

2024年度 核融合科学研究所 ユニット成果報告会
2025年5月29日 @NIFS

メタ階層ダイナミクス

メタ階層ダイナミクス ユニット

核融合科学研究所



本報告の構成

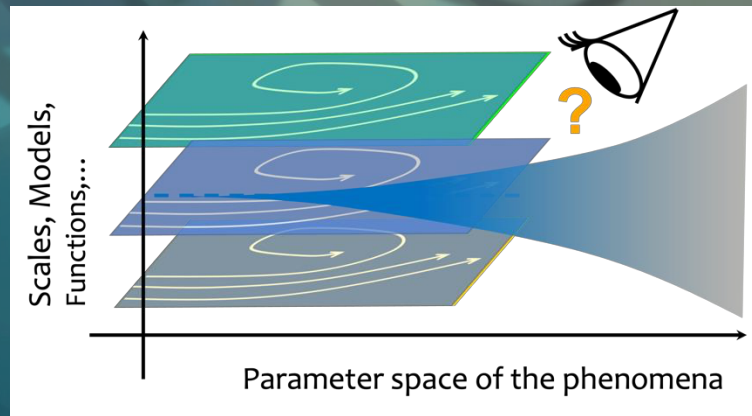
- ユニット活動報告（後藤）
 - 構成メンバー、目的と目標、アカデミックプラン
 - ユニット等評価委員会からの評価への対応
 - 思うようにいかない点、その原因分析と解決思案について
 - 実績
- 特筆される成果
 - ビーム引き出し領域における負イオンビームレットのRF電場への応答（永岡）
 - タングステン表面へのヘリウムイオン入射過程における時間依存密度汎関数理論を用いた量子ダイナミクスの探求（伊藤）
 - 磁化プラズマにおける電子サイクロトロン放射からの電子速度分布関数およびギブズエントロピーの再構築（河森）
- 質疑

ユニットメンバー (2024年度 ユニット研究戦略会議)

所内	伊藤篤史（議長）、伊神弘恵、石川遼太郎、笠原寛史、川手朋子、後藤基志（ユニット長）、坂本隆一、佐藤直木、関哲夫、高山有道、登田慎一郎、永岡賢一、沼波政倫、長谷川裕記、前山伸也
所外	石黒静児（核融合研名誉教授）、糟谷直宏（九州大学）、加藤雄人（東北大学）、河森英一郎（国立成功大学）、小林進二（京都大学）、佐野孝好（大阪大学）、廣田真（東北大学）、山田道夫（京都大学名誉教授）

ユニットの研究目的と目標

- 核融合科学は原子・電子の微視的スケールから装置レベルの巨視的スケールまで多様な対象を含み、複合的な物理現象に支配されている。
- プラズマやプラズマと物質の相互作用は単独のスケールや物理モデルでは捉えきれず、高次視点からの統合的理解が求められている。
- 本ユニットでは、従来の階層構造的アプローチに加え、メタ的視点から共通課題を抽出し、分断された研究領域の連携と学術的深化を目指す。



アカデミックプラン

戦略

- 構成メンバー独自の研究課題に通底する「階層性」を共通の学問的視点（楕円の一つの焦点）と捉え、下記 3 + 1 の研究課題を掲げ、活動を行う。
 - ただし、独立に活動するのではなく、常に情報を共有し、有機的かつ流動的な連携を図る。
1. 階層性が内在する乱流・輸送の局所・大域的現象の解明
 2. 非等方的速度分布下における電磁場・原子分子のエネルギーチャンネル研究
 3. 周辺プラズマから物質表面における階層性の追求と複合過程モデリング
+
 4. 多スケールにまたがる階層性から探る物理モデリングと普遍性の探究

アカデミックプラン

戦術

- 研究課題に内在する「階層性」は必ずしも十分に認識されておらず、ユニット内での議論を通じてその発掘と理解の深化を図っている。
- 自由に議論できる場を意図的に設け、メンバー間の情報共有と知的交流の活性化を促進している。
- 汎用性のある手法（例：マルチフィデリティー）を他の研究課題に適用することで、各自が自身の課題における「階層性」を再認識する機会を生んでいる。
- 手法の応用は単なる技術的活用ではなく、「階層性」への認識を伴う思考的・理論的再検討を促すプロセスと位置づけられている。
- ユニット外にも活動を広げており、物理学会領域2で「メタ階層科学」セッションを企画するなど、階層性研究の発展と普及を図っている。

協力組織体制

- ユニットの円滑な運営のため、ユニット長・研究戦略会議長に加え、WEB係・セミナー係・ML係・ネットワーク係などの役割分担を実施し、組織体制を整備している。
- 学生や所外メンバーも交えた議論を行うための茶話会を設け、ユニット内外の共同研究の促進を諮っている。

特筆される成果

①-1 pieceとしての研究成果

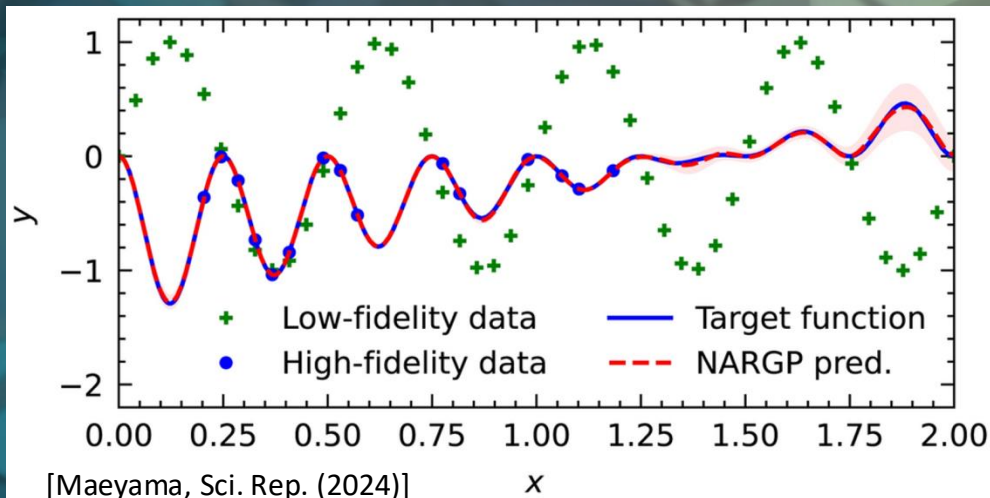
- ビーム引き出し領域における負イオンビームレットのRF電場への応答（永岡）
RF電界を重畳した負イオン源でビームレットの発散特性を実験調査。幅と軸の振動が観測され、発散角増大の要因と示唆。振動はパービアンスとRF周波数に依存した。
- タングステン表面へのヘリウムイオン入射過程における時間依存密度汎関数理論(TDDFT)を用いた量子ダイナミクス の探求（伊藤）
自作コードQUMASUNを用い、W表面でのHeイオンの中性化過程を量子力学的に解析。反射したHeの状態は $\text{He}^{2+} \cdot \text{He}^{1+} \cdot \text{He}^0$ の重ね合わせとして得られた。将来的には実験で検証可能で、プラズマ-物質/壁相互作用(PWI)のフロンティアとして期待される。
- 磁化プラズマにおける電子サイクロトロン放射からの電子速度分布関数およびギブズエントロピーの再構築（河森）
光学的に薄いプラズマ中の純XモードECEスペクトルから、電子速度分布関数(EVDF)の揺動成分と電子エントロピーを再構築する手法を提案した。ハンケル変換と最大エントロピー法を用い、広範なプラズマ条件で有効性を確認した。

特筆される成果

①-2 bodyとしての研究成果

- 磁気核融合プラズマにおける乱流輸送モデリングのためのマルチフィデリティ情報融合（前山）

NARGPを用いて低精度・高精度データを統合し、核融合プラズマの乱流輸送予測精度を向上。シミュレーションや実験で有効性を示し、階層構造問題への応用も期待される。



特筆される成果

② ユニットメンバーで共同提案した科研費の採択

- 沼波（代表）、永岡、登田、佐藤、日高（九大）
基盤研究（B） 「複雑流動の解空間構造に基づくプラズマ輸送の外挿モデルの構築」

内挿的予測に依存した従来モデルを脱却し、解空間構造に基づく外挿可能なプラズマ輸送モデルの構築を目指し、理論・実験・数理の連携による研究を展開している。

③ 研究環境の改善

- ヒューマンオアシスに人が集まりやすい環境の構築を目指し、大テーブルを撤去し、小さなテーブルと、3人掛けのカウンターテーブルを導入した。
- 成果の速報性を向上させるため、常設ポスター展示室にデジタルサイネージを導入した。

ユニット等評価委員会からの評価への対応

「階層性を見出すことがあたかもユニットの目標であるかの如き錯覚に陥っている感が見受けられる。」

→ 本ユニットが目指す主題の一つは、階層性を見出すだけでなく、「はっきりとしない階層性」が存在する系の構造を捉えることである。また、全体を俯瞰するだけでなく、従来議論されてきた各々階層間の境界にある構造を捉える課題を設定している（古典系と量子系、イオンスケールと電子スケール乱流など）。

「特筆された成果と見込み」として3課題の成果が紹介されているが、個々の成果としての報告に留まり、それらを課題(4)の観点からどのように俯瞰していくかなどの言及がない」

→ ユニット長会議での活動報告資料にユニットメンバーの論文の出版状況を載せることで、全メンバが相互に研究の進展状況を把握し、ユニット全体の研究課題について俯瞰できるようにした。

ユニット等評価委員会からの評価への対応

「階層性に関連する課題を核融合科学分野外に求める前に、既に存在している実験室ならびに自然界の磁化プラズマに見られる異常（突発）現象を主題として、階層構造に内在する異常ダイナミック過程の学術原理を見出すことに注力すべきではないか。」

→ プラズマの劇的変容現象や突発現象もメタ階層ダイナミクス的重要課題の一つとして、特に理論シミュレーションの研究を進めている。他分野との関連課題や共同研究など（データ解析手法など）を核融合科学分野に輸入することにも注力している。

「課題(1)-(3)に関する研究は全世界の核融合・プラズマ研究者が概ね共有するとともに競争をしている分野である。従って、個々の成果は他ユニットを含め競争力の高い国内外の研究者・研究機関で議論されるべきものである。」

→ 物理学会の企画セッションはまさにそのような目的で立ち上げたものである。ユニットメンバー個々ではすでに国際的な場でも研究課題についての議論を進めているが、今後は国際会議などでも本ユニットの活動内容の共有を広げていきたい。

自己評価と今後についての考え

- 物理学会での企画セッションの立ち上げは有意義だったが、ユニット外研究者の発表が少なかった点が課題として残った。
- 企画セッションは4回（2年間）で終了するが、今後も合同セッションの企画などを通じて活動を継続していきたい。
- 現時点でpieceに対するbodyの研究成果は十分ではないが、マルチフィデリティモデリングによる解析適用を今後さらに推進したい。
- 統計学的手法はユニットの研究課題との親和性が高く、有効なアプローチ手段と認識している。今後は統計学の専門家との共同研究も積極的に進め、分析手法の深化と研究の広がりを目指していきたい。

思うようにいかない点, その原因分析と解決思案について

- ユニットメンバーの研究分野が多様であるため、大型の競争的資金に向けた統一的研究テーマの設定が難しい。大型資金の獲得には、所外メンバーを含むユニット横断的なグループ形成が有効だと考えられる。
- 実際に大規模予算を獲得した際、その資金で研究を実行する若手研究者（実プレイヤー）の数が不足している。獲得した予算で新たに研究者を雇用するという戦略については、効果に疑問が残る。
- 現在は公募への応募がない例もあり、資金だけでは人材確保が困難な時代に入っていると感じられる。

実績

- 論文（責任著者）：19編
- 国内外の主要な研究集会における研究発表：41件
- セミナー実施：5回
- 競争的資金獲得：31件
 - 2025年度新規採択：3件（基盤B 2件、基盤C 1件）
 - 2024年度新規採択：4件（学術変革領域（A）1件、基盤B 3件）

ユニットメンバー (2025年度 ユニット戦略会議)

所内	伊藤篤史（ユニット長）、伊神弘恵、石川遼太郎、笠原寛史、後藤基志、坂本隆一、佐藤直木、関哲夫（戦略会議議長）、高山有道、登田慎一郎、永岡賢一、沼波政倫、長谷川裕記、前山伸也、小林将人、四竈泰一（客員准教授）、成田絵美（特任講師）、松岡千博（特任教授）、HANNACHI Ibtissem（特任准教授）
所外	石黒静児（核融合研名誉教授）、糟谷直宏（九州大学）、加藤雄人（東北大学）、河森英一郎（国立成功大学）、小林進二（京都大学）、佐野孝好（大阪大学）、廣田真（東北大学）、山田道夫（京都大学名誉教授）

2024年度 核融合科学研究所 ユニット成果報告会

2025年5月29日 @NIFS

ビーム引き出し領域における 負イオンビームレットのRF電場への応答

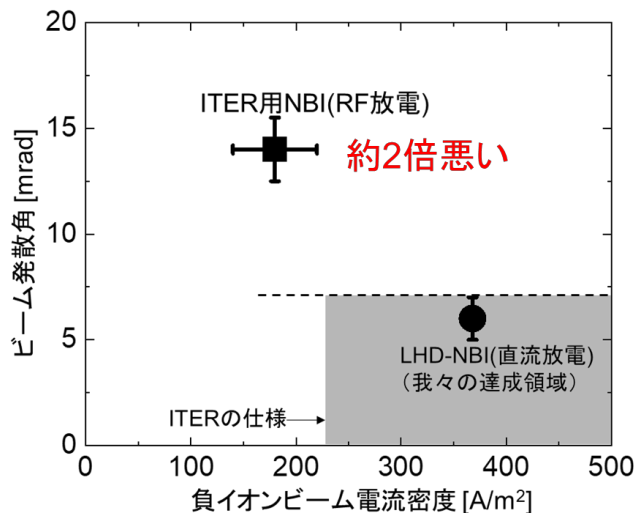
メタ階層ダイナミクス ユニット
永岡 賢一



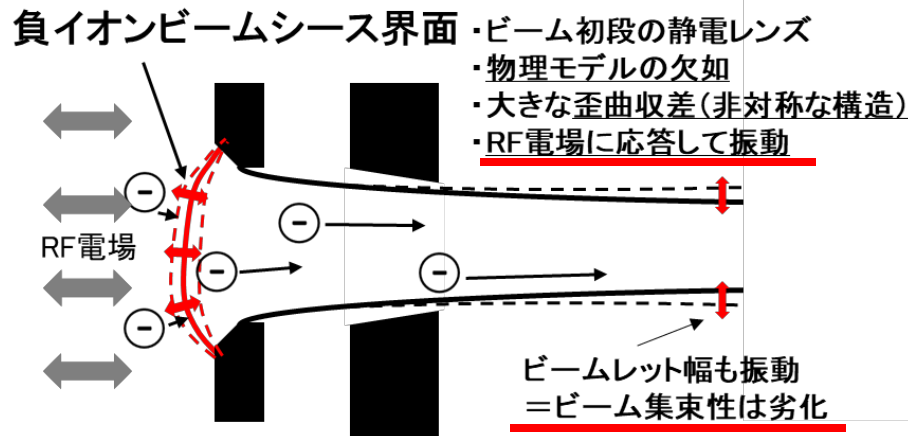
本報告の構成

- 負イオンビーム集束性の課題と実験成果
 - ITER-NBI開発における課題
 - NIFS-NBTSにおける実験成果
- メタ階層的視点からの考察
 - 負イオンシースの外場応答
 - 力学モデルの考察

背景と問題意識



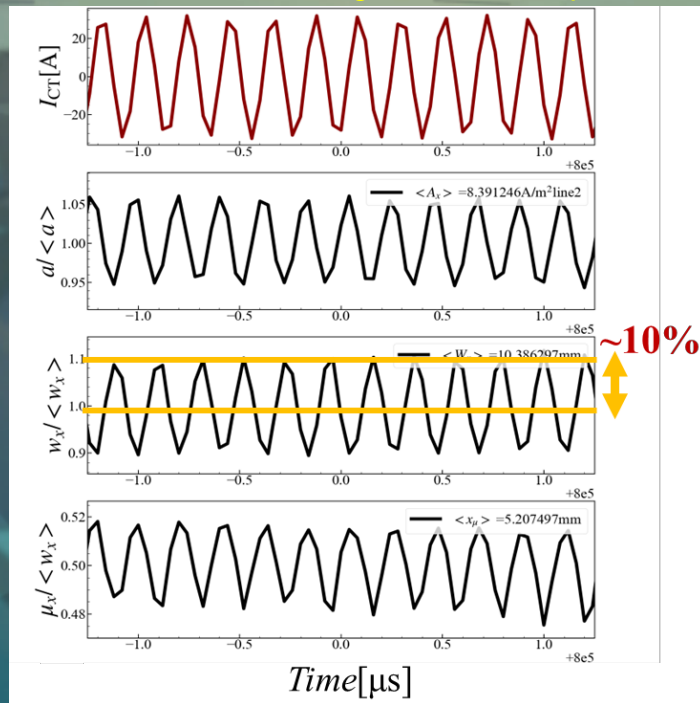
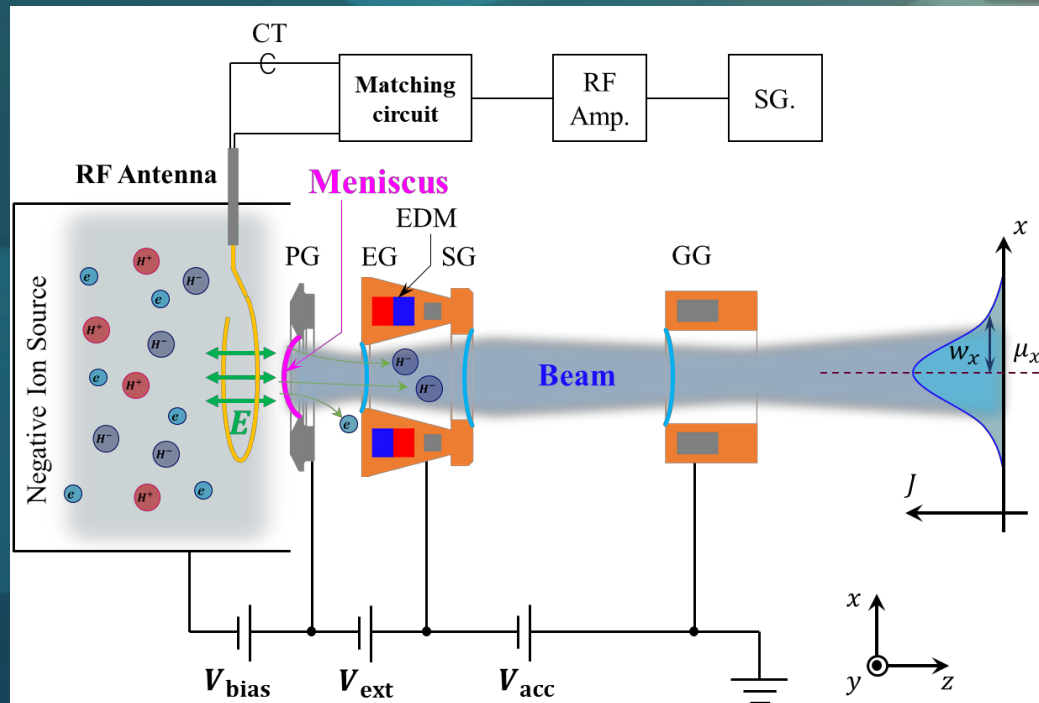
RF負イオン源はビーム集束性が悪い



負イオンビーム集束性の問題は、
負イオンシース形成というプラズマ
物理の課題

実験概要と結果

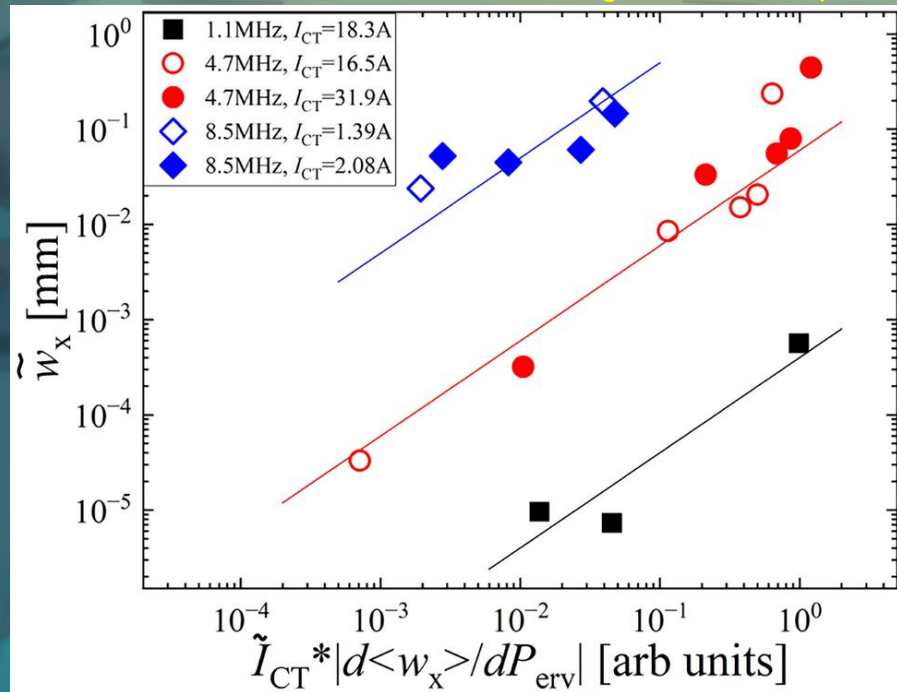
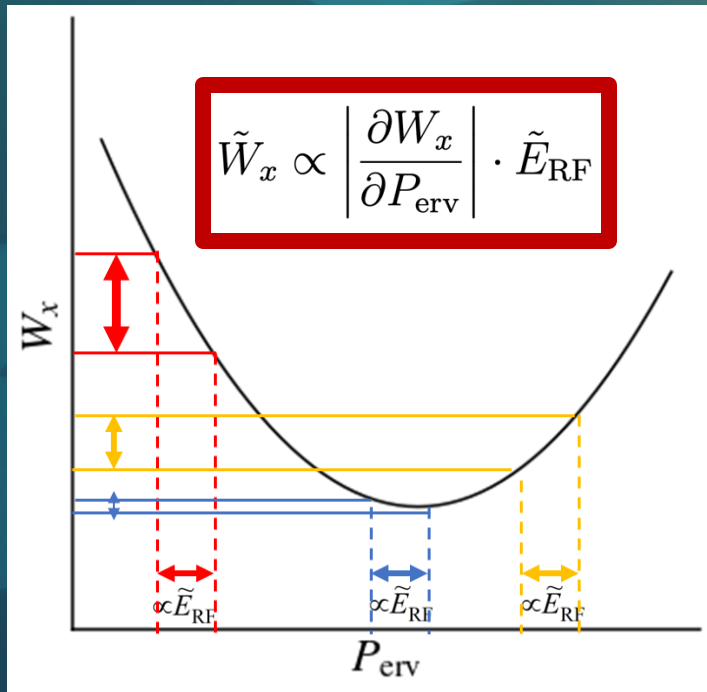
K. Nagaoka+ Sci. Rep. 2025



- 外部摂動としてRF電場を負イオン引き出し領域に導入
- 負イオンビームレットの幅、中心電流強度、中心軸位置の応答を観測
=>ビーム集束性の劣化

結果の解釈と改善方法

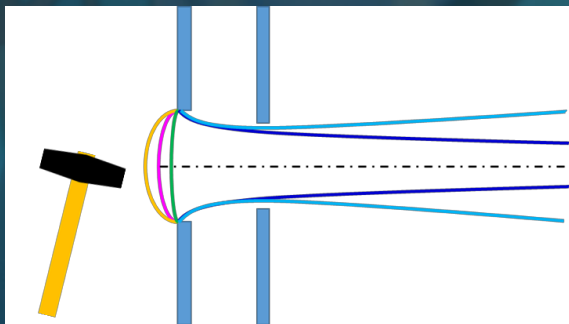
K. Nagaoka+ Sci. Rep. 2025



- ビーム幅は、パービアンス+RF電場の関数で決まると仮定
=> 実験観測を矛盾なく説明できる
- 最適パービアンス条件&低いRF周波数を用いることで振動抑制が可能(工学的成果)

重要な点は何か？

負イオンシースの外場応答は
正イオンシースと異なる！

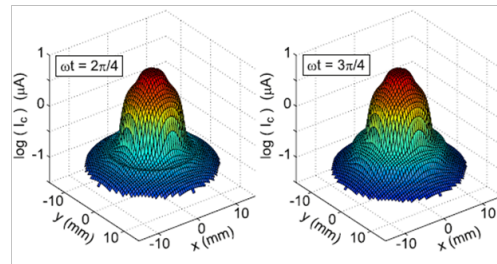


“シースの硬さ”が異なる！

Positive ion beamlet

【硬い】正イオンシース

K. Takahashi, New J. Phys. 2019

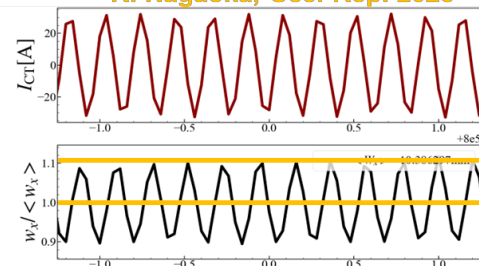


コア領域の
変化なし

Negative ion beamlet

【柔らかい】負イオンシース

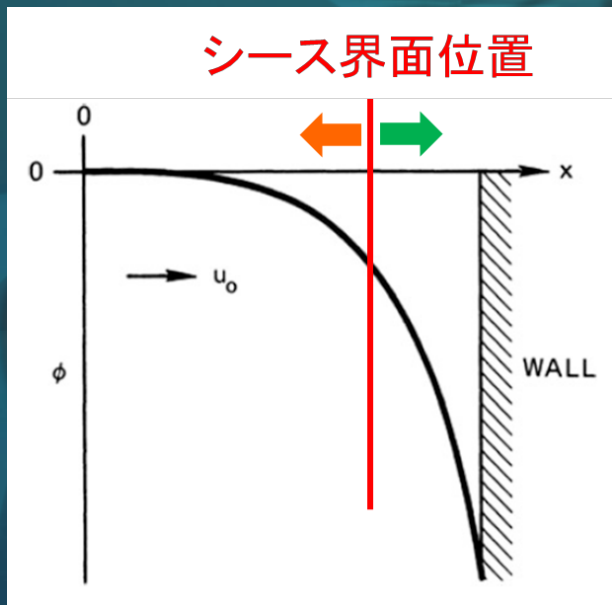
K. Nagaoka, Sce. Rep. 2025



10%のビーム幅
の振動を観測

~10%

シース位置を決定するモデル



資料一部非公開
お問い合わせください。

Bohmシース条件

$$u_0 > (KT_e/M)^{1/2}$$

まとめ

- 負イオンビーム集束性の課題と実験成果
 - RF電場がビーム集束性に与える影響を調べる実験を行った
 - RF電場は、直接負イオンメニスカスを振動させ、ビーム集束性を劣化
 - パービアンズ依存性でRF振動を説明できる
=> 振動を抑える運転領域を同定
- メタ階層的視点からの考察
 - 負イオンシースの外場応答は、正イオンシースと異なる
 - シース位置表現する力学モデルを考察
 - 負イオンシースが柔らかいことを説明
=> この性質を利用して、負イオンシース形成メカニズムの解明の可能性
 - 負イオンシースのゆらぎ自身が大きい可能性

タングステン表面へのヘリウムイオン入射過程における 時間依存密度汎関数理論を用いた量子ダイナミクスの探求

伊藤篤史^{A,B}, 戸田悠斗^B, 高山有道^{A,B}

核融合研工^A, 総研大^B

ito.atsushi@nifs.ac.jp

*A.M.I, Y.T., A.T. Nucl. Mater. Energy, 42, 101836 (2025).

**Y.T., A.T., A.M.I., arXiv:2407.02849 [physics.chem-ph]

Acknowledgement

- JSPS KAKENHI 23K17679, 24K00617, 24H02251
- Plasma Simulator, National Institute for Fusion Science



プラズマ物質相互作用とメタ階層ダイナミクス(1) Gapped Scale

Research Report

Simulation for plasma–material interaction on fusion science and nanotechnology

Atsushi M. Ito

National Institute for Fusion Science, National Institute for Advanced Industrial Science and Technology
E-mail: ito.atsushi@nifs.ac.jp

Plasma–material interaction (PMI) refers to phenomena where high-energy plasma, which has high energy and low density, interacts with a material. Nanotechnology is supported by the PMI. In nuclear fusion, the interaction of the inner wall of the vacuum vessel are important issues. The interaction of a nanostructure on a tungsten surface. In PMI, while the process is extremely long, ranging from seconds to hours. Certain phenomena elucidate the entire process, the PMI must be regarded from this perspective, this study introduces the difficulty and

Received September 23, 2022; Accepted October 17, 2022
Translated from Oyo Buturi 92, 94 (2023) DOI: <https://doi.org/10.11470/jsaprev.230412>



Content from this work may be used under the terms of the Creative Commons Attribution (CC BY) license, which permits use, distribution and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

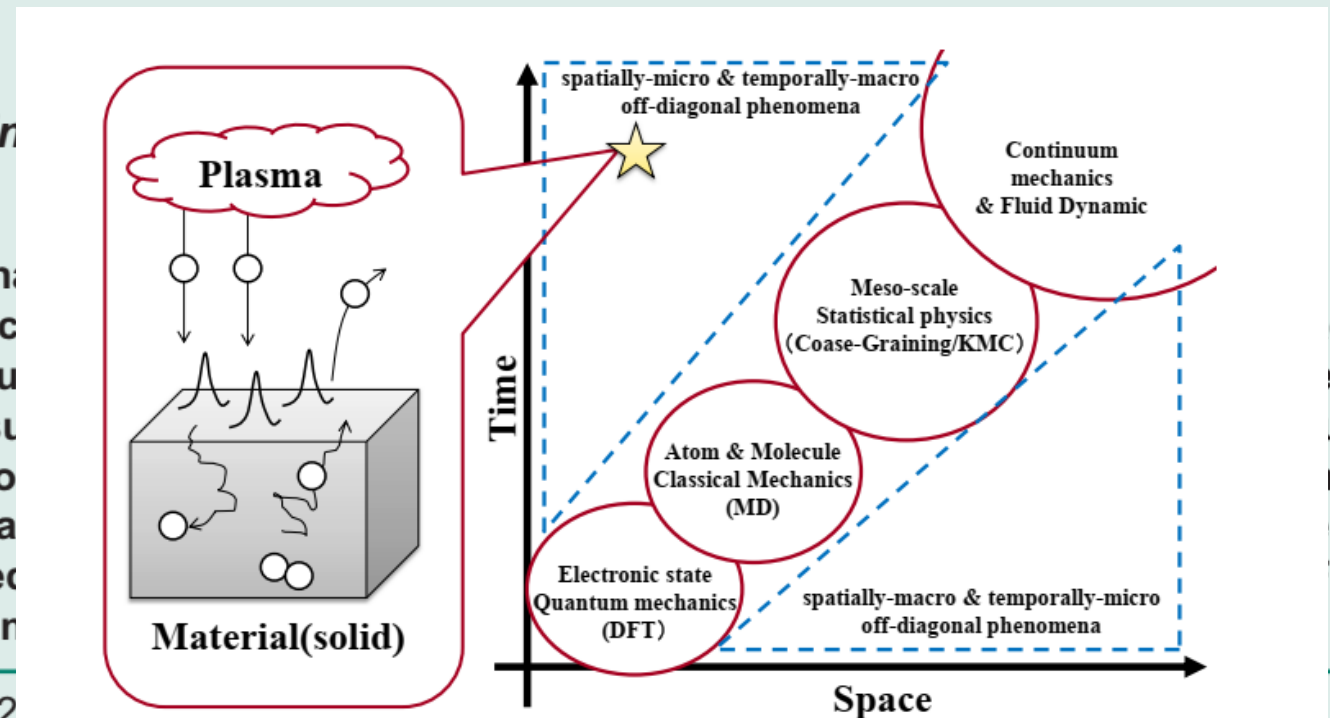


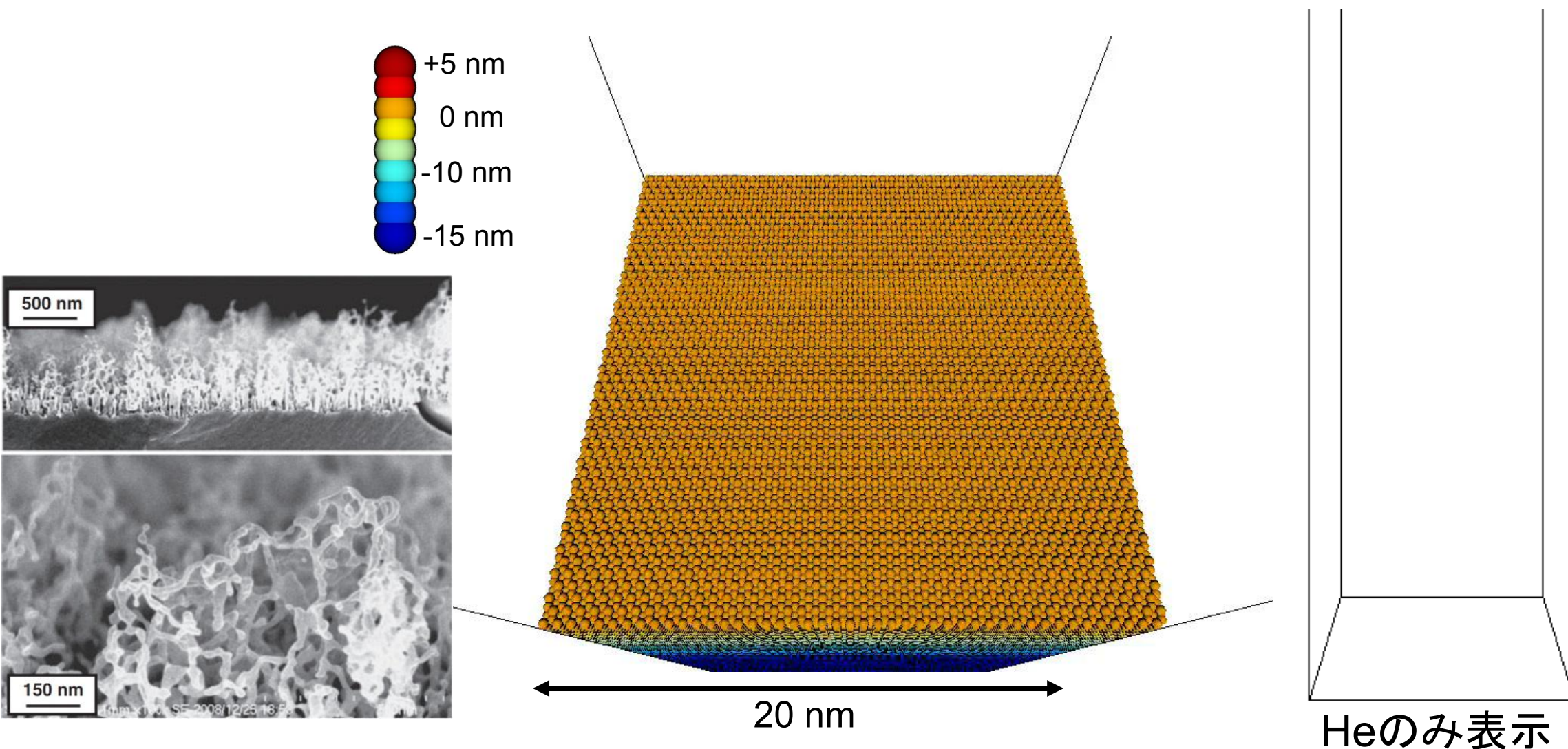
Fig. 1. Spatio-temporal scale diagram and multiscale phenomena. PMI is a problem located in the off-diagonal region which is spatially-microscopic and temporally-macroscopic.

The
ces.
s of
uzzy
e is
r, to
rom

ation

BCA-MD-KMC三連ハイブリッドによるHe照射タングステンFuzz形成

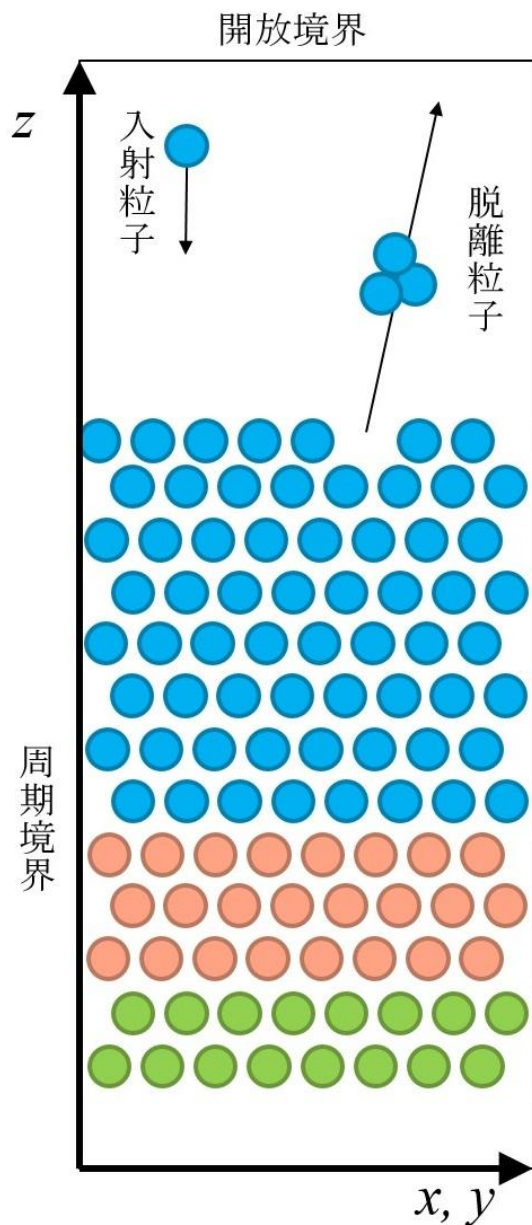
- 実験同様のフラックスで計算可能: $E_I = 100 \text{ eV}$, 1100 K , Flux $1.4 \times 10^{22} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$,
- Fuzz-likeなナノ構造の成長 (Fluence $2.36 \times 10^{23} \text{ m}^{-2}$ 照射時間16.9s)



プラズマ－物質相互作用とメタ階層ダイナミクス(2)

表面における イオンの 中性化

量子－古典 対応

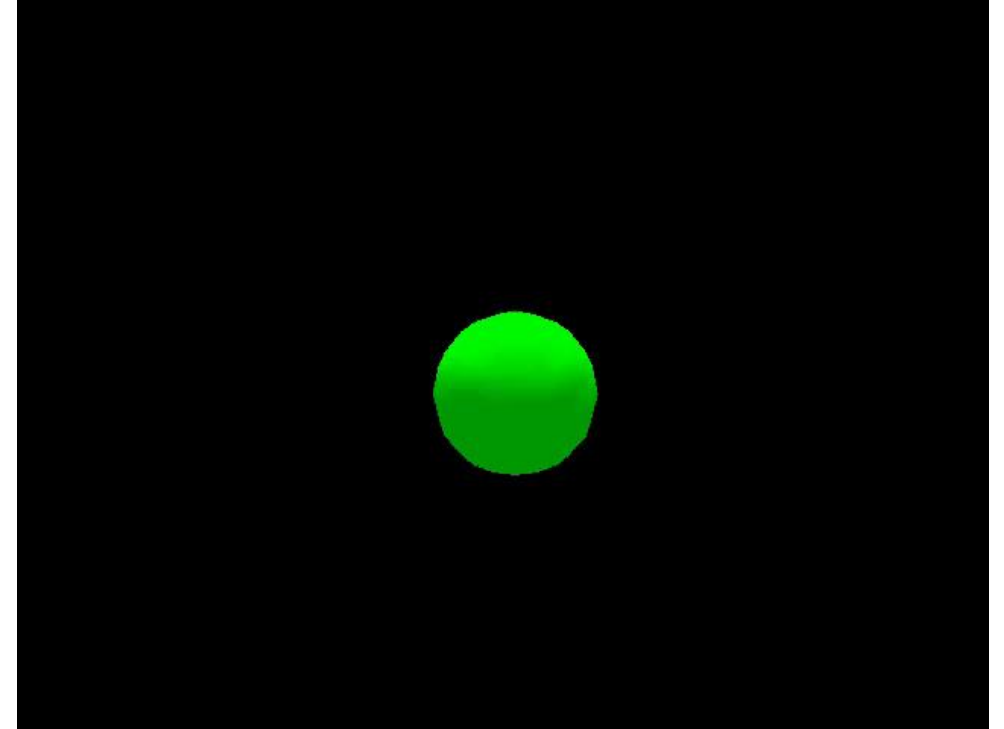
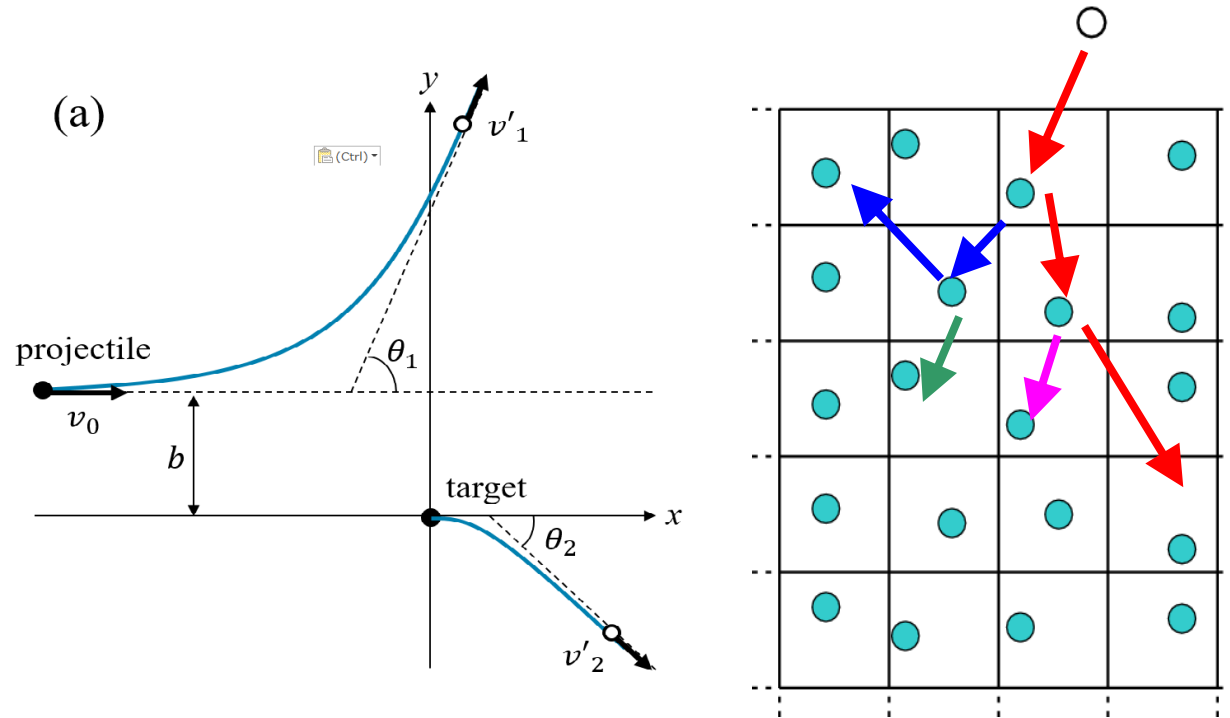


背景

- プラズマと固体の相互作用では、 $1\text{eV} \sim 10\text{keV}$ のエネルギーで入射粒子が材料構成原子と衝突する現象を扱う。
- プラズマから飛来する主な粒子はイオン. 表面との相互作用を経て中性化すると考えられる。
- イオンの中性化過程を、分子シミュレーションで扱っている先行研究はほとんどない。

1980~ 二体衝突近似(BCA)によるシミュレーション

- 高エネルギー入射を想定し、原子の相互作用を「二体衝突の繰り返し」として近似する手法



散乱角は原子間ポテンシャルの数値積分から得る

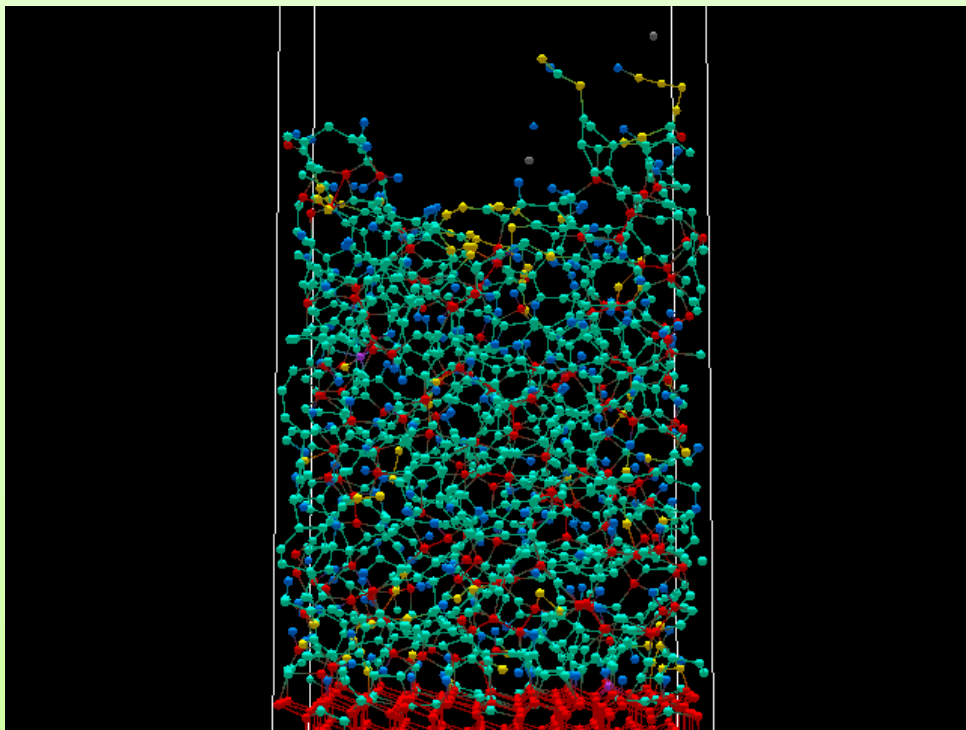
$$\theta_c - \pi = \int_{\pi}^{\theta_c} d\phi = \int_{\infty}^{r_c} \frac{b}{r^2 \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_r} - \frac{b^2}{r^2}}} dr$$

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi(r/a)$$

- 歴史的には「イオン入射」の模擬として使われてきたが、軌跡を算出するポテンシャル関数が「中性原子」を仮定している。
- イオンにも適用可能なポテンシャル [A.M.I JJAP 2023]

分子動力学(MD)

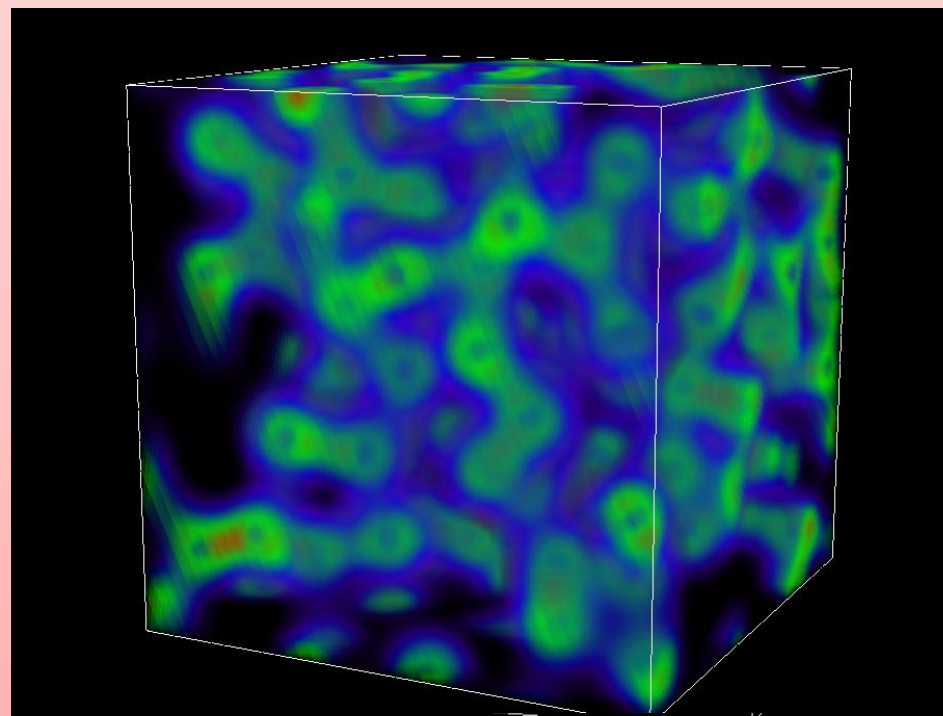
- 原子の動きを古典力学的に解く
- 電子は登場しない
- モデル限界:
 - 元素によって信頼性に差がある
 - エネルギー精度: 0.1 - 1 eV/atom
- 原子数: 10^{7-8} atoms or more



やはりポテンシャルモデルが中性原子を仮定.
最近の機械学習ポテンシャルであっても中性.

密度汎関数理論 (DFT)

- 電子のみ量子力学的に解く
- ただし、基底状態
- モデル限界
 - 全元素扱える
 - エネルギー精度: 0.01 eV/atom
- 原子数: 100-1000 atoms



電子分布が一意(基底状態, BO近似)に決まるため、
特定の原子を狙ってイオンにできない.

Ehrenfest MD (on TDDFT) by QUMASUN



古典力学のニュートン方程式と

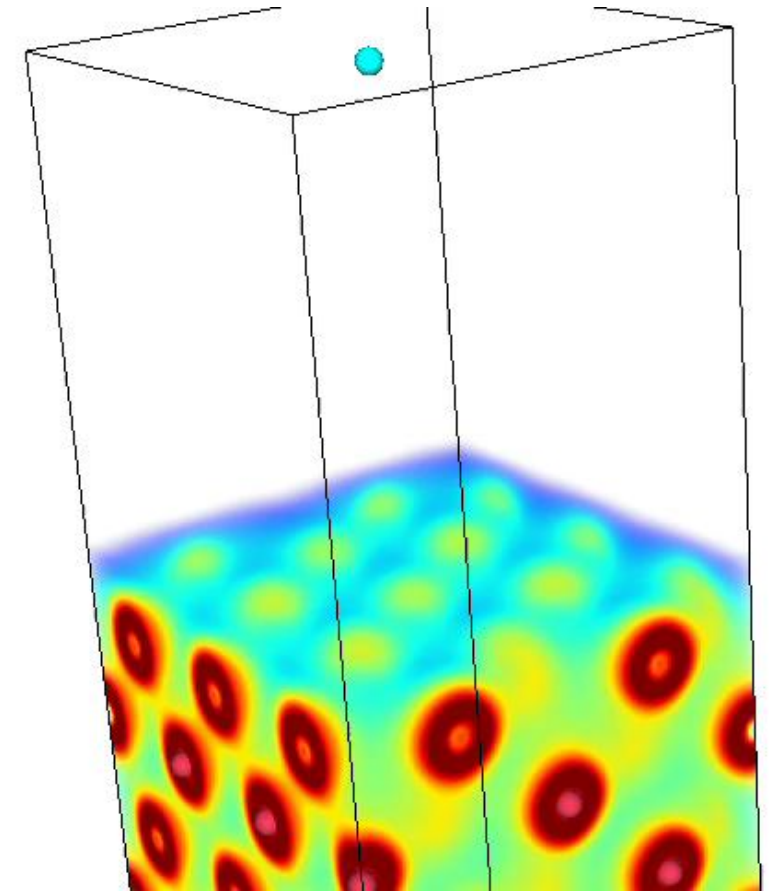
$$\ddot{\vec{R}}_i = -\frac{\partial}{\partial \vec{R}_i} \{U_{nn}(\{R\}) + E_{local}[\rho] + E_{nl}[\rho]\}$$

量子力学の時間依存コーン=シャム方程式※を

$$i\frac{\partial \psi_i(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_h[\rho] + V_{xc}[\rho] + V_{local} + V_{nl} \right) \psi_i(x,t)$$

連携させて計算する手法

- 荷電粒子や電子励起分子も扱える
- 原子核(イオン)が表面で電子を捕獲して中性化する過程を、直接的に計算できるはず



He²⁺ onto tungsten (110) surface

DFT/TDDFT code “QUMASUN”

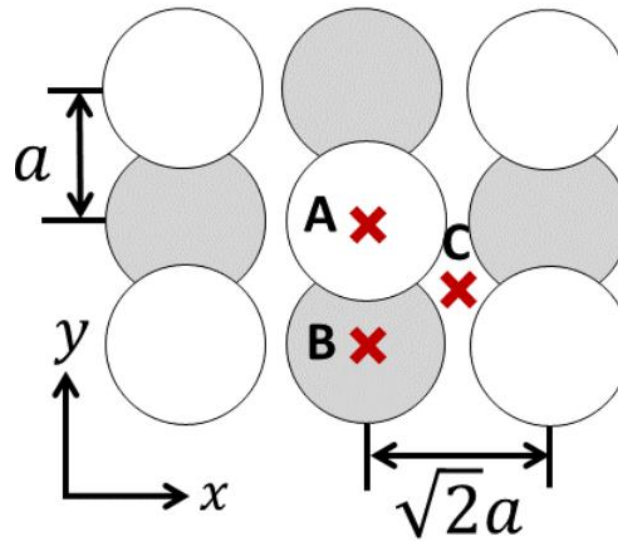
<https://github.com/atsushi-m-ito>



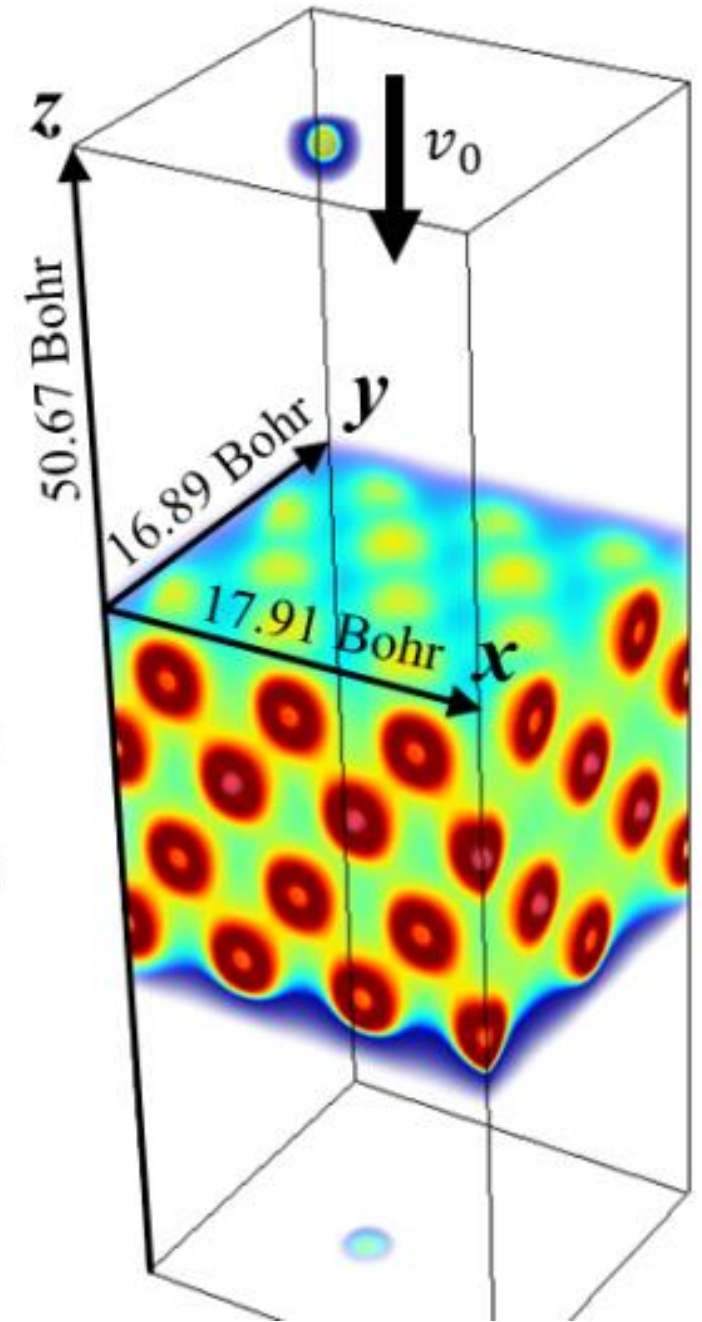
- QUMASUN has been made from scratch by us that took a half year.
- DFT/TDDFT common feature:
 - Wave function: represented by a *real space grid* with periodic boundary
 - Note: our development is toward a better combination of real-space grids and plane-wave systems to increase accuracy.
 - Exchange correlation: supporting LDA(LSDA), GGA-PBE.
 - Pseudo-potential:
 - ONCV pseudo potential
 - MBK pseudo potential, generated by “ADPACK” and supplied for “OpenMX”
- TDDFT feature:
 - w/o K-point sampling: only gamma point
 - Dynamics support: Time dependent Kohn-Sham eq., *Ehrenfest MD*
 - Calculation cost: $O(N^2)$
 - Parallelization: domain decomposition, spin parallel, state parallel
- DFT feature:
 - SCF iteration: Solving Kohn-Sham eq. with LOBPCG method.
 - K-point sampling
 - Dynamics support: MD, structure relaxation
 - Calculation cost: $O(N^3)$
 - Parallelization: domain decomposition, k-point parallel, and spin-parallel

計算条件

- 入射粒子: He^{2+} , He^{1+} , He^0
- 入射エネルギー: 100 eV
- 入射位置: 三か所(右図)
- ターゲット: タングステン48原子, (110)表面
- 電子数: 576 + 入射電子(0-2)
- シミュレーションボックス:
 - $9.50 \times 8.95 \times 26.86 \text{ \AA}^3$
 - $60 \times 60 \times 180$ grid
 - 周期境界条件
- タイムステップ: $\Delta t = 4.84 \times 10^{-19} \text{ [s]}$
- 計算時間 60000 ~ step = 30-40 fs



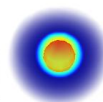
入射位置



初期状態づくりの工夫

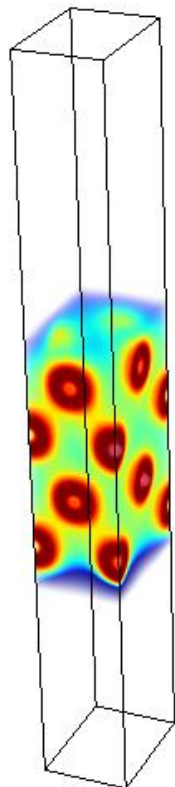
[1:DFT] state of an incident atom

- If a projectile He nucleus has electrons, solve atomic orbital $\psi_0(x)$



[2:DFT] structure relaxation in small system

- 1 x 1 x Nz, super cell with vacuum in z-direction
- Nx x Ny x 1, k-point sampling



Cost of DFT: $O(N^3)$

Add initial velocity

- Atomic orbital with initial velocity v is given by

$$\psi_{v_0}(x) = e^{i\vec{v}_0 \cdot \vec{r} / \hbar} \psi_0(x)$$



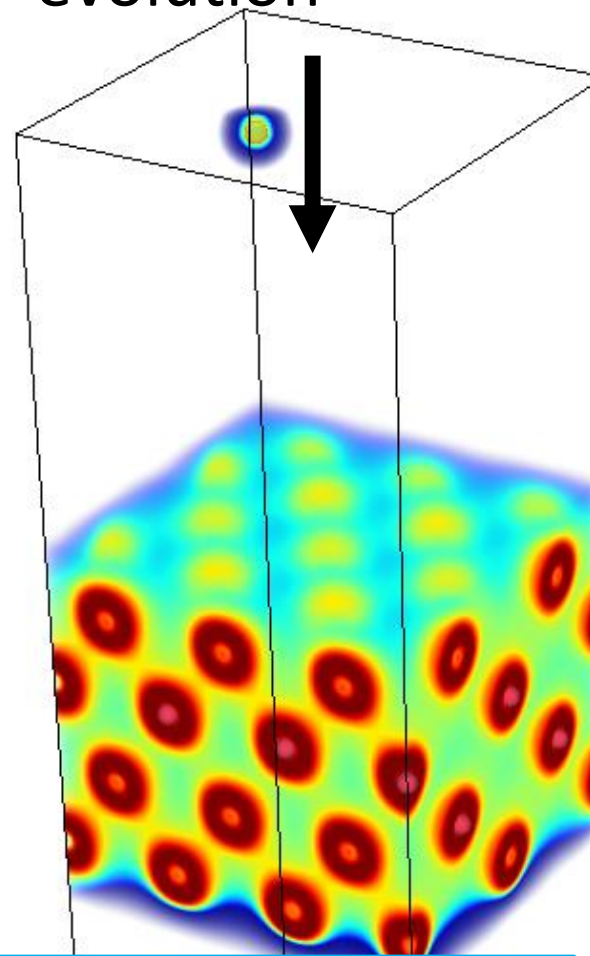
Convert to large target

- Nx x Ny x Nz super cell
- Corresponding to gamma point

$\psi_i(x)$ are expanded from point space to larger real space according Bloch's theorem

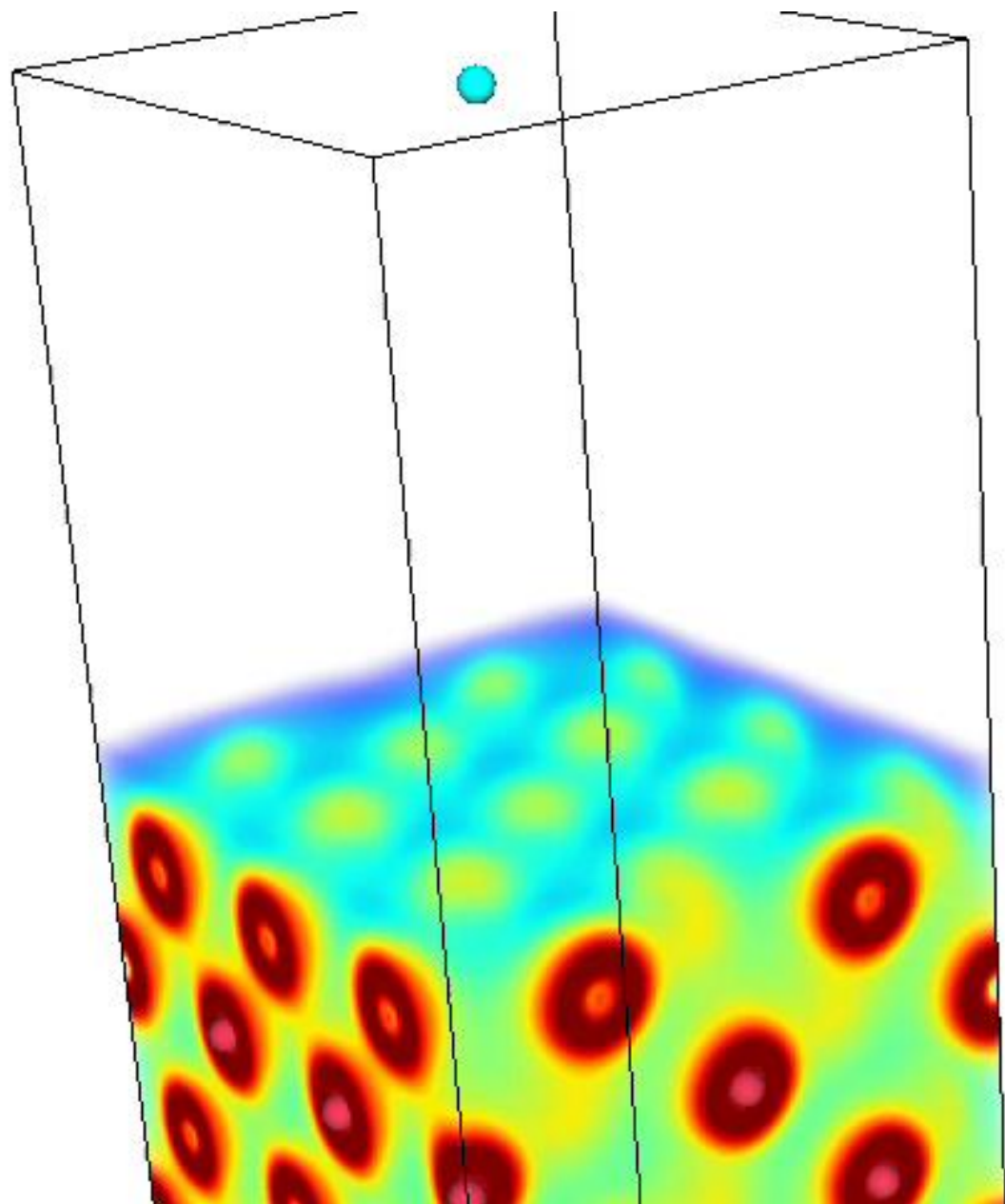


[3:TDDFT] time evolution

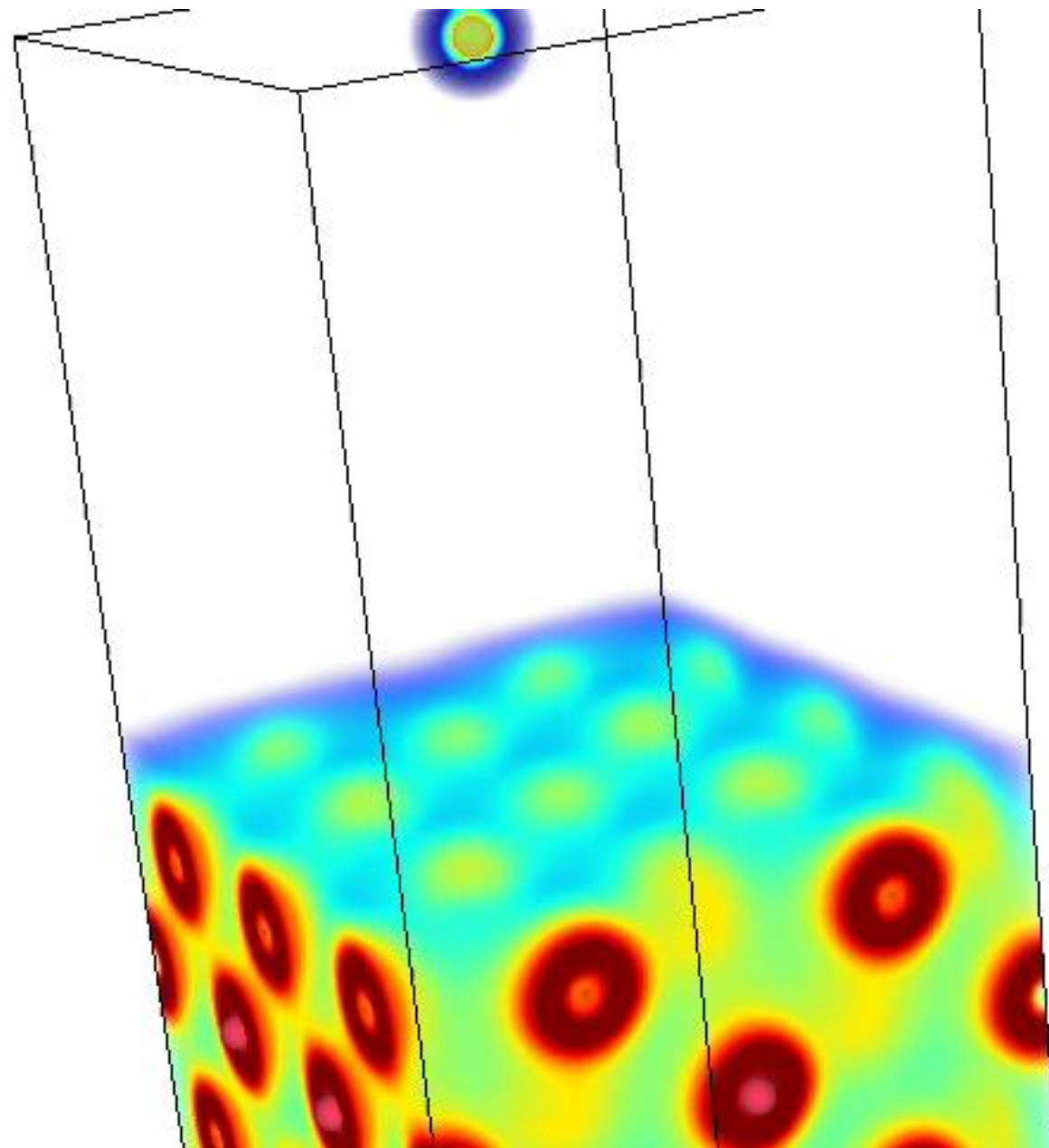


Cost of TDDFT: $O(N^2)$

He²⁺ 入射.



He¹⁺ 入射.



原子核周りの電荷量に意味はあるか？

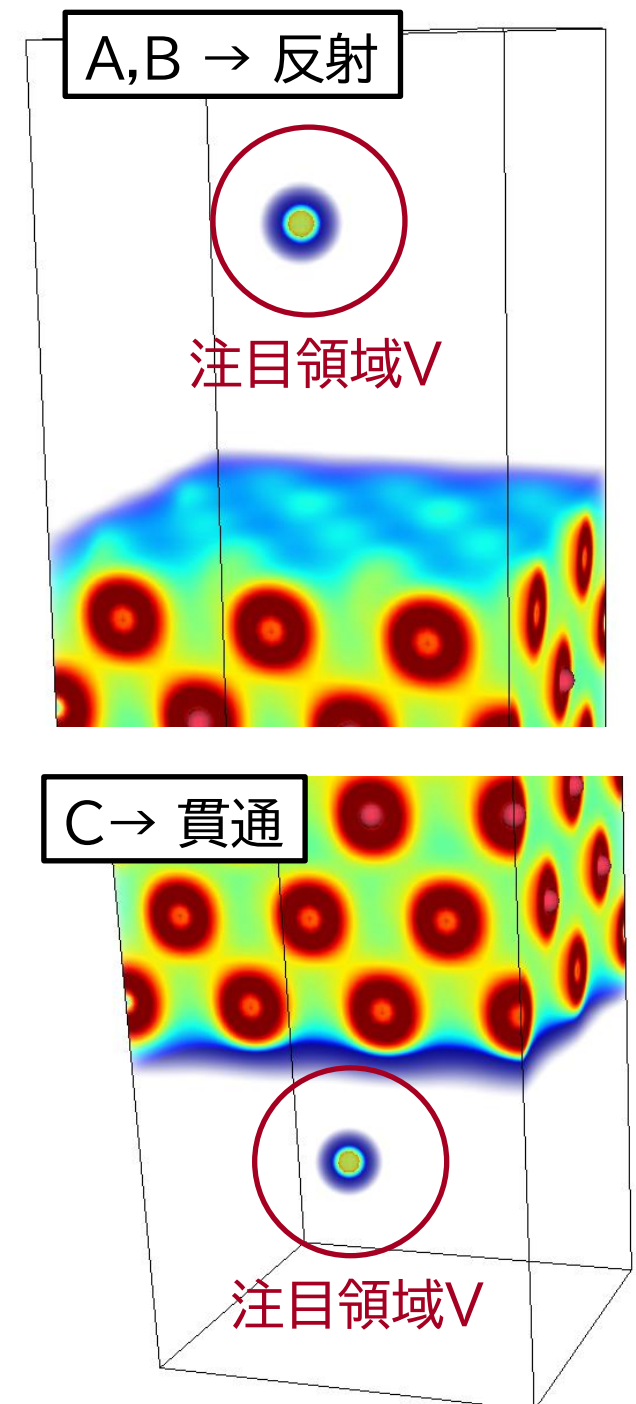
V: 原子核周りの半径6Bohrの領域

Q_{He} : 領域Vの中の電子密度の和

Case	Projectile	Target site	Q_{He}
(a)	He^{2+}	A	1.11
(b)	He^{2+}	B	1.16
(c)	He^{2+}	C	1.29
(d)	He^{1+}	A	1.03
(e)	He^{1+}	B	1.16
(f)	He^{1+}	C	1.18

非整数の電荷量となってしまう

⇒ 実は、複数の電子の波動関数が重なり合っている



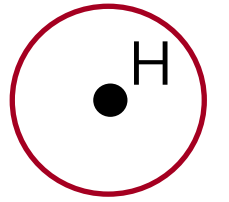
中性化確率の考え方

- 多電子系ではDFTの電荷量は存在確率ではない。
- 全波動関数はスレーター行列式を仮定

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \cdots & \psi_N(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(x_N) & \cdots & \psi_N(x_N) \end{vmatrix}$$

- 注目する原子核の周りにおける、「電子の検出確率」を考える
- 領域Vに電子が 1 個見つかる確率

$$\begin{aligned} P(1) = & \int_V dx_1 \int_W dx_2 \cdots \int_W dx_N |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 \\ & + \int_W dx_1 \int_V dx_2 \cdots \int_W dx_N |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 \\ & \vdots \end{aligned}$$



注目領域V

全体 - V = W

中性化確率の考え方

- 領域Vにup-spin電子が m 個見つかる確率

$$P(m; S_{\uparrow}) = \eta(m; S_{\uparrow}) - (m+1)\eta(m+1; S_{\uparrow}) \\ + \frac{(m+2)(m+1)}{2}\eta(m+2; S_{\uparrow}) + O(\langle \psi_{k_j} | \psi_{\tau(k_j)} \rangle_V^3),$$

$$\eta(m; S_{\uparrow}) = \sum_{\{j_1, \dots, j_m\}}^{S_{\uparrow}} \sum_{\tau} \text{sgn}(\tau) \prod_{k=1}^m \langle \psi_{j_k} | \psi_{\tau(j_k)} \rangle_V,$$

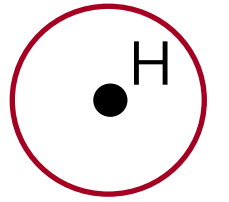
$$\langle \psi_{k_j} | \psi_{\tau(k_j)} \rangle_V = \int_V \psi_{k_j}^*(x, t) \psi_{\tau(k_j)}(x, t) dx,$$

- spinを区別しない確率は、up-spinとdown-spinでそれぞれ計算してから乗じる

$$P(0) = P(0; S_{\uparrow})P(0; S_{\downarrow}),$$

$$P(1) = P(1; S_{\uparrow})P(0; S_{\downarrow}) + P(0; S_{\uparrow})P(1; S_{\downarrow}),$$

$$P(2) = P(2; S_{\uparrow})P(0; S_{\downarrow}) + P(1; S_{\uparrow})P(1; S_{\downarrow}) + P(0; S_{\uparrow})P(2; S_{\downarrow}).$$



注目領域V

全体 - V = W

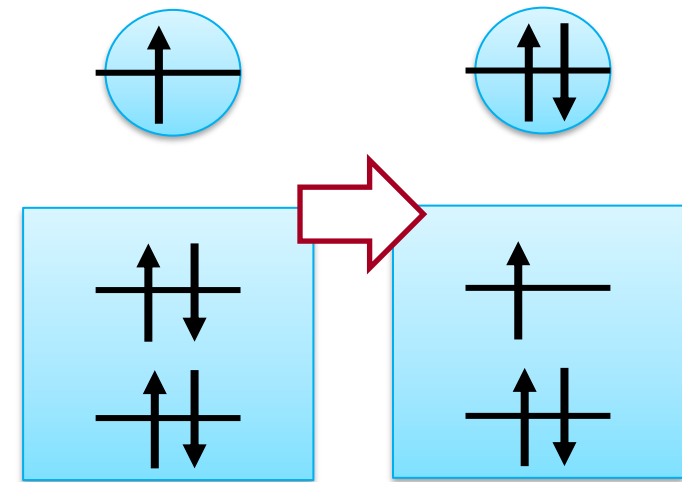
中性化確率の考え方:example



H原子で、かつ、単純化した2電子系として

- Hの周りの電荷量が0.6だった (※ 電荷量是非整数でもよい)
- up電子の検出確率が0.3, down電子の検出確率も0.3だったとする
 - 正イオン (電子が0個検出される確率): $(1 - 0.3)^2 = 0.49$
 - 中性原子 (電子が1個検出される確率): $0.3 \times (1 - 0.3) + (1 - 0.3) \times 0.3 = 0.42$
 - 負イオン (電子が2個検出される確率): $0.3^2 = 0.09$

Projectile	Site	Observed probability of backscattered/penetrating			Kinetic energy[eV]
		He ²⁺ ,	He ⁺ ,	He ⁰	
He ²⁺	A	0.441	0.405	0.135	89.7
	B	0.464	0.385	0.129	80.1
	C	0.478	0.376	0.125	81.8
He ⁺ (1s)	A	←0.017	0.980	0.004→	92.7
	B	←0.064	0.930	0.004→	87.0
	C	←0.032	0.967	0.001→	91.6

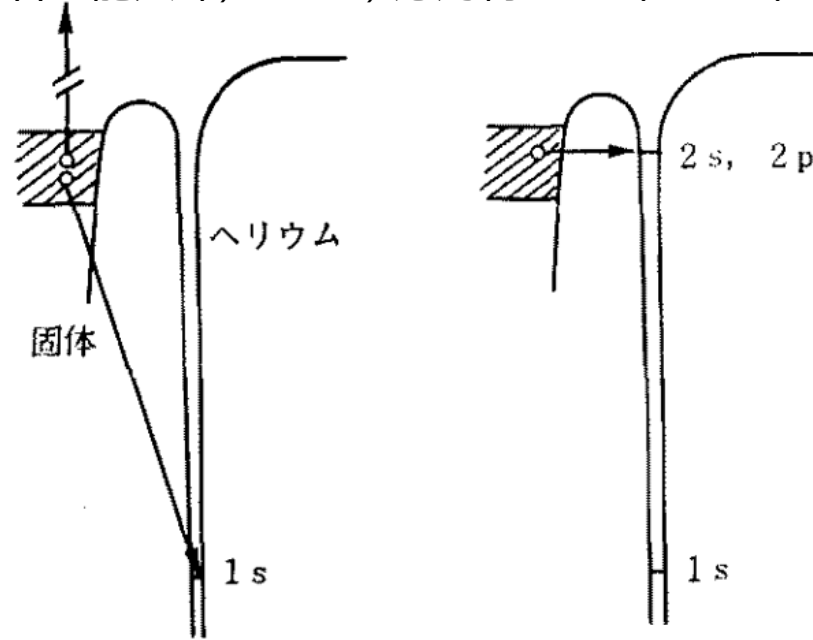


- He²⁺入射では、He¹⁺化や中性化の確率が有意と認められる
- He¹⁺入射では、殆ど電子を捕獲できない ⇒ 実験との差異、おそらくサイズ効果【課題】

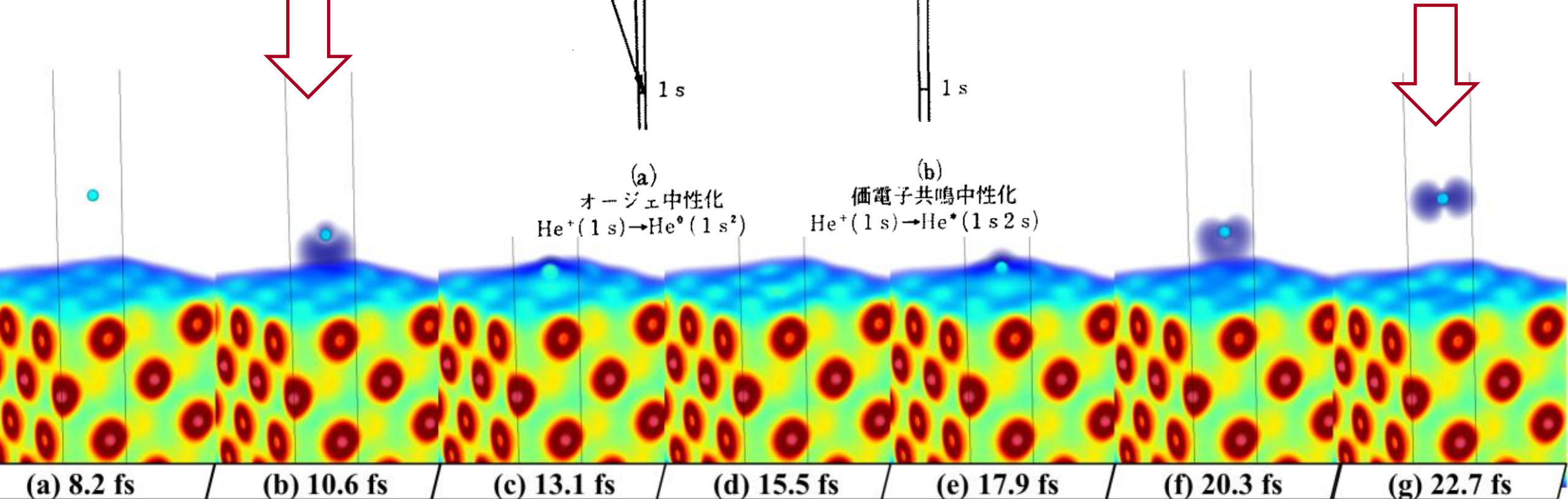
中性化過程のtraditionalなメカニズムとの比較

左右田龍太郎, et al., 応用物理54(1985)917

(1) 表面に到達する
前に電子捕獲



(2) 電子密度が球状ではない
⇒ p軌道?
⇒ 共鳴過程?



Summary & Discussion



➤ プラズマから飛来したイオンが表面で量子力学的に中性化される過程を扱うためにTDDFTコードQUMASUNを開発した

<https://github.com/atsushi-m-ito>

➤ Heイオンのタングステン表面での入射過程を計算

- $\text{He}^{2+} \rightarrow \text{He}^{1+}$ の場合、捕獲された電子は2s, 2p軌道が優勢⇒共鳴過程？
- 対するオージェ過程における、第二の電子へのエネルギーの受け渡しはどうやるのか？
電磁場が経由？

➤ He^{1+} が電子を捕獲できない理由

- サイズ効果でターゲット表面側のスピン分極の影響が懸念される

水素の場合：戸田悠斗氏(総研大D5)が研究中

農業応用：科研費学術変革A「プラズマ種子科学」(2024-2030)

Unit Report for Activity in 2024

Reconstruction of *electron velocity distribution function & Gibbs entropy* from ECE spectrum in optically thin plasmas

Meta-hierarchy Dynamics Unit

E. Kawamori (NCKU, Taiwan), H. Igami (NIFS), T. Tokuzawa (NIFS)

How input energy goes to heat in turbulence ?

- Boltzmann's H-theorem:

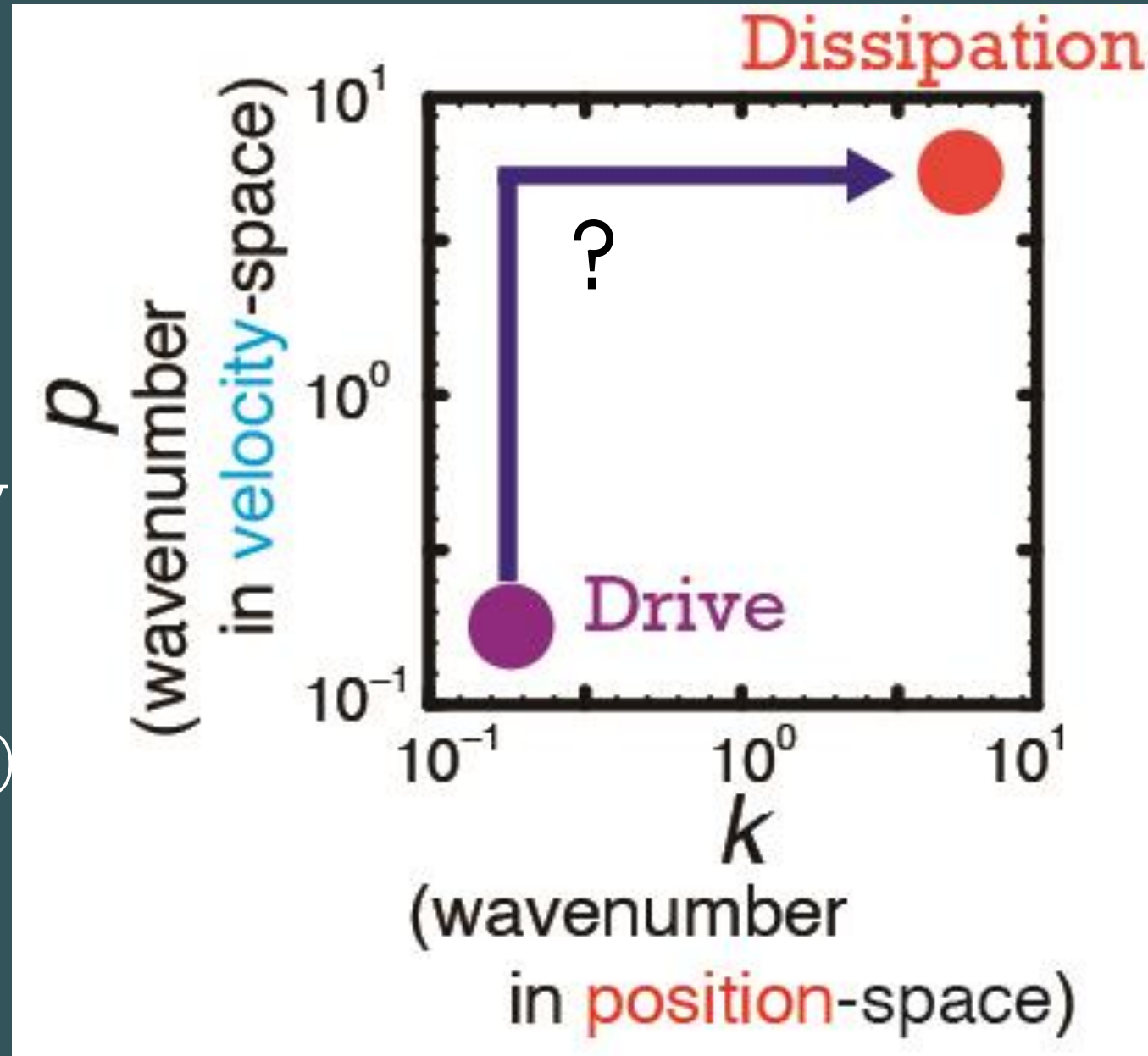
$$(s = - \int f \ln f \, dv)$$

$$\frac{ds}{dt} = - \int \ln f(\mathbf{v}) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} d\mathbf{v} \geq 0$$

Entropy production (heating) only

by $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \propto v_{coll} \partial f / \partial \mathbf{v}, v_{coll} \partial^2 f / \partial \mathbf{v}^2$

- Entropy production (dissipation) only at micro-scales in position & velocity (k - p space)
- Energy input is macroscopic



Optically-thin ECE spectrum contains information of $\tilde{f}_e$

$$P_{ECE}^m \propto \int d\vec{v}_\perp \mathfrak{P}_m |\vec{a}_X^*(k_\perp, \omega) \cdot \vec{J}_m|^2 \delta \left[\omega - m \frac{\Omega_{ce}}{\gamma} \right] \tilde{f}_e(v_\perp),$$

propagator $\times$ coupling $\times$ source

$$\mathfrak{P}_m \equiv \int_0^\infty dn^2 \frac{n \lambda_{ss}(k, m\Omega_{ce})}{\left| \left(\frac{\partial}{\partial n^2} \right) \Lambda_r(k, m\Omega_{ce}) \right|} \delta(n^2 - n_X^2)$$

$k_\perp, \vec{a}_X^*$: wavenumber, polarization vector of X-waves,
 n : refractive index

$$\text{Electron current: } \vec{J}_m := \left(\frac{m\Omega_{ce}v_\perp}{k_\perp u_\perp} J_m \left(\frac{k_\perp u_\perp}{\Omega_{ce}} \right), i v_\perp J'_m \left(\frac{k_\perp u_\perp}{\Omega_{ce}} \right) \right)$$

- ✓ Fredholm integral equation of the 1st kind (ill-posed linear problem)
- ✓ How to extract $\tilde{f}_e(v_\perp)$ for measured P_{ECE}^m ?

$\tilde{f}_e$ can be extracted by Maximum entropy method

$$f = F_0(v_\perp) + \tilde{f}(\mathbf{r}, v_\perp)$$

Entropy:

$$\tilde{S} = - \int \tilde{f}_e \ln \tilde{f}_e d\vec{v}_\perp$$

Constraints from measurement of

$$\tilde{P}_{ECE,m}/P_{ECE,m0}$$

$$I \equiv \tilde{S} - \sum_{m=1,\dots} \lambda_m \times \left\{ \frac{\tilde{P}_{ECE,m}}{P_{ECE,m0}} - \frac{\int v_\perp dv_\perp \tilde{f}_e(v_\perp) |\vec{a}_X^* \cdot \vec{J}_m|^2}{\int v_\perp dv_\perp F_0(v_\perp) |\vec{a}_X^* \cdot \vec{J}_m|^2} \right\}.$$

λ_m : undetermined multipliers

$\delta I = 0$ gives $\tilde{f}_e$, Constraints determine λ_m

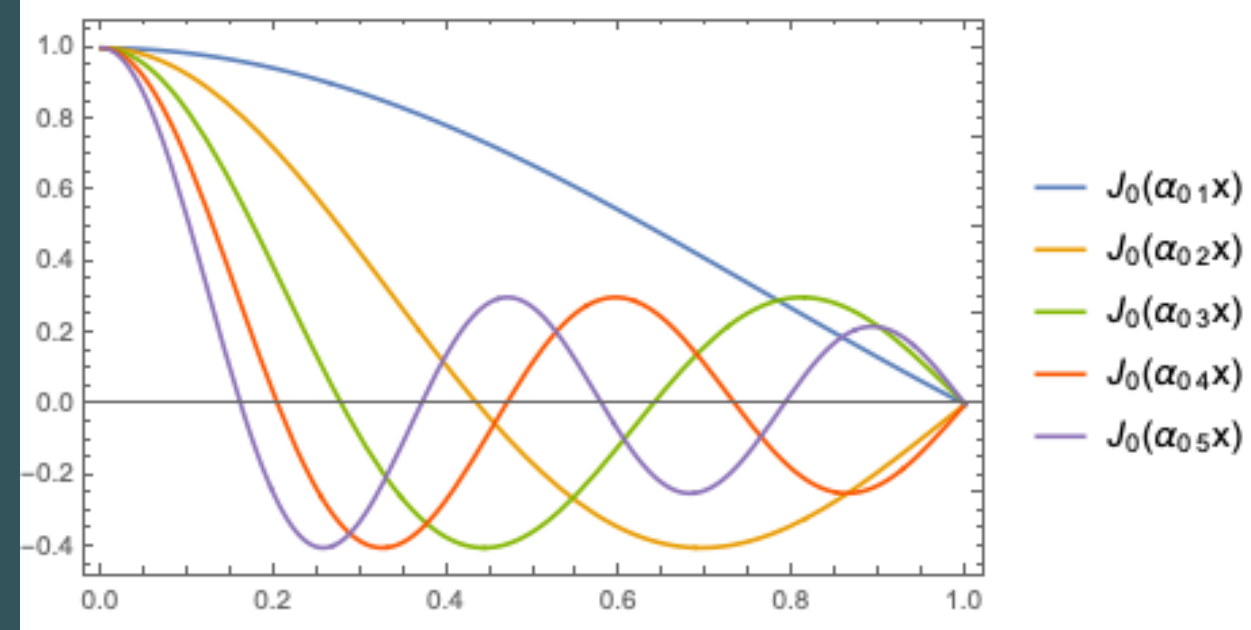
Transformation from $v_{\perp}$ -space to p -space

- Axisymmetric Fourier-Bessel transform

- $\tilde{f}_e(p) =$
$$\frac{2}{(v_{\perp}^{ub})^2 J_1^2(j_{0p})} \int_0^{v_{\perp}^{ub}} v_{\perp} dv_{\perp} J_0 \left(j_{0p} \frac{v_{\perp}}{v_{\perp}^{ub}} \right) \tilde{f}_e(v_{\perp})$$

- $\tilde{f}_e(v_{\perp}) = \sum_{p=1}^{p_{ub}} \tilde{f}_e(p) J_0 \left(j_{0p} \frac{v_{\perp}}{v_{\perp}^{ub}} \right)$

- $\tilde{S}(p) \equiv - \sum_{p=1}^{p_{ub}} \tilde{f}_e(p)^2 \frac{J_1^2(j_{0p})}{2}$



$\tilde{f}_e$ can be represented by basis function $H_m(p)$

- $\tilde{f}_e(p) = \frac{(v_\perp^{ub})^4}{2J_1(j_{0p})} \sum_{m=1}^{m_{max}} \lambda_m H_m(p),$

$$H_m(p) = \int_0^1 x dx x^2 [(m\Omega_{ce})^2 |\vec{a}_X^*(k_\perp, m\Omega_{ce}) \cdot \vec{J}_m(k_\perp, v_\perp)|^2] J_0(j_{0p}x).$$

- $H_m(p)$ can be computed once the propagation mode X is determined, i.e., by calculating $k_\perp$ and $\vec{a}_X^*(k_\perp, m\Omega_{ce})$.
- $H_m(p)$ is a sort of the basis function

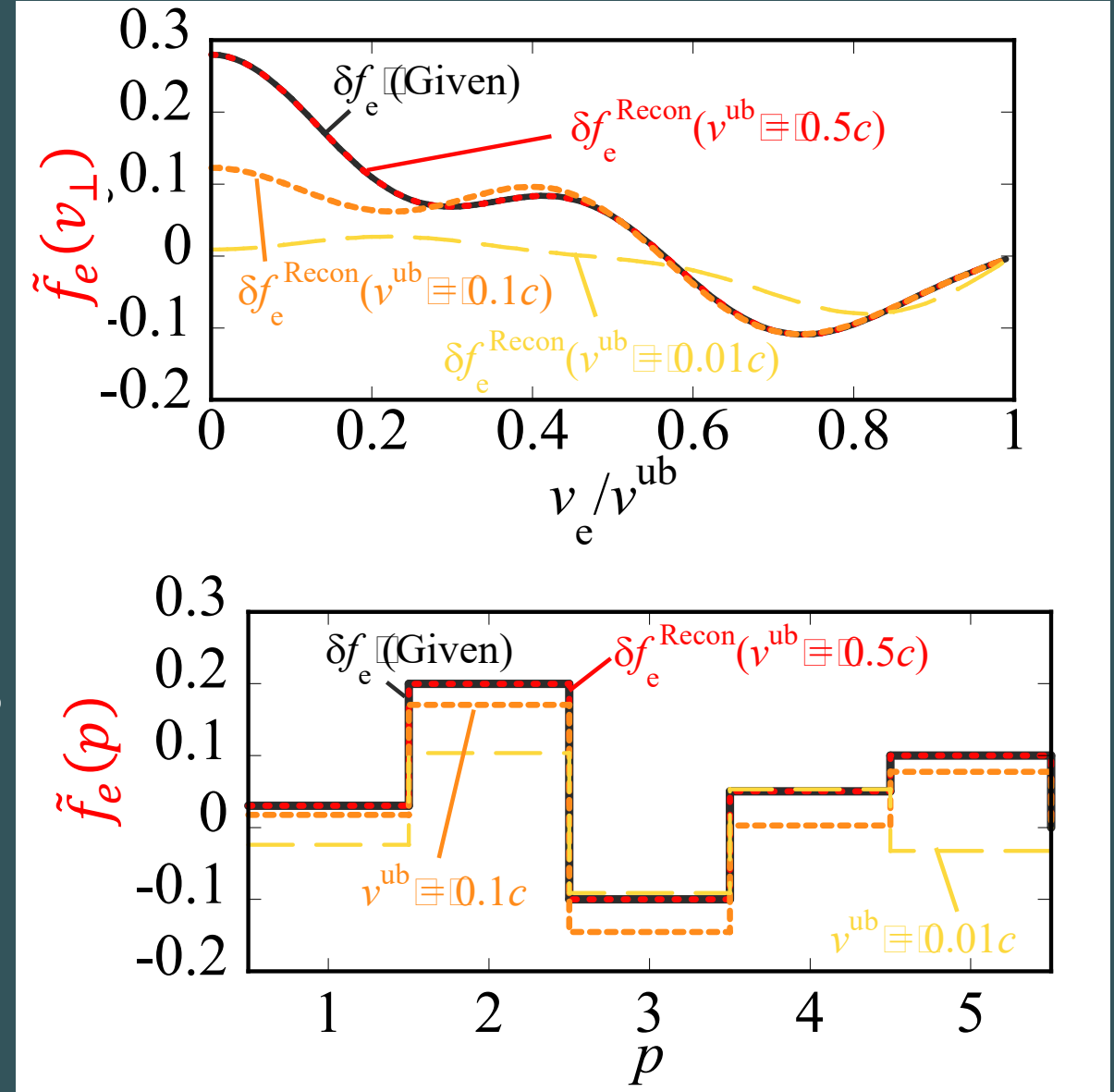
Example of reconstruction (numerical tests)

- X-mode harmonic ECE from $m = 1$ to 5, is generated by

$$\tilde{P}_{ECE,m} = \int v_{\perp} dv_{\perp} \tilde{f}_e(v_{\perp}) |\vec{a}_X^* \cdot \vec{J}_m|^2$$

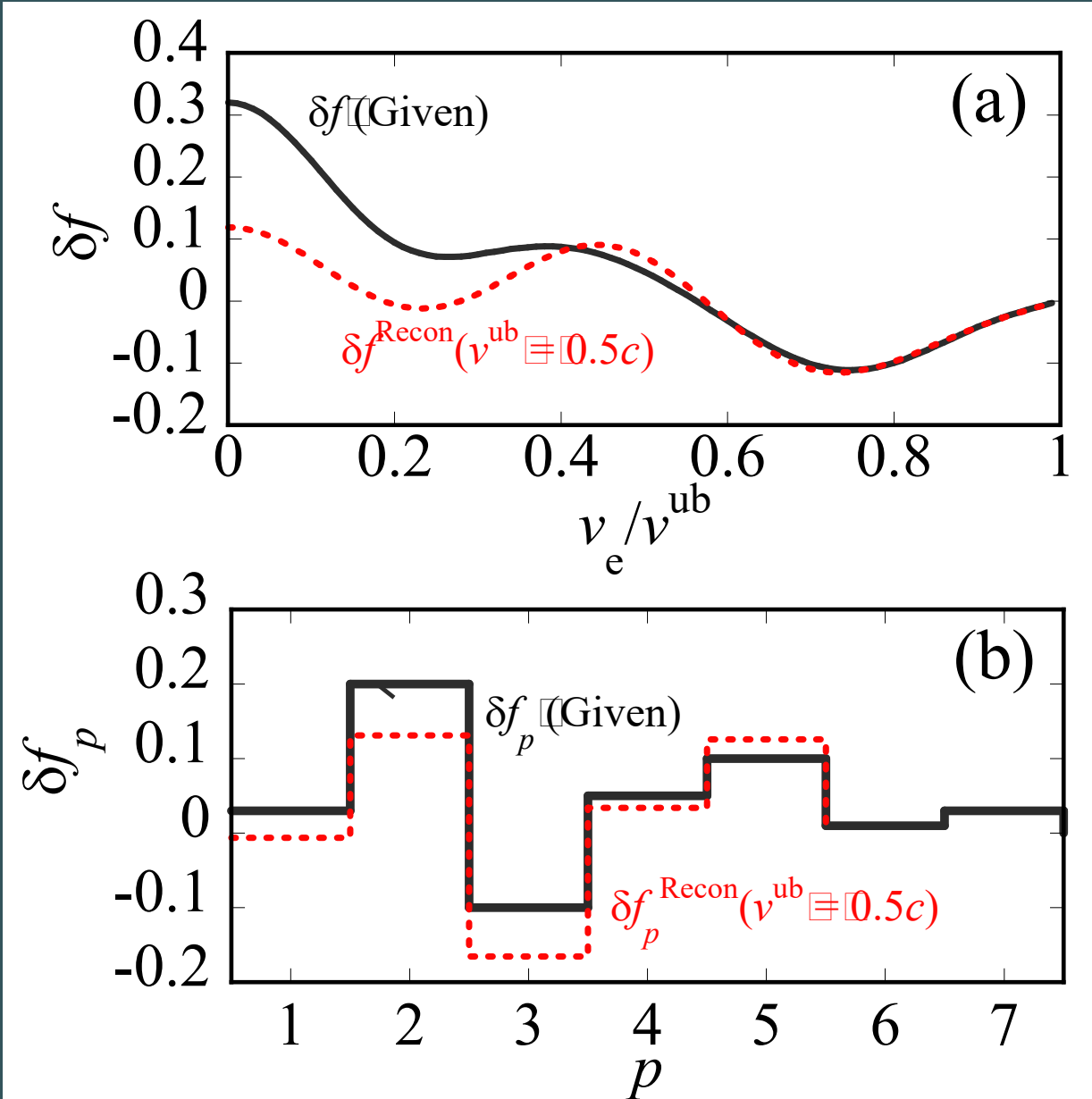
($p = 1$ to 5 are given)

- Perfect reconstruction for high v_{ub} ($>0.5 c$)



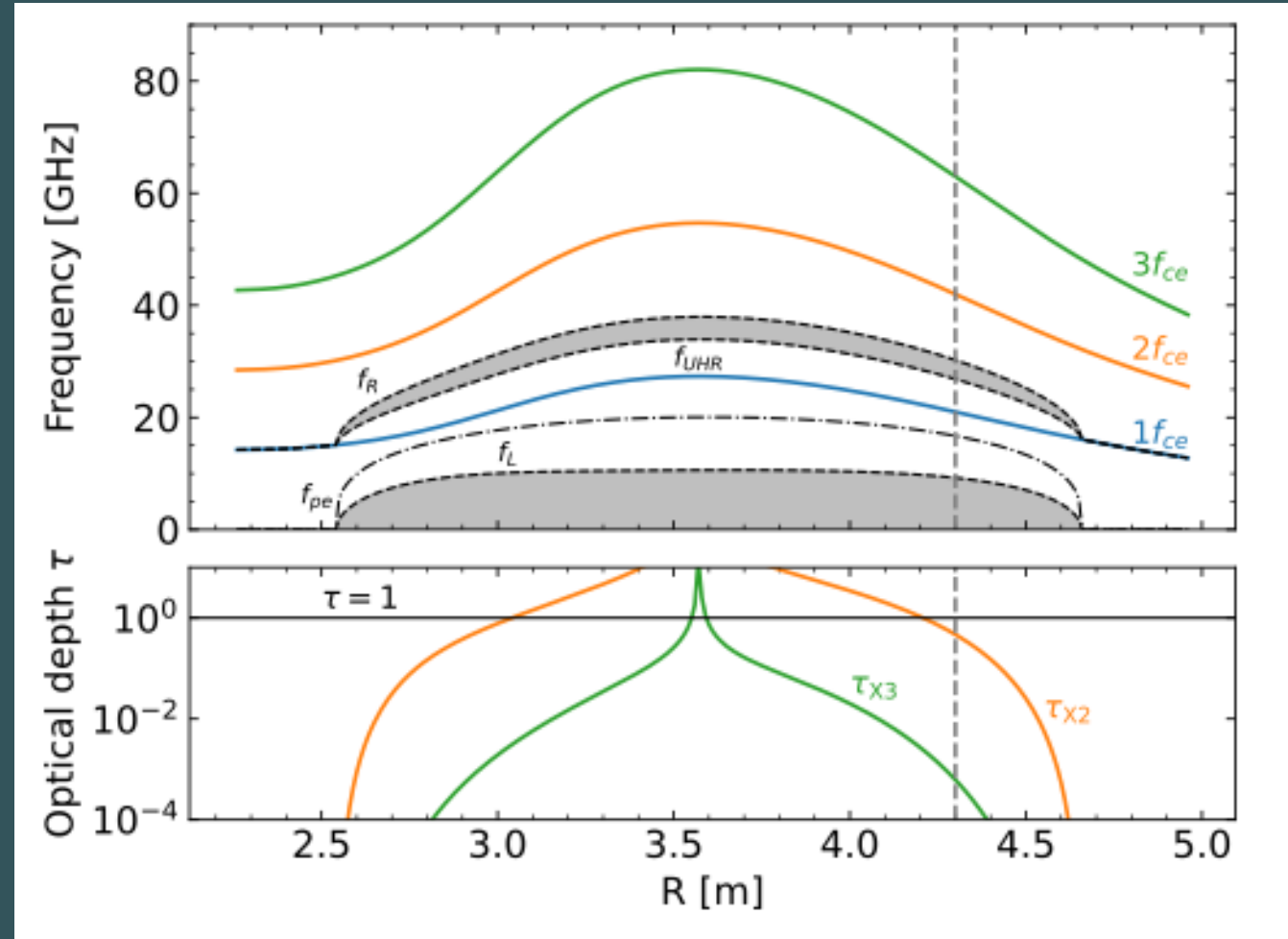
Reconstruction (ill-posed condition)

- Harmonic ECE $m = 2-5$ are measured, whereas the given $\tilde{f}_e$ contains $p = 1-7$
- Despite the lack of fundamental ECE, the reconstructed p-profile closely matches the original with minimal error.



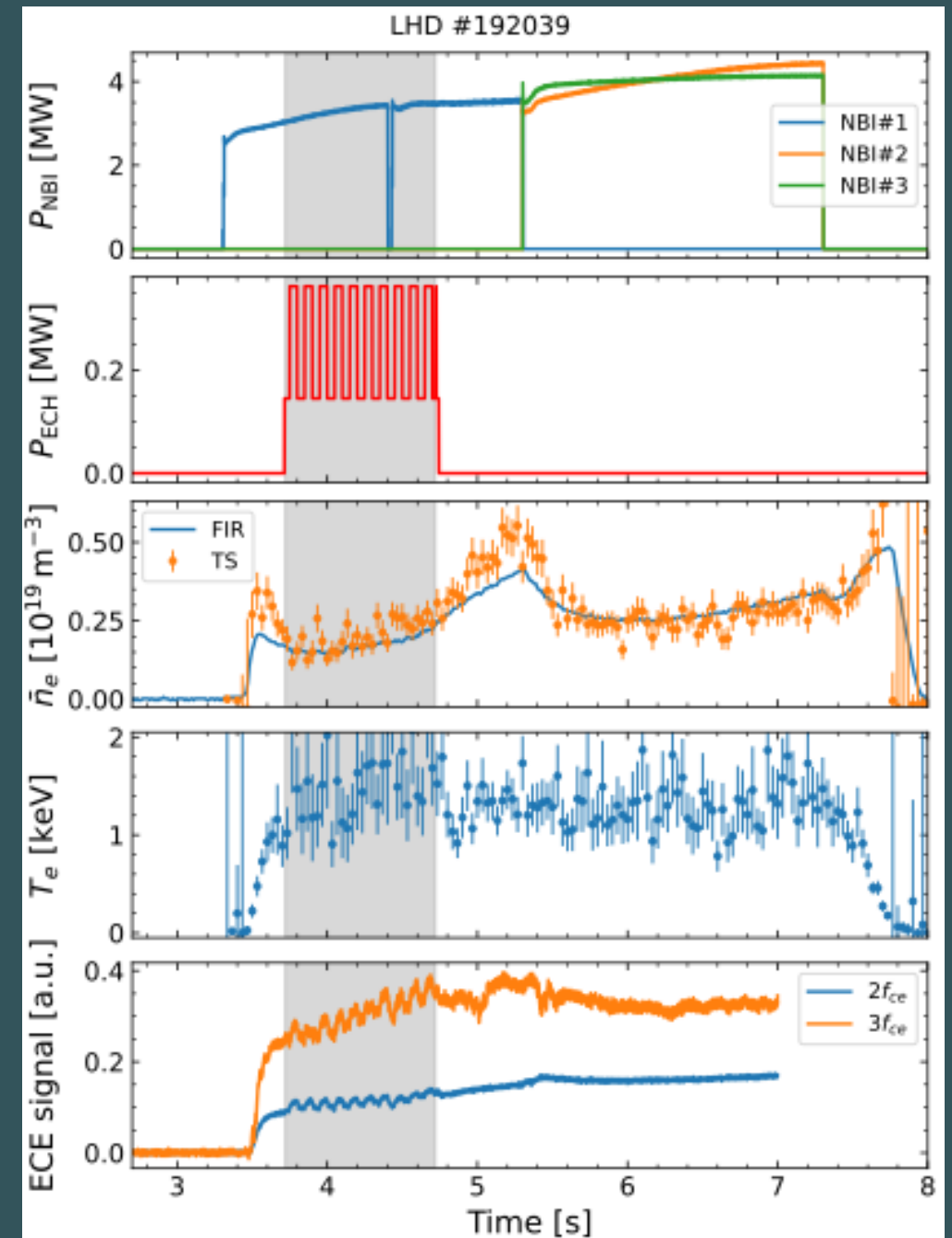
Experimental verification in LHD plasma

- Low $B \sim 1$ T for high harmonic ECE measurement
- X-mode harmonic ECE from $m = 2$ to 3
- Optically thin $\tau < 1$, low n_e & T_e plasmas
- External perturbation to $f_e(v)$ by ECE modulation



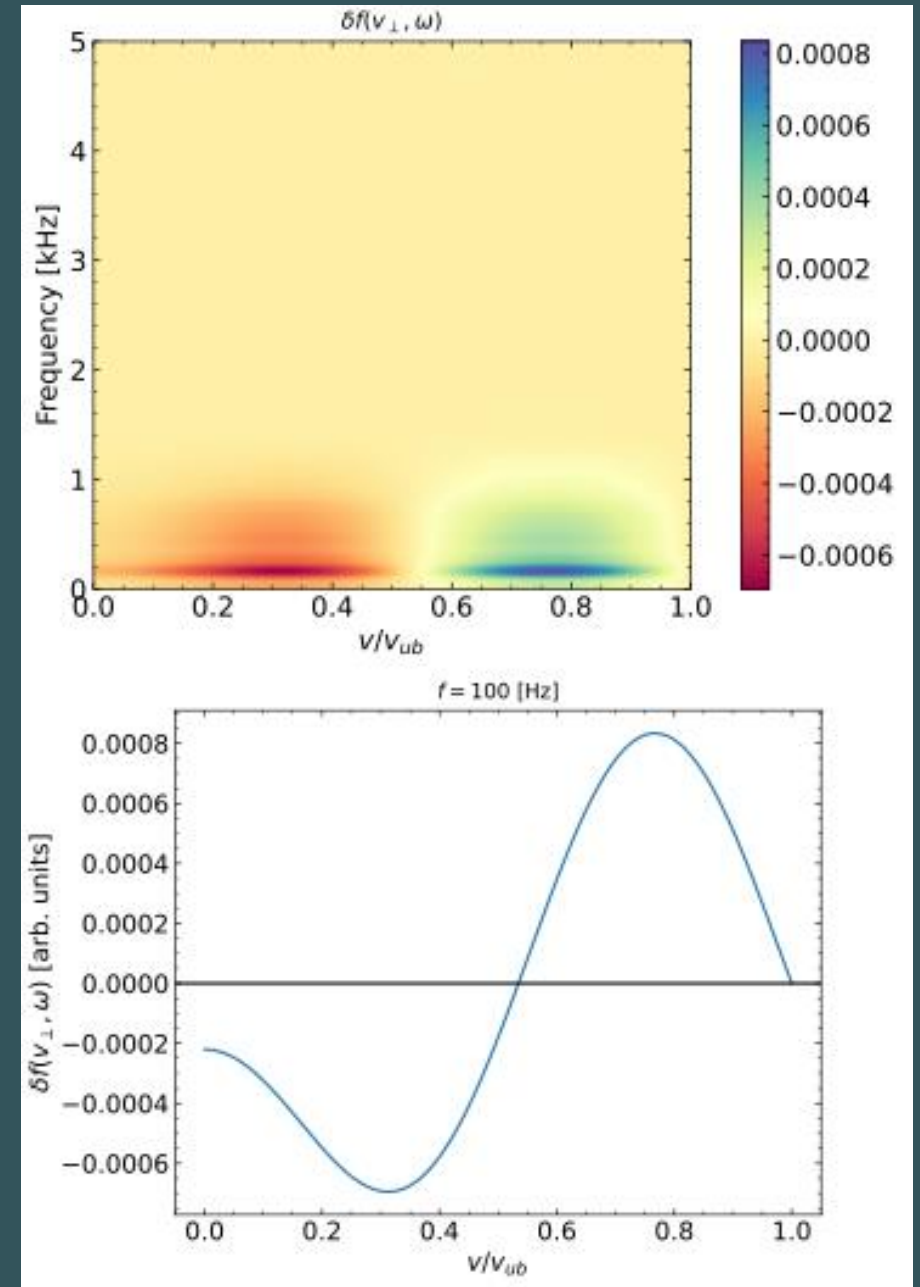
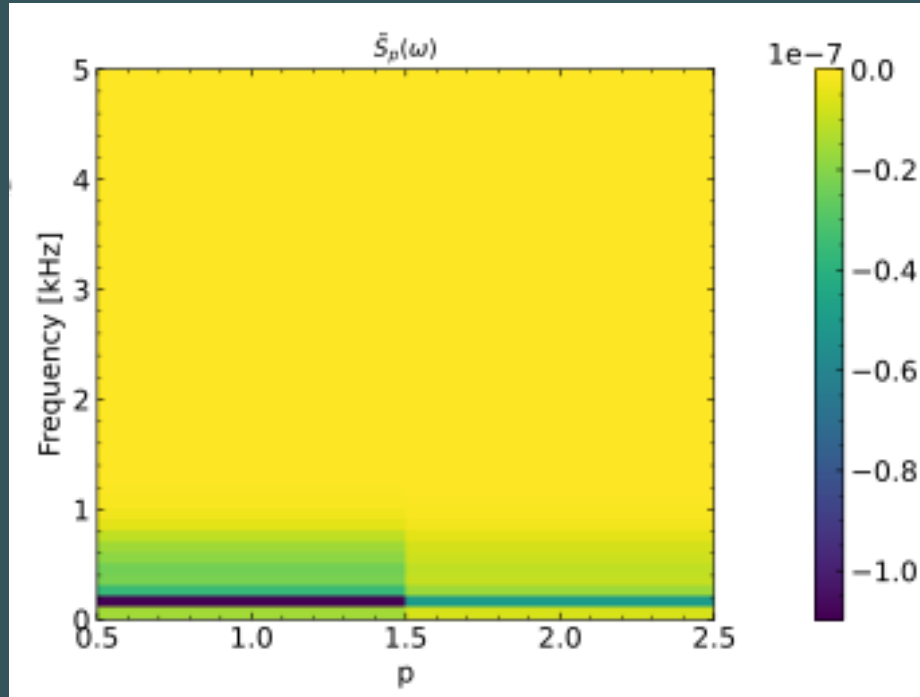
External perturbation to $f_e(v)$ by ECH/NB modulation

- NB start-up n_e plasma
- ECH modulation (10-100 Hz) as external $f(v)$ perturbation drive
- n_e , T_e & ECE (2nd & 3rd) fluctuated @ 10 Hz



An example of Reconstructed $\tilde{f}_e(v_\perp)$

- Reconstruction up to $p = 3$
- Comparison with Thomson data is in progress



Summary

1. A reconstruction method of $\tilde{f}_e(v_\perp)$ & the Gibbs entropy $-\int \tilde{f}_e \ln(\tilde{f}_e) d\vec{v}_\perp$ from ECE spectra is formulated and numerically validated

Pros:

- No need of calibration of radiometer (coefficients of propagation of the waves in the plasma, antenna pattern, etc. are eliminated in the formulation)
- Relativistic extension is easy, 2D velocity components reconstruction possible

Cons:

- Applicable to only optically-thin plasmas

2. Experimental verification in LHD experiment is in progress

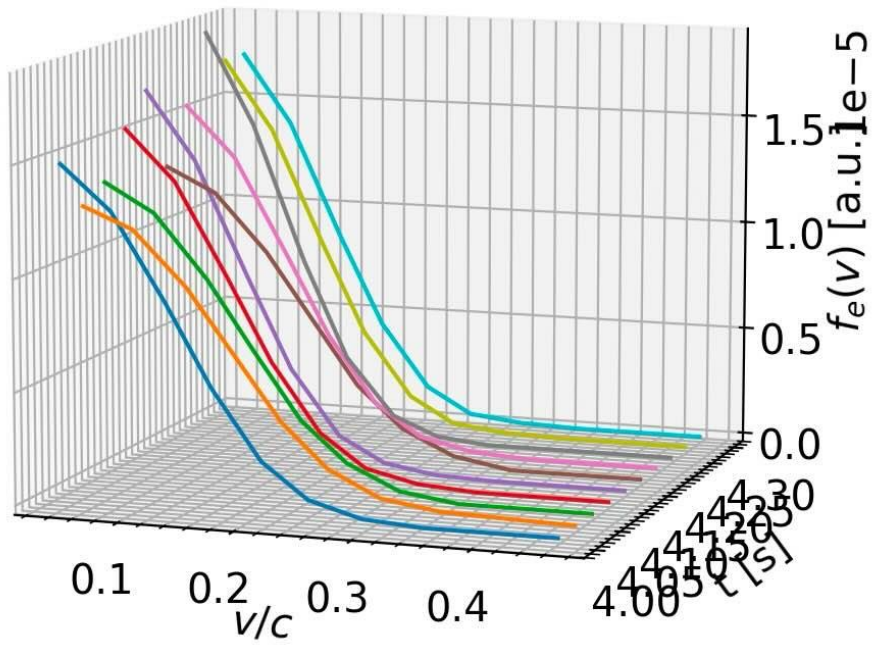
Publication:

- [Kawamori Eiichirou](#) 2025 Nucl. Fusion Vol. 65 026024

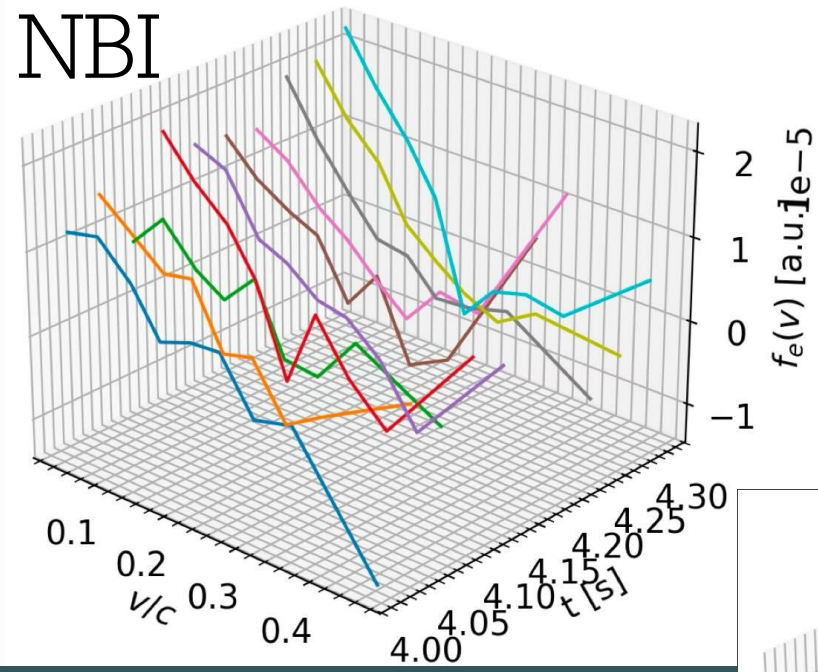
International Conferences, Workshops:

- [E. Kawamori](#), H. Igami, T. Tokuzawa, "Reconstruction of electron velocity distribution function and Gibbs entropy from electron cyclotron emission spectrum", US-Japan Workshop on RF Heating and Current Drive Physics, 17-19 March 2025, Kyoto University Uji campus (hybrid), Japan, Oral 23
- [Tzu-Chi Liu](#), E. Kawamori, H. Igami, T. Tokuzawa, "Measurement of High Harmonics ECE in Optically Thin LHD Plasmas for the Reconstruction of Electron Velocity Distribution Function and the Evaluation of Electron Entropy", 8th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics (AAPPS-DPP2024), Nov. 3-8, 2024 at Grand Swiss-Bel Hotel, Malacca, Malaysia, Poster
- [E. Kawamori](#), "Evaluation of electron entropy with the use of harmonic electron cyclotron emission spectrum in optically thin plasmas", 24th International Stellarator Heliotron Workshop, 9-13 September 2024, Hiroshima, Japan, Poster
- [Tzu-Chi Liu](#), E. Kawamori, H. Igami, T. Tokuzawa, "Measurement of High Harmonics Electron Cyclotron Emission (ECE) in Optically Thin LHD Plasmas for Electron Velocity Distribution Function Reconstruction", 24th International Stellarator Heliotron Workshop, 9-13 September 2024, Hiroshima, Japan, Poster

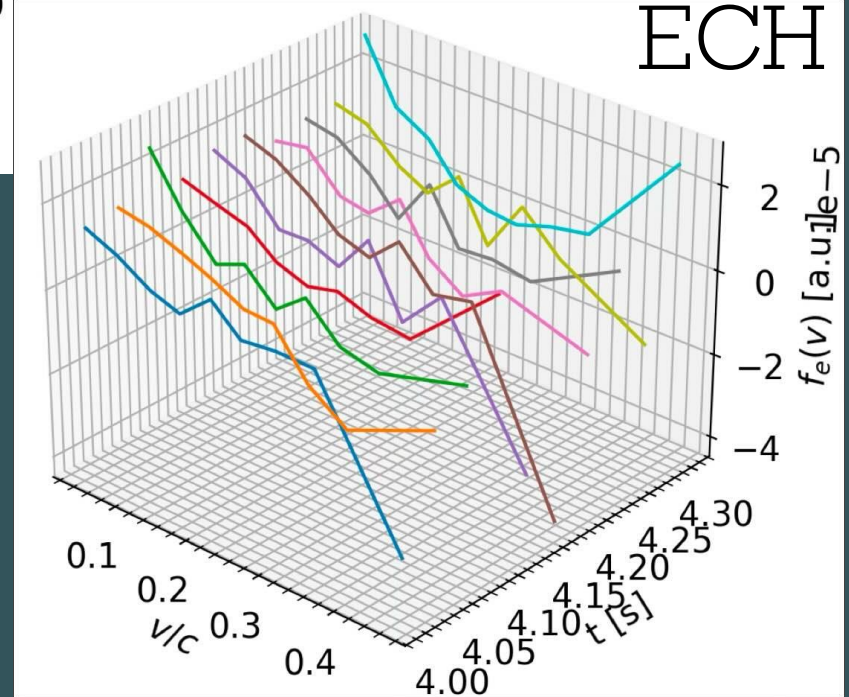
Cross-check by 9ch Thomson Scattering



NBI



ECH

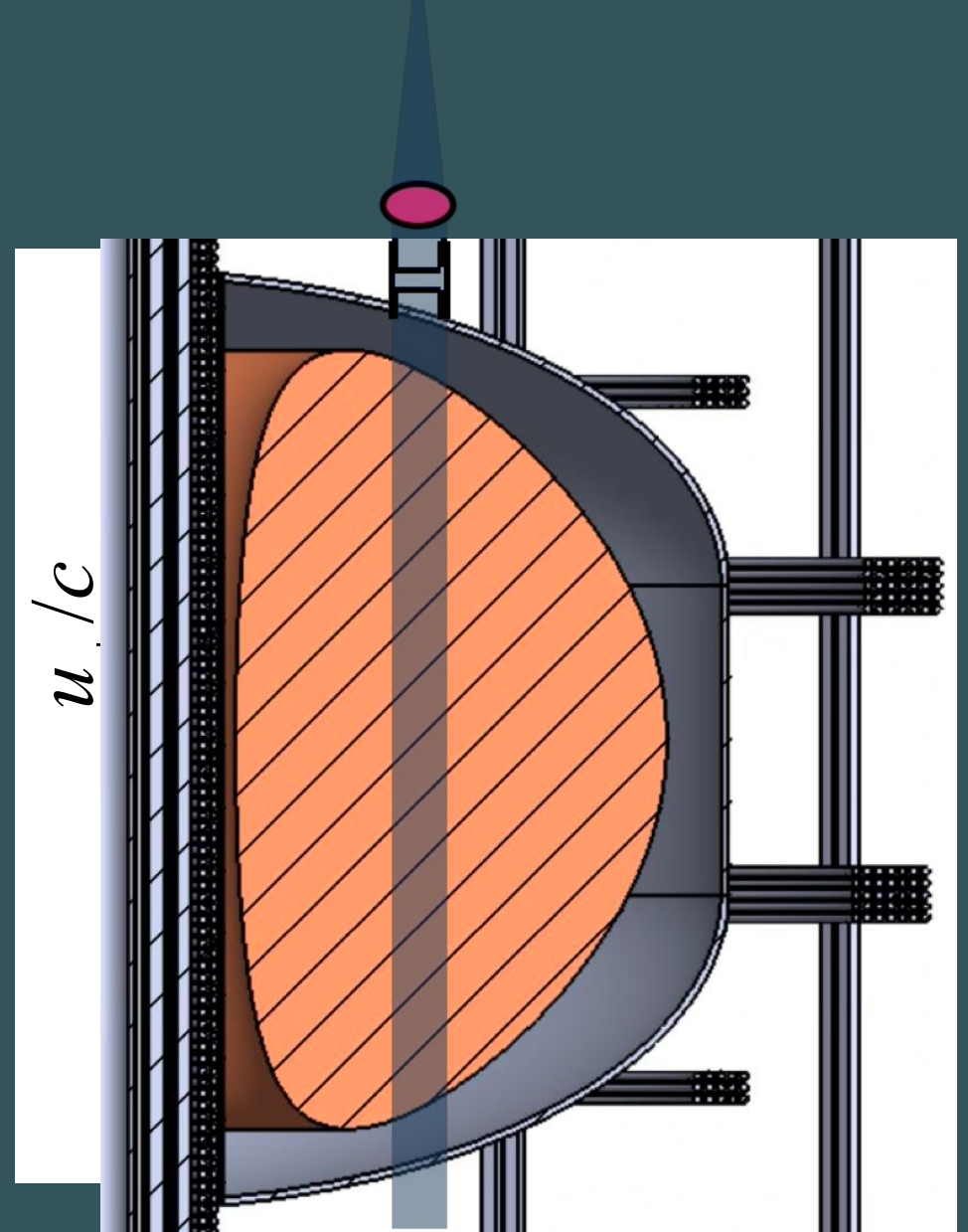


Relativistic extension

- Emissivity at $\omega = m(\Omega_{ce} - \Delta\omega)$
($m = 1, 2, \dots$) restricts the electron radiation source to the momentum sphere

$$\gamma = \sqrt{1 + u^2/c^2} = m \frac{\Omega_{ce}}{\omega} = \frac{\Omega_{ce}}{(\Omega_{ce} - \Delta\omega)}$$

- The $\delta f(v_\perp)$ reconstruction scheme can reconstruct $\delta \hat{f}(u_\perp, |u_{//}|)$ with $u_{//}^2 = \sqrt{\bar{u}^2 - u_\perp^2}$



Elimination of $\mathfrak{P}_m$ by application of Cold plasma approximation to ECE wave propagation

$$\frac{\tilde{P}_m}{P_{m0}} = \frac{\mathfrak{P}_{\overline{m}} \int v_{\perp} dv_{\perp} \tilde{f}_e(v_{\perp}) \sum_i |\vec{a}_i^*(k_{\perp}, m\Omega_{ce}) \cdot \vec{J}_m|^2}{\mathfrak{P}_{\overline{m}} \int v_{\perp} dv_{\perp} F_0(v_{\perp}) \sum_i |\vec{a}_i^*(k_{\perp}, m\Omega_{ce}) \cdot \vec{J}_m|^2}.$$

This equation is independent on the other harmonics m

Summary of reconstruction procedure

1. Fourier transform of $\tilde{\eta}_m(t, m\Omega_{ce}) \rightarrow \tilde{\eta}_m(\omega, m\Omega_{ce})$, $\omega \ll \Omega_{ce}$

2. λ_m are determined by solving,

$$\frac{\tilde{\eta}_m}{\eta_{m0}} = \sum_{p=1}^{p_{max}} \frac{(v_{\perp}^{ub})^2}{2J_1(j_{0p})} \times \left\{ \sum_{m'=1}^{m'_{max}} \lambda_{m'} H_{\mathbf{p}}^{m'}(k_{\perp}(m\Omega_{ce})) \right\} H_{\mathbf{p}}^m(k_{\perp}(m\Omega_{ce}))$$

$m = 1, 2, \dots, m_{max}$

3. $\delta f_{\mathbf{p}}(\omega) = \frac{(v_{\perp}^{ub})^4}{2J_1(j_{0p})} \sum_{m=1}^{m_{max}} \lambda_m H_{\mathbf{p}}^m(; k_{\perp}(m\Omega_{ce})), [\delta f(v_{\perp}) = \sum_{\mathbf{p}=1}^{p_{ub}} \delta f_{\mathbf{p}} J_0(j_{0p} \frac{v_{\perp}}{v_{\perp}^{ub}}).]$

$$H_{\mathbf{p}}^m(; k_{\perp}(m\Omega_{ce})) = (m\Omega_{ce})^2 \int_0^1 x dx x^2 \left[J_{m-1}^2\left(\frac{ck_{\perp}}{\Omega_{ce}} \frac{v_{\perp}^{ub}}{c} x\right) + J_{m+1}^2(\cdot) + J_{m-1}(\cdot) J_{m+1}(\cdot) \right] J_0(j_{0p} x).$$

4. $\tilde{S}_{\mathbf{p}}(\omega) \equiv - \sum_{\mathbf{p}=1}^{p_{ub}} \delta f_{\mathbf{p}}^2(\omega) \frac{J_1^2(j_{0p})}{2}.$

Bessel function J_m

