Boero、
"第一原理分子動力学法による水の物理・化学的性質のシミュレーション～超臨界水と高圧下メタンハイドレート～"、 低温科学 64, 57 (2005).

34) 池田隆司、Mauro Boero、寺倉清之、
"アルカリ金属イオンの水和"、
日本物理学会2005年秋季大会、京都、9月19日 (2005)

35) 池田隆司、

“超高圧下の水の第一原理分子動力学シミュレーション”、
日本物理学会第61回年次大会、愛媛、3月29日 (2005)

【 核融合研究開発部門 】

1）TANI Keiji, NISHIO Satoshi, TOBITA Kenji et al
“Ripple Loss of Alpha Particles in a Low-Aspect-Ratio Tokamak Reactor”,
9th IAEA Technical Meeting on “Energetic Particles in Magnetic Confinement Systems”, November 2005, Takayama

２）TANI Keiji, TOBITA Kenji, IIO-TSUJI Shunji et al
“Confinement of Alpha Particles in a Low-Aspect-Ratio Tokamak Reactor”,
IEEJ Trans. FM, Vol.125, No.11, 2005

3）小林憂樹，三枝幹雄、濱松清隆,「アルファ粒子の非等方性軌道損失と角運動量保存から発生するトカマクプラズマの回転に関するシミュレーション」、第 22 回プラズマ・核融合学会年会、東京、12月1日、2005年

4）小林憂樹，三枝幹雄、濱松清隆，飛田健次、「アルファ粒子の非等方性軌道損失と角運動量保存から発生するトカマクプラズマの回転に関するシミュレーション」電気学会プラズマ研究会，日立市，1月12日、2006年

５） T. Takizuka, M. Hosokawa, "Particle Simulation of the Transient Behavior of One-dimensional SOL-Divertor Plasmas after an ELM Crash", 10th International Workshop on Plasma Edge Theory in Fusion Devices", Forschungszentrum, Juelich, 17-19 Oct 2005;
to be published in Contrib. Plasma Phys. 46 , No. 7-9 (2006).

6）滝塚知典，林伸彦，細川哲成,「ELM 崩壊後の SOL/ダイバータプラズマの1次元粒子シミュレーション」，第 22 回プラズマ・核融合学会年会，東京，2005 年 11 月 29 日-12 月 2 日.

7） 川島寿人，清水勝宏，滝塚知典，桜井真治，仲野智友英，朝倉信伸幸，小関隆久，「原子力機構における SOL/ダイバータコードの開発とシミュレーション研究の現状」，第 22 回プラズマ・核融合学会年会，東京, 11 月 29 日-12 月 2 日 (招待講演).

8）滝塚知典，清水勝宏，川島寿人，林伸彦，細川哲成「ダイバータプラズマの構造とダイナミックス」，第 11 回 NEXT 研究会, 3 月 6-7 日，京都.

9）T. Ozeki, N. Aiba, N. Hayashi, T. Takizuka, M. Sugihara, and N. Oyama, "Modeling of MHD Stability Consistent to the Transport", in Proc. of 32nd EPS Conference on Plasma Phys. Tarragona, 27 June - 1 July 2005 ECA Vol.29C, P-2.050 (2005) (http://eps2005.ciemat.es/papers/pdf/P2_050.pdf).

10）T. Ozeki, et al., "Integrated Simulation Code for Burning Plasma Analysis", International Energy Agency Workshop on Burning Plasma Physics and Simulation, Tarragona, 4-5 July

2005, accepted in Fusion Sci. Tech.

11）小関隆久、相羽信行、林伸彦、滝塚知典、杉原正芳、大山直幸、「燃焼プラズマへ向けた輸送・MHD結合モデルによるELMシミュレーション」、第22回プラズマ・核融合学会年会、東京、11月29日-12月3日

12）“Global profile effects and structure formations in toroidal electron temperature gradient driven turbulence”, Y. Idomura, S. Tokuda, and Y. Kishimoto, Nucl. Fusion 45, 1571-1581 (2005).

13）“Comparisons of Gyrokinetic PIC and CIP codes”, Y. Idomura, S. Tokuda, and Y. Kishimoto, 32nd EPS Plasma Physics Conference, Tarragona, Spain, 2005, p1.044 (poster).

14）“Gyrokinetic simulations of ETG turbulence and zonal flows in positive/reversed shear tokamaks”, Y. Idomura, Festival de Theorie 2005, Aix-en-Provance, Frace, 2005 (invited).

15）井戸村泰宏、“電子温度勾配駆動乱流における自己組織化”プラズマ・核融合学会第22回年会、2005年11月29日、東京 (oral)

16）井戸村泰宏，“微視的乱流のδf シミュレーション”,J. Plasma Fusion Res. 81, 581-592(2005).

17）渡邉智彦, 洲鎌英雄, 井戸村泰宏，“微視的乱流シミュレーションにおける将来に向けての課題”J. Plasma Fusion Res. 81, 581-592(2005).

18） Y. Kagei, Y. Kishimoto and T. Miyoshi, “A Finite Volume Approach to the Fully Compressible MHD Simulation of High □ Tokamak Plasmas”, 47th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, Oct. 24-28, 2005, Denver, USA.

19）Y. Kagei, Y. Kishimoto and T. Miyoshi, “Simulation of Nonlinear Interactions between n=1 Internal Kink and High-n Pressure-driven MHD Instabilities”, Workshop on Active Control of MHD Stability 2005, Oct. 31-Nov. 2, 2005, Madison, USA.

20）Y. Kagei, Y. Kishimoto and T. Miyoshi, “Interactions between Low-n Internal Kink Mode and High-n Ballooning Mode Associated with Saturation”, US/Japan Workshop on MHD Stability Control and Related Confinement of Toroidal Plasmas, Feb. 6-8, 2006, Naka, Japan.

21）影井康弘、岸本泰明、三好隆博、“非線形MHDシミュレーションによる内部キンクモードの有限ベータ効果”、日本物理学会2005年秋季大会、京田辺市、2005年9月19-22日

22）影井康弘、岸本泰明、三好隆博、“内部キンクモードとバルーニングモードが共存する高ベータプラズマの非線形ＭＨＤダイナミクス”、プラズマ核融合学会 第22回年会、江戸川区、2005年11月29日-12月2日

23）影井康弘、岸本泰明、三好隆博、“圧力駆動型高n MHDモードと内部キンクモードの相互作用の解析”、日本物理学会第61会年次大会、松山市、2006年3月27-30

24）多階層ダイナミックスが支配するプラズマの構造形成に関する研究（English

version :Research on structure formation of plasmas dominated by multiple hierarchical dynamics)岸本泰明 (Y. Kishimoto) 平成 16 年度　地球シミュレータ利用成果報告書（平成 17 年発刊）Annual Report of the Earth Simulator Center :　April 2004-March 2005, p261-264（Internet　http://www.es.jamstec.go.jp 掲載）

25）粒子コードによるレーザープラズマ相互作用シミュレーションの発展
（特集／レーザー核融合とレーザープラズマ応用の発展）坂上仁志、岸本泰明、千徳靖彦、田口俊弘 プラズマ・核融合学会誌、vol. 81 Supplement, p.64-75 (2005)
Progress of Laser-Plasma Interaction Simulation with the Particle-In-Cell Code
S. Sakagami, Y. Kishimoto, Y. Sentoku, and T. Taguchi
Journal of Plasma and Fusion Research, vol. 81 Supplement, p.64-75 (2005)

26） A paradigm of kinetic simulation including atomic and relaxation processes
– A sudden event in lightning process –
Y. Kishimoto and T. Masaki　J. Plasma Phys. accepted for publication (2006)

27）Ionization dynamics in high power laser-matter interaction
T. Masaki and Y. Kishimoto　J. Plasma Phys. accepted for publication (2006)

28）Multi-stage ionization dynamics of carbon film irradiate high power lasers
T. Masaki and Y. Kishimoto
Journal of Plasma and Fusion Research, 81, No.10, 643-644 (2005)
Rapid communication

29）Role of magnetic shear in large-scale structure formation in electron temperature gradient driven turbulenc,　J.Q. Li and Y. Kishimoto
Physics of Plasmas 12, 054505 (2005)

30）Dynamics of large-scale structure and electron transport in tokamak microturbulence simulations, J.Q. Li, Y. Kishimoto, N. Miyato, T. Matsumoto and J.Q. Dong　Nucl. Fusion 45, No 11, 1293-1301(2005)

31）Dynamics of secondary large-scale structures in ETG turbulence simulations
Jiquan Li, Y Kishimoto, J.Q. Dong, N. Miyato and T. Matsumoto
Plasma Science & Tech., vol.8, 110 (2006)

32）Large-scale structures and turbulence saturation in gyrofluid ETG simulations
Jiquan Li, Y Kishimoto, N. Miyato, T. Matsumoto and J.Q. Dong
J. Plasma Phys. accepted for publication (2006)

33) Effect of mean flow on the interaction between turbulence and zonal flow
K.Uzawa, Y. Kishimoto, J.Q. Li,Plasma and Fusion Research: Letters, Vol.1, 024 (2006)

34）N. Miyato, J. Q. Li and Y. Kishimoto, “Study of a drift wave-zonal mode system based on global electromagnetic Landau-fluid ITG simulation in toroidal plasmas”, Nucl. Fusion 45, 425-430 (2005).

35）J. Q. Li, Y. Kishimoto, N. Miyato, T. Matsumoto and J. Q. Dong, “Dynamics of large-scale structure and electron transport in tokamak Microturbulence simulations”, Nucl. Fusion 45, 1293-1301 (2005).

36） N. Miyato, Y. Kishimoto and J. Q. Li, “Zonal flow and GAM dynamics and associated transport characteristics in reversed shear tokamaks”, 19th International Conference on Numerical Simulation of Plasmas and 7th Asia Pacific Plasma Theory Conference, Nara, Japan (July 12-15, 2005).

37） N. Miyato, Y. Kishimoto and J. Q. Li, “Nonlocal behaviour of zonal flows in tokamak plasmas”, 10th IAEA Technical Meeting on H-mode Physics and Transport Barriers, St. Petersburg, Russia (September 28-30, 2005).

38）J. Q. Li, Y. Kishimoto, J. Q. Dong, N. Miyato and T. Matsumoto, “Dynamics of secondary large-scale structure in ETG turbulence simulations”, Plasma Science and Technology 8, 110-113 (2006).

39）宮戸直亮、岸本泰明、李継全、“トカマクプラズマ中の帯状流に対する ρ_* の効果”、 日本物理学会第 61 回年次大会、 愛媛大学・松山大学、2006 年 3 月 27 日－30 日

40）Y.Ishii,M.Azumi and A.I.Smolyakov,「Magnetic island Evolution in Rotating Plasmas」, 19th International Conference on Numerical Simulation of Plasmas and 7th Asia Pacific Plasma Theory conference, Nara-city, Japan, July 12-15, 2005

41）Y.Ishii,M.Azumi and A.I.Smolyakov,「Rapid Evolution of the Magnetic Island in the Rotating Plasmas」, 47th Annual Meeting of the Division of Plasma Physics, Denver, Colorado, Oct.24-28,2005

42) Y.Ishii,M.Azumi and A.I.Smolyakov,「Long Term Evolution of the Forced Magnetic Island in the Rotating Plasmas」, 7th ITPA MHD Topical Group Meeting and US-Japan Workshop on MHD Stability Control and Related confinement of Toroidal Plasmas, Naka-city,Japan, Feb.6th-9th, 2006.

43）石井康友 、安積正史、A.Smolyakov, 「回転プラズマにおける外部駆動された磁気島の長時間成長」、日本物理学会第６１回年次大会、松山市、2006.3.27

44）Hiromasa Iida, “Improvement of Equatorial Port Plug Shield-mitigation of gap streaming effects-”, IDM No: ITER_D_22HGCD v1.2 (NAG-256), May. 2005

45） Hiromasa Iida, “Neutron Current at the Inlet of the NB Ion Source Tank”, IDM No: ITER_D_24DUNP v1.0 (NAG-257), Aug. 2005

46）Hiromasa Iida, “Additional Dose Rate Analyses for Magnet System- Slide Surface for CS, Insulator for Sensors, and TF outboard legs-”, IDM No: ITER_D_24DUP7 v1.0 (NAG-258), Aug. 2005

47）Hiromasa Iida and L. Lu, “Required Thickness for the Ceiling Slab of Hot Cell Repair Room from Radiation Shielding Point of View”, IDM No: ITER_D_23LHZE v1.0 (NAG-259), Feb, 2006

48）H. Iida, L. Petrizzi, Y. Wu, P. Batistoni, U. Fisher, T. Nishitani, E. Polunovskiy, S. Zheng ,Y. Meng, ” One-Step Monte Carlo Method - dose rate calculation after shutdown-” IDM No: N

73 RI ?? 05-04-04 NAG-260, June, 2006

49）H.Iida, “Re-assessment of Dose on PTFE in the Vacuum Vessel Support with the latest Support Design”, IDM No: ITER_D_222NE5 v1.0,NAG-261, May., 2006

50）H. Iida, L. Petrizzi, E. Polunovskiy, G. Federici, " Effect of Shield Blanket Mixture Change on the Nuclear Heat in the TF Coil inboard Legs ", IDM No: ITER_D_222NE5 v1.0,NAG-261, May., 2006

60）H. Iida,, L.Petrizzi, V. Khripunov, G. Federici, E. Polunovskiy “Nuclear Analyses of Some Key Aspects of the ITER Design with Monte Carlo Codes”, Fusion Engineering and Design 74 (2005) 133-139

【 次世代原子力システム研究開発部門 】

1） H. Yamano, S. Fujita, Y. Tobita, I. Sato and H. Niwa, “Development of a Three-Dimensional CDA Analysis Code: SIMMER-IV, and Its First Application to Reactor Case,” Proc. Technical Meeting on Severe Accident and Accident Management for Nuclear Power Plants, Tokyo, Japan (March 14-16, 2006).

2）山野秀将, 飛田吉春, 佐藤一憲, 丹羽元, “3次元安全解析コード SIMMER-IV による炉心損傷事象推移の評価精度の向上,” 日本原子力学会 2005 年秋の大会, H15, 八戸 (September 13-15, 2005)

3）T.UWABA,Masahiro ITO, Shigeharu UKAI and Michel PELLETIER
“Development of a FBR Fuel Bundle-duct Interaction Analysis Code-BAMBOO
Analysis Model and Verification by Phenix High Burn-up Fuel Subassemblies.
Journal of Nuclear Science and Technology, Vol.42,No.7,pp.608-617,July 2005

4）神智之、大木繁夫:“LLFP 核変換率に対する補正因子の評価“、JNC TN9410 2005-012

5）横山賢治、沼田一幸、他：“高速実験炉「常陽」MK-I 性能試験再評価と最新炉物理解析手法に基づく解析評価 “、JNC TN9400 2005-024 (2005)

6）”International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments”, NEA/NSC/DOC(2006) 1, March 2006 Edition

7）川島 滋代、上出 英樹 五十嵐 実、T 字管合流部における温度変動挙動に関する研究(8) － DNS を用いた枝管噴流前縁での変動原因の検討 －、2005 年日本原子力学会秋の大会、八戸工業大学、G43 (2005).

8）H. Ogawa, M. Igarashi, N. Kimura, and H. Kamide,
"Experimental Study on fluid mixing phenomena in T-pipe junction with upstream elbow," Proc. 11th Int. Top. Mtg on Nuclear Thermal-Hydraulics (NURETH-11), Avignon, France, Oct. 2-6 (2005).

9）豊岡 淳一 SIMMER-IV コードを用いた EAGLE プロジェクト炉内中規模試験解析
2005 年 JNC 報告書（JNC TN9400 2005-036）
2006 年日本原子力学会 春の年会にて口頭発表

10）内堀　昭寛, 大島　宏之,“ナトリウム冷却高速炉のガス巻込みに関する研究(5)－1/1.8 スケール液面部分モデル水流動試験の数値解析－”, 日本原子力学会 2005 年秋の大会, G51.

11）T. Sakai, et al., “Study on the Gas Entrainment Design Method by CFD data on Steady Cylindrical Systems for a Sodium-cooled Reactor”, 2005 Int. Congress on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP’06), Paper No. 6409, Reno, NV USA, June 4-8, 2006.

12） A. Uchibori, T. Sakai and H. Ohshima “Numerical Prediction of Gas Entrainment in The 1/1.8 Scaled Partial Model of The Upper Plenum”, Fifth Korea-Japan Symposium on Nuclear Thermal Hydraulics and Safety (NTHAS5), Jeju, Korea, 2006.

13） T. Takata, A. Yamaguchi, “Numerical Methodology of Sodium-Water Reaction with Multiphase Flow Analysis”,Nuclear Science and Engineering, 150, 221-236, 2005.

14）T. Takata, A. Yamaguchi, H. Ohshima, A. Watanabe, “Computational Sensitivity Study on Sodium-Water Reaction Phenomenon”, Journal of Nuclear Science and Technology, Vol.43, No.5, pp.514-525, 2006.

15）須田一則, 渡部 晃, 山口 彰, 大島宏之, “多次元コード SERAPHIM による反応領域最高温度の感度解析 －反応初期から中期における反応生成物及び温度特性－” ,日本原子力学会 2006 春の年会 要旨集 L28, 2006.

16）M. Tanaka, et al., Numerical Simulation of the Flow Characteristics in T-Junction with Turbulence Promoter, Int. Conf. on Jets, Wakes and Separated Flows, P-027, Oct. 5-8, Toba-shi, Japan, 2005.

17） 村上諭、田中正暁、檜原秀樹、岩本幸治、”乱流プロモータによる温度ゆらぎ緩和効果の解析的検討”、日本原子力学会 2006 年春の年会.

18）H. Ohshima, Y. Imai, “Validation Study of Thermal-Hydraulic Analysis Program “SPIRAL” for Fuel Pin Bundle of Sodium-Cooled Fast Reactor”, The 11th Int. Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics (NURETH-11), Paper No. 423, Avignon, France, October 2-6, 2005.

19）内堀　昭寛，大島　宏之,“X-FEM を用いた融解・凝固現象の数値解析(1) －1 次元融解･凝固問題に対する手法開発と検証解析－”, 日本原子力学会 2005 年春の年会, H45

20）内堀　昭寛，大島　宏之,“X-FEM を用いた融解・凝固現象の数値解析(2) －2 次元融解･凝固問題に対する手法開発と検証解析－”, 日本原子力学会 2006 年春の年会, L42

21）O. Mihalache, T. Yamaguchi, Kouji Date, M. Ueda, T. Yamashita, “Detection Tests of Small Defects in SG Tubes using Multiple Vertical and Horizontal Remote Field ECT Coils”, Annual Meeting of the Atomic Energy Society Japan, Oarai, 24-26 March, 2006.

22）O. Mihalache, “Detection of Small Defects in Magnetic SG Tubes using Multiple Vertical

and Horizontal Remote Field Eddy Currents Coils", The 11th Monju-FBR Centre Symposium, Tsuruga, Japan, March 7-8, 2006.

23) O. Mihalache, T. Yamaguchi, Kouji Date, M. Ueda, T. Yamashita, "Detection of Small Defects in Magnetic SG Tubes using Multiple Vertical and Horizontal Remote Field Eddy Currents Coils", The 9th Symposium on Nondestructive Surface Testing, Tokyo, Japan, February 2-3, pp. 57-62, 2006.

24) O. Mihalache, T. Yamaguchi, M. Ueda, T. Yamashita, "3D Simulation of Detection of Small Defects in SG tubes using Multiple Vertical and Horizontal Remote Field ECT Coils", Annual Meeting of the Atomic Energy Society Japan, Hachinohe Institute of Technology, Aomori, 28-30 Sept., 2005.

25) O. Mihalache, T. Yamaguchi, M. Ueda and T. Yamashita, " Experimental Confirmation of 3D Numerical Simulations of Remote Field Signal from Defects in Magnetic Steam Generator Tubes" , Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation, Portland, Maine, 25 July, 2005.

26) O. Mihalache, T. Yamaguchi, M. Ueda, T. Yamashita, "Advancement in 3D Remote Field ECT Simulations for Monju SG Tubes", Annual Meeting of the Atomic Energy Society Japan, Tokai University, Shizuoka, March, 2005.

【 地層処分研究開発部門 】

1) T. Ohkubo, Diffusivity of fluids in structured plate-like obstacles by Monte Carlo simulation, Transport in Porous Media, submitted

【 大洗研究開発センター 】

1) Y. Nagao, et al., Development of tritium production measurement method for in-pile tests of fusion blanket in the JMTR, Fusion Engineering and Design, vol. 81, 2006, p.619-623.

【 計算科学技術推進センター 】

1) M.Itakura,T.Kadoyoshi, H.Kaburaki, S.Jitsukawa: "Molecular dynamics and quasi-two dimensional dislocation dynamics simulations on the hardening mechanism of FCC metals", MRS(Materials Research Society) Fall Meeting, Boston, 2005.

2) 西田、松原、田、羽間、鈴木、中島、谷、原子力プラントのための 3 次元仮想振動台の構築、日本原子力学会 論文集、投稿中

3) 「大規模システムの地震応答解析で大規模解析技術コンクールに入賞」,日本原子力学会誌, Vol. 48, No 2, pp. 8-9, 2006.

4) F.Shimizu, S.Ogata, H.Kaburaki and J.Li, "Approaching the Universal Yield Point of Bulk Metallic Glasses from Molecular Dynamics Simulations", Materials Research Society 2005

Fall Meeting, Boston (MA) USA, November 2005.

5）J.Li, F.Shimizu, S.Ogata and H.Kaburaki, “Approaching the Universal Yield Point of Bulk Metallic Glasses from Molecular Dynamics Simulations”, TMS 135th Annual Meeting and Exhibition, San Antonio (TX) USA, November 2005.

6） F.Shimizu, S.Ogata and J.Li, “Yield Point of Metallic Glass”, Acta Materialia (accepted 2006).

7）T.Kadoyoshi, H.Kaburaki, F.Shimizu, H.Kimizuka, S.Jitsukawa, J.Li: “Molecular dynamics study on the formation of stacking fault tetrahedara and unfaulting of Frank loop in fcc metals”, to appear in Act.Mat.

8） Ken-ichi Ebihara and Hideo Kaburaki,“Lattice Boltzmann Simulation of Solution Chemistry for Crevice Corrosion”, Mathematics and Computers in Simulation)

9）「軽水炉材料の照射損傷機構に関する研究会」電中研（東京）2005.10.28
山口正剛、西山裕孝、志賀基之、蕪木英雄
「リン偏析による鉄の粒界脆化－第一原理計算による研究－」

10） 日本金属学会、2006 年春期学術講演大会：早稲田大学（東京）2006.3.22
山口正剛、西山裕孝、志賀基之、蕪木英雄
「硫黄の偏析による鉄とＮｉの粒界脆化－第一原理計算による研究－」

11）2005 Materials Research Society, Fall Meeting: 2005.11.28 米国ボストン
M. Yamaguchi, Y. Nishiyama, M. Shiga, H. Kaburaki
“First-principles calculations on the embrittlement mechanism of bcc iron (Fe) grain boundaries by impurity segregation”

12）M. Yamaguchi, M. Shiga, H. Kaburaki: Science 309(2005)1677d
“Response to Comment on Grain Boundary Decohesion by Impurity Segregation in a Nickel-Sulfur System”

13）Muneyuki Tsuda, Wilson Agerico Dino, Hideaki Kasai and Hiroshi Nakanishi,
“Magnetized/charged MgH2-based hydrogen storage materials”,
Applied Physics Letters 86 (2005) 213109.

14）Muneyuki Tsuda, Wilson Agerico Dino, Hideaki Kasai, Hiroshi Nakanishi and Hiroshi Aikawa,
“Mg-H dissociation of magnesium hydride MgH2 catalyzed by 3d transition metals”, Thin Solid Films 509 (2006) 157.

15） Muneyuki Tsuda and Hideaki Kasai,
“Ab initio study of alloying and straining effects on CO interaction with Pt”,
Physical Review B 73 (2006) 155405.

16）津田宗幸，Eben Sy Dy，笠井秀明，
「Pt(111)上の CO 吸着における歪みの効果」（口頭），

第 46 回真空に関する連合講演会，学習院大学，東京，2005 年 11 月.

17）津田宗幸，笠井秀明，
「合金化・歪みによる白金の耐 CO 被毒メカニズム」（口頭），
日本物理学会第 61 回年次大会，愛媛大学，愛媛，2006 年 3 月.

18）Muneyuki Tsuda, Eben Sy Dy and Hideaki Kasai,
“Comparative study of CO mobility on Pt(111) modified by various metals” (Poster), International Symposium on Surface Science and Nanotechnology (ISSS-4), Omiya Sonic City, Saitama, Japan, November 14-17, 2005.

19） 笠井秀明，中西寛，津田宗幸，
「一酸化炭素の吸着性が制御された触媒および触媒の製造方法，並びにその利用」，
特願 2006-130825.

20）"Overcoming Liquid Hydrogen storage problem by Computational Materials Design (CMD)”, R. Muhida, W. A. Dino, H. Kasai, 2006 International Workshop on Science and Engineering (Osaka Univ-ITB-De La Salle University-Croatia University), 17 May 2006, Department of Applied Physics Osaka University, Japan.

21）"Potential Energy Surface (PES) for Reactive Ion Etching (RIE)　Cluster model of reactive ion etching (RIE) on FeNi Cluster "
R. Muhida, M. David, S. Matsumoto, W. A. Dino, H. Akinaga, H. Kasai, H. Nakanishi,
61th (spring) The Physical Society of Japan (JPS) annual meeting ,
27-30 March 2006, Ehime, Japan.

22）"Rreactive ion etching (RIE) of an interaction between FeNi4 cluster and CO ions - Molecular orientational effect-"
R. Muhida, M. M. Rahman, W. A. Dino, H. Kasai, H. Nakanishi,
Workshop of 21st COE for young scientist in Japan ,
17 March 2006, Osaka University , Japan.

23）"Liquid Hydrogen storage problem: Increasing o-p H2 conversion yield”
R. Muhida, M. M. Rahman, W. A. Dino, H. Kasai, H. Nakanishi,
The 3rd workshop on environment and Energy (WEE 2006)
8-9 March 2006, Nakashima center, Osaka, Japan.

24）"Hydrogen storage problem: Increasing o-p H2 conversion yield”
R. Muhida, M. M. Rahman, W. A. Dino, H. Kasai, H. Nakanishi,
Hanoi University of Science-Osaka University Scientific workshop on material science 2006 15 February 2006, Osaka University, Japan

25）"Overcoming hydrogen storage: Increasing o-p H2 conversion yield”
R. Muhida, W. A. Dino, H. Kasai, H. Nakanishi,

2006 International Science and Engineering Workshop De La Salle University-Manila, Philippines – Osaka University, Japan
Osaka University, 2-3 February 2006, Osaka University, Japan

26）" Cluster model of reactive ion etching (RIE) of interaction between FeNi4 cluster and CO ions" ,R. Muhida, M. David, S. Matsumoto, W. A. Dino, H. Akinaga, H. Kasai, H. Nakanishi.,6th International Conference on Reactive Plasma and 23rd Symposium on Plasma Processing (ICRP-6/SPP-23), 24-27 January 2006, Hotel Taikanso, Matsushima, Sendai, Japan.

27） "Overcoming hydrogen storage: Increasing o-p H2 conversion yield”
R. Muhida, W.A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai,Asian Physics Symposium 2005 (APS 2005), 7-8 December 2005, Grand Aquila Hotel, Bandung.

28）"Magnetic properties of Vn(C6H6)n+1 (n=1,2) " R. Muhida, W. A. Dino, H. Kasai, H. Nakanishi,International Symposium on Surface Science and Nanotechnology (ISSS-4), 14-17 November 2005, Omiya Sonic City, Saitama, Japan.

29）"Ortho-para H2 conversion induced by inhomogeneity of spin density distribution. - Fe(OH)3 vs Mn(C6H6)2 clusters",R. Muhida, W.A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai, 45th Vacuum Society of Japan Annual Meeting ,9-11 November 2005, Gakushuin University, Tokyo.

30）"Increasing o-p H2 conversion yield using molecular orientation of H2 on surfaces and inhomogeneity of spin density distribution”,R. Muhida, W. A. Dino, Md. M. Rahman, M. David, H. Nakanishi, H. Kasai, K. Fukutani, T. Okano
The International Fuel Cell Workshop 2005,23-26 September 2005, Kofu, Yamanashi, Japan.

31）"Local magnetic moment of V(C6H6)2 -ab initio study-"
R. Muhida, H. Setiyanto, Md. M. Rahman,W. A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai,
60th (autumn) The Physical Society of Japan (JPS) annual meeting ,
12-15 September 2005, Doshishou University, Kyoto, Japan.

32）"Increasing o-p H2 conversion yield using molecular orientation of H2 on surfaces and inhomogeneity of spin density distribution” R. Muhida, W. A. Dino, M.M. Rahman, H. Nakanishi, H. Kasai, International workshop on Condensed Material Theory XXXIX (CMT29), 13-16 September 2005, International Institute for Advanced Study (IIAS), Kyoto, Japan.

33）"Effect of inhomogeneity of spin density on ortho-para H2 conversion yield on M(C6H6)2 (M=Mn, Fe, Co) clusters",
R. Muhida, H. Setiyanto, Md. M. Rahman, T. Kishi, W. A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai,

International Symposium on the Manipulation of Advance Smart Materials (ISMASM 2005),26-27 May 2005, Nara-Ken New Public Hall, Nara, Japan.

34）"Change in magnetic properties of multiple-decked sandwich clusters: M(C6H6)2 (M=Mn,Fe,Co) induced by H2 ",
R. Muhida, N. B. Arboleda, T. Kishi, M. Tsuda, W. A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai,
60th (spring) Physical Society of Japan (JPS) Annual Meeting ,
24-29 March 2005, Tokyo University of Science, Noda, Chiba, Japan.

35）"Ab initio study for a chemical reaction between metal transition ions (Cr and Fe) and NaDDC (Sodium diethyldithiocarbamate) ",H. Setiyanto, R. Muhida, Md. M. Rahman, W. A. Dino, H.K. Dipodjono, T. Kishi, S. Matsumoto, H. Kasai,
Journal of the Vacuum Society of Japan, 49 (2006) 137-141.

36）"Ab initio study for structure, electric properties and light emission of linear-trans-quinacridones ",A. Susanto, R. Mozo, R. Muhida, T. Kishi, M. M. Rahman, W. A. Dino, H. K. Dipojono, H. Kasai, The European Physical Journal D 38 (2006) 199 - 201.

37）"Molecular orientation dependence of ortho-para H2 conversion on Fe(OH)3 cluster induced by hyperfine contact interaction ",R. Muhida, M. David, Md. M. Rahman, W. A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai, K. Fukutani and T. Okano, The European Physical Journal D 38 (2006) 99 - 101.

38）"Ortho-para H2 conversion on multiple-decked sandwich clusters of M(C6H6)2(M=Mn,Fe,Co) induced by an inhomogeneity of spin density distribution",
R. Muhida, H. Setiyanto, Md. M. Rahman, W. A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai, K. Fukutani and T. Okano,
Thin Solid Films 509 (2006) 223-226.

39）"Density functional calculations for an adsorbed H2 on Fe(OH)3 by considering molecular orientation of H2 "
R. Muhida, A. Susanto, T. Kishi, T. A. Roman, W. A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai,
Journal of the Vacuum Society of Japan 48 (2005) 205-208.

40）"Density functional theory investigation for one-dimensional organic-metallic multiple-decked sandwich model",Md. M. Rahman, R. Muhida, W. A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai, Journal of the Vacuum Society of Japan 48 (2005) 232-234.

41）T.Nakamura et al.,
“Electron lateral transport and surface field generation by oblique incident laser pulses”,
35th Annual anomalous absorption conference, Fajardo, Puerto Rico, June 26-July 1,2005.

42）T.Nakamura et al.,“Hot electron generation by laser-cone interaction”,
Proceedings of 4th International conference on inertial fusion sciences and applications,

Biarritz, France, Sept.5-Sept.10,2005.

43）T.Nakamura et al.,“高強度レーザーによる固体照射面における表面電子加速”、
日本物理学会第 61 回年次大会、松山大学、2006 年 3 月 27 日～3 月 30 日.

44）T.Nakamura et al.,
“Generation and transport of fast electrons inside cone targets irradiated by intense laser pulses”,Laser and particle beams, Vol. 24, pp. 5-8, 2006.

45）"Is the Beckmann Rearrangement a Concerted or Stepwise Reaction?
A Computational Study". Yamabe, S.; Tsuchida, N.; Yamazaki, S. J. Org. Chem. 2005, 70, 10638-10644

46）"Symmetry or asymmetry in cheletropic additions forming cyclopropanes.",
Shinichi Yamabe, Noriko Tsuchida, Tsutomu Minato and Takahisa Machiguchi, Theoret. Chem. Accounts, 113, No.2, 95-106 (2005).

47）"Gas-phase ion/molecule reactions in C5F8", K. Hiraoka,* K. Fujita, M. Ishida,
T. Ichikawa, H. Okada, K. Hiizumi A. Wada and K. Takao, S. Yamabe* and N. Tsuchida, J. Phys. Chem. A, 109 No.6 1049-1056 (2005).

48）"Reaction Paths of Tautomerization between Hydroxypyridines and Pyridones",
N. Tsuchida and S. Yamabe*, J. Phys. Chem A., 109 No.9 1974-1980 (2005).

49）"Reaction Paths of the Water Assisted Neutral Hydrolysis of Ethyl Acetate",
Shinichi Yamabe*, Noriko Tsuchida and Yousuke Hayashida, J. Phys. Chem A., 109, No. 32, 7216-7224 (2005).

50）"Tropone is a mere ketone for cycloadditions to ketenes", Junko Okammoto,
Shinichi Yamabe*, Tsutomu Minato, Toshio Hasegawa and Takahisa
Machiguchi*, Helvetica Chimica Acta, vol. 88, 1519-1539 (2005).

51）"Revisiting Hydrogen [1,5] Shifts in Cyclopentadiene and Cycloheptatriene as Bimolecular Reactions", Shinichi Yamabe*, Noriko Tsuchida and Shoko Yamazaki, J. Chem. Theory Comput., vol.1, No.5, 944-952 (2005)

52）"A new mechanism for the addition of alcohols to disilenes revealed by DFT and ONIOM calculations". Yamabe, S.; Mizukami, N.; Tsuchida, N.; Yamazaki, S. Organometallics, submitted.

53）N. Ozawa, T.A. Roman, H. Nakanishi and H. Kasai,
“Quantum states of hydrogen (H, D, T) atoms on Cu(1 0 0) and (1 1 0) surfaces”,
Surface Science, in press.

54）“Polybutylene terephthalate on metals: a density functional theory and cluster models investigation”, Melanie David, Hideaki Kasai, Naoki Ando and Masanori Naritomi, J. Phys.: Condens. Matter, 18(2006) 1137-1142.

55）“A density functional theory-based investigation of adhesion of poly(butylene terephthalate)

on aluminum", Melanie David, Tanglaw Roman, Wilson Agerico Dino, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Naoki Ando and Masanori Naritomi, Thin Solid Films 509 (2006) 215-217.

56) "A Theoretical Analysis on the Interaction Between Tin(II) Porphyrin and Platinum and the Electronic Characteristics of Their Reaction Product", Dy, E. S. and Kasai, H., Chemical Physics Letters, 422 (2006) 539–542.

57) "Characterization of Platinum Porphyrins and Its Interaction with Oxygen by Density Functional Theory", Dy, E. S., Kasai, H., e-J. Surf. Sci. Nanotech., 3, 2005, 473-475.

58) "Characterization of the Im-(Im)PorFe Bond by Density Functional Theory", Dy, E. S. and Kasai, H., Thin Solid Films, 509 (2006) 212 – 214..

59) "Bis(histidine)/Bis(Imidazole) Heme Complex—Polymer Electrolyte Fuel Cell Application as an Alternative Cathode Electrode Catalyst", Dy, E. S., Dino, W. A., Tsuda, M., Kasai, H., e-J. Surf. Sci. Nanotech., 3, 2005, 233-236.

60) "Polybutylene Terephthalate Adhesion on Metals: A Density Functional Theory Investigation"、M. David*, T. Roman, W. A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai, N. Ando, M. Naritomi, 46th Annual Symposium of Vacuum Society of Japan; November 9-11, 2005, Gakushuin Unversity, Tokyo, Japan

61) "A Density Functional-Based Investigation of Adhesion of Poly(Butylene Terephthalate) on Aluminum", M. David*, T. Roman, H. Nakanishi1, H. Kasai, N. Ando, M. Naritomi, *International Symposium on the Manipulation of Advanced Smart Materials (ISMASM) 2005* , 26th and 27th of May, 2005, Nara-Ken New Public Hall, Nara, Japan

62) "A Study on the Adhesion of Polybutylene Terephthalate on Metals", M. David*, T. Roman, W. Agerico Dino, H. NakanishiA, H. KasaiA, N. Ando, M. Naritomi, The Physical Society of Japan 2005 Autumn Meeting, 22pYE-12, September 22, 2005, Doshisha University, Kyotanabe Campus.

63) "A novel neuroglobin-based oxygen storage device", Eben S. Dy＊and Hideaki Kasai, International Symposium on the Manipulation of Advanced Smart Materials, May 26, 2005, Nara-Ken New Public Hall, Nara, Japan.

64) "Interaction of Oxygen with Neuroglobin-based Heme Nanomaterial", Eben S. Dy* and Hideaki Kasai, 5th OU-DLSU Science Research Workshop, August 1-5, 2005, De La Salle University-Manila, Philippines.

65) "Manipulation of Heme-Oxygen Interaction by an External Disulfide Bond", Eben S. Dy* and Hideaki Kasai, The Physical Society of Japan 2005 Autumn Meeting, September 21, 2005, Doshisha University, Kyotanabe Campus.

66) " Ｏ Adsorption on Cytochrome C Oxidase", Muneyuki Tsuda*, Eben Dy, Melanie David, Hideaki Kasai, 23rd European Conference on Surface Science (ECOSS-23), Berlin, Germany, September 4-9, 2005.

67）“The Density Functional Study on Pt Porphyrin Oxygen Sensors”, Eben S. Dy* and Hideaki Kasai, 61th Annual Meeting, The Physical Society of Japan,（日本物理学会　第 61 回年次大会）, March 28, 2006, Ehime University/Matsuyama University, Japan.

68）“The interaction between tin(II) porphyrin and platinum and the electronic characteristics of their reaction product”, Eben S. Dy* and Hideaki Kasai, Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry, Material-oriented Quantum Chemistry, May 28, 2006, Senri Life Science Center (5F SCIENCE HALL), Osaka, Japan.

69）“*The Interaction Between Tin(II) Porphyrin-Platinum and O_2*”,
The 2nd International Workshop on Oxidation Reactions, Eben S. Dy* and Hideaki Kasai,
２００５年度　第３回　２１世紀ＣＯＥ　ナノサイエンス・フォーラム,
Spring8, JAERI-CMD, OU Joint-Seminar, May 30, 2006, Icho Kaikan.

国際単位系（SI）

表１．SI 基本単位

基本量	SI 基本単位	
	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質量	モル	mol
光度	カンデラ	cd

表２．基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

組立量	SI 基本単位	
	名称	記号
面積	平方メートル	m^2
体積	立法メートル	m^3
速さ，速度	メートル毎秒	m/s
加速度	メートル毎秒毎秒	m/s^2
波数	毎メートル	m^{-1}
密度（質量密度）	キログラム毎立法メートル	kg/m^3
質量体積（比体積）	立法メートル毎キログラム	m^3/kg
電流密度	アンペア毎平方メートル	A/m^2
磁界の強さ	アンペア毎メートル	A/m
（物質量の）濃度	モル毎立方メートル	mol/m^3
輝度	カンデラ毎平方メートル	cd/m^2
屈折率	（数の） 1	1

表５．SI 接頭語

乗数	接頭語	記号	乗数	接頭語	記号
10^{24}	ヨタ	Y	10^{-1}	デシ	d
10^{21}	ゼタ	Z	10^{-2}	センチ	c
10^{18}	エクサ	E	10^{-3}	ミリ	m
10^{15}	ペタ	P	10^{-6}	マイクロ	μ
10^{12}	テラ	T	10^{-9}	ナノ	n
10^{9}	ギガ	G	10^{-12}	ピコ	p
10^{6}	メガ	M	10^{-15}	フェムト	f
10^{3}	キロ	k	10^{-18}	アト	a
10^{2}	ヘクト	h	10^{-21}	ゼプト	z
10^{1}	デカ	da	10^{-24}	ヨクト	y

表３．固有の名称とその独自の記号で表されるSI組立単位

組立量	SI 組立単位			
	名称	記号	他のSI単位による表し方	SI基本単位による表し方
平面角	ラジアン(a)	rad		$m \cdot m^{-1}=1$(b)
立体角	ステラジアン(a)	sr(c)		$m^2 \cdot m^{-2}=1$(b)
周波数	ヘルツ	Hz		s^{-1}
力	ニュートン	N		$m \cdot kg \cdot s^{-2}$
圧力，応力	パスカル	Pa	N/m^2	$m^{-1} \cdot kg \cdot s^{-2}$
エネルギー，仕事，熱量	ジュール	J	N・m	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2}$
工率，放射束	ワット	W	J/s	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-3}$
電荷，電気量	クーロン	C		s・A
電位差（電圧），起電力	ボルト	V	W/A	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-3} \cdot A^{-1}$
静電容量	ファラド	F	C/V	$m^{-2} \cdot kg^{-1} \cdot s^4 \cdot A^2$
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-3} \cdot A^{-2}$
コンダクタンス	ジーメンス	S	A/V	$m^{-2} \cdot kg^{-1} \cdot s^3 \cdot A^2$
磁束	ウエーバ	Wb	V・s	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot A^{-1}$
磁束密度	テスラ	T	Wb/m^2	$kg \cdot s^{-2} \cdot A^{-1}$
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot A^{-2}$
セルシウス温度	セルシウス度(d)	℃		K
光束	ルーメン	lm	cd・sr(c)	$m^2 \cdot m^{-2} \cdot cd=cd$
照度	ルクス	lx	lm/m^2	$m^2 \cdot m^{-4} \cdot cd=m^{-2} \cdot cd$
（放射性核種の）放射能	ベクレル	Bq		s^{-1}
吸収線量，質量エネルギー分与，カーマ	グレイ	Gy	J/kg	$m^2 \cdot s^{-2}$
線量当量，周辺線量当量，方向性線量当量，個人線量当量，組織線量当	シーベルト	Sv	J/kg	$m^2 \cdot s^{-2}$

(a)ラジアン及びステラジアンの使用は、同じ次元であっても異なった性質をもった量を区別するときの組立単位の表し方として利点がある。組立単位を形作るときのいくつかの用例は表４に示されている。
(b)実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号“１”は明示されない。
(c)測光学では、ステラジアンの名称と記号srを単位の表し方の中にそのまま維持している。
(d)この単位は、例としてミリセルシウス度m℃のようにSI接頭語を伴って用いても良い。

表４．単位の中に固有の名称とその独自の記号を含むSI組立単位の例

組立量	SI 組立単位		
	名称	記号	SI 基本単位による表し方
粘度	パスカル秒	Pa・s	$m^{-1} \cdot kg \cdot s^{-1}$
力のモーメント	ニュートンメートル	N・m	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2}$
表面張力	ニュートン毎メートル	N/m	$kg \cdot s^{-2}$
角速度	ラジアン毎秒	rad/s	$m \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}=s^{-1}$
角加速度	ラジアン毎平方秒	rad/s^2	$m \cdot m^{-1} \cdot s^{-2}=s^{-2}$
熱流密度，放射照度	ワット毎平方メートル	W/m^2	$kg \cdot s^{-3}$
熱容量，エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot K^{-1}$
質量熱容量（比熱容量），質量エントロピー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg・K)	$m^2 \cdot s^{-2} \cdot K^{-1}$
質量エネルギー（比エネルギー）	ジュール毎キログラム	J/kg	$m^2 \cdot s^{-2} \cdot K^{-1}$
熱伝導率	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m・K)	$m \cdot kg \cdot s^{-3} \cdot K^{-1}$
体積エネルギー	ジュール毎立方メートル	J/m^3	$m^{-1} \cdot kg \cdot s^{-2}$
電界の強さ	ボルト毎メートル	V/m	$m \cdot kg \cdot s^{-3} \cdot A^{-1}$
体積電荷	クーロン毎立方メートル	C/m^3	$m^{-3} \cdot s \cdot A$
電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m^2	$m^{-2} \cdot s \cdot A$
誘電率	ファラド毎メートル	F/m	$m^{-3} \cdot kg^{-1} \cdot s^4 \cdot A^2$
透磁率	ヘンリー毎メートル	H/m	$m \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot A^{-2}$
モルエネルギー	ジュール毎モル	J/mol	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot mol^{-1}$
モルエントロピー，モル熱容量	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol・K)	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$
照射線量（X線及びγ線）	クーロン毎キログラム	C/kg	$kg^{-1} \cdot s \cdot A$
吸収線量率	グレイ毎秒	Gy/s	$m^2 \cdot s^{-3}$
放射強度	ワット毎ステラジアン	W/sr	$m^4 \cdot m^{-2} \cdot kg \cdot s^{-3}=m^2 \cdot kg \cdot s^{-3}$
放射輝度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	$W/(m^2 \cdot sr)$	$m^2 \cdot m^{-2} \cdot kg \cdot s^{-3}=kg \cdot s^{-3}$

表６．国際単位系と併用されるが国際単位系に属さない単位

名称	記号	SI 単位による値
分	min	1 min=60s
時	h	1h =60 min=3600 s
日	d	1 d=24 h=86400 s
度	°	1°=(π/180) rad
分	’	1’=(1/60)°=(π/10800) rad
秒	”	1”=(1/60)’=(π/648000) rad
リットル	l、L	1l=1 $dm^3=10^{-3}m^3$
トン	t	$1t=10^3$ kg
ネーパ	Np	1Np=1
ベル	B	1B=(1/2)ln10(Np)

表７．国際単位系と併用されこれに属さない単位でSI単位で表される数値が実験的に得られるもの

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
電子ボルト	eV	$1eV=1.60217733(49) \times 10^{-19}J$
統一原子質量単位	u	$1u=1.6605402(10) \times 10^{-27}kg$
天文単位	ua	$1ua=1.49597870691(30) \times 10^{11}m$

表８．国際単位系に属さないが国際単位系と併用されるその他の単位

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
海里		1海里=1852m
ノット		1ノット=1海里毎時=(1852/3600)m/s
アール	a	1 a=1 $dam^2=10^2m^2$
ヘクタール	ha	1 ha=1 $hm^2=10^4m^2$
バール	bar	1 bar=0.1MPa=100kPa=1000hPa=10^5Pa
オングストローム	Å	$1 Å=0.1nm=10^{-10}m$
バーン	b	1 b=100$fm^2=10^{-28}m^2$

表９．固有の名称を含むCGS組立単位

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
エルグ	erg	$1 erg=10^{-7}$ J
ダイン	dyn	$1 dyn=10^{-5}N$
ポアズ	P	1 P=1 dyn・s/cm^2=0.1Pa・s
ストークス	St	1 St =1$cm^2/s=10^{-4}m^2/s$
ガウス	G	1 G ^10^{-4}T
エルステッド	Oe	1 Oe ^(1000/4π)A/m
マクスウェル	Mx	1 Mx ^10^{-8}Wb
スチルブ	sb	1 sb =1cd/$cm^2=10^4cd/m^2$
ホト	ph	1 ph=10^4lx
ガル	Gal	1 Gal =1cm/$s^2=10^{-2}m/s^2$

表10．国際単位に属さないその他の単位の例

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
キュリー	Ci	$1 Ci=3.7 \times 10^{10}Bq$
レントゲン	R	$1 R = 2.58 \times 10^{-4}C/kg$
ラド	rad	$1 rad=1cGy=10^{-2}Gy$
レム	rem	$1 rem=1 cSv=10^{-2}Sv$
X線単位		$1X unit=1.002 \times 10^{-4}nm$
ガンマ	γ	$1\gamma=1 nT=10^{-9}T$
ジャンスキー	Jy	$1 Jy=10^{-26}W \cdot m^{-2} \cdot Hz^{-1}$
フェルミ		1 fermi=1 $fm=10^{-15}m$
メートル系カラット		1 metric carat = 200 mg = 2×10^{-4}kg
トル	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標準大気圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
カロリー	cal	
ミクロン	μ	1 μ =1μm=$10^{-6}m$

（第７版，1998年改訂）

R100
古紙配合率100%
白色度70%再生紙を使用しています