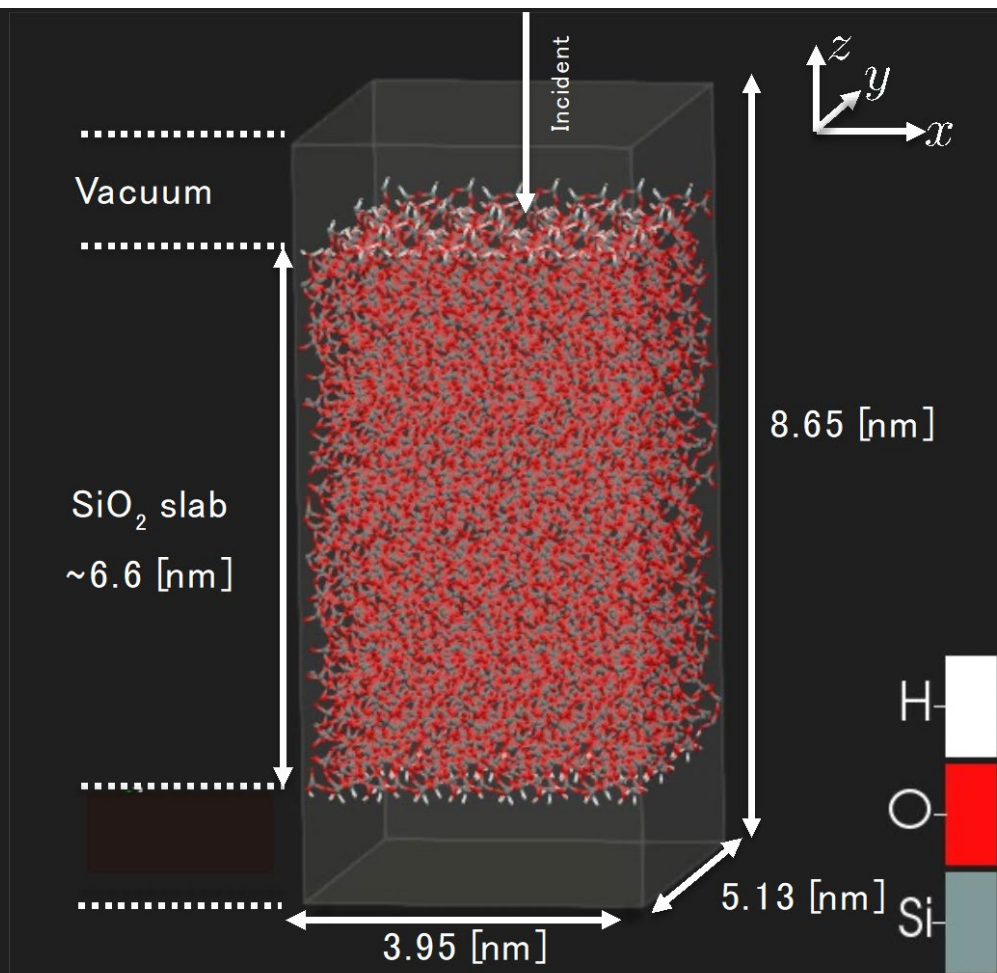




ガラス薄膜の光・電子・イオンダイナミクス計算。
富岳の1/6を利用した大規模計算(P.1研究紹介より)

CONTENTS

研究紹介 | 光量子ビーム科学研究部
超高速電子物性研究プロジェクト 01

今月の科学館 02

関西研 日記 03

Day. 11
夏休みの思い出
～庶務課員編～



◆電子と光の高精度計算プログラム「SALMON」の開発

最先端のレーザーは益々強くなり、時間幅も短くなっています。このようなレーザーと物質の相互作用はレーザー（電磁場）、物質（電子）を別々に考えては理解できません。しかし、そのような理論や計算手法はなく、モデルや想像で補うしかありませんでした。

そこで我々は光を記述するマクスウェル方程式と電子を記述する時間依存密度汎関数法を同時に解くことのできる世界で初めてのプログラム「SALMON」を開発しました。現在SALMONはオープンソースとして公開され（図1）関西光量子科学研究所が中心となって更なる開発が進められています。



図1: SALMONのウェブページ

◆SALMONでできること

SALMONでは電子、光、最近ではスピンのダイナミクスを扱えるため様々な現象をシミュレートすることができます。

図2 はシリコンの50nm薄膜にレーザーを照射して電子を励起させた時の電子運動の様子を計算したものです。赤青色が濃い程電子が大きく運動しています。空気中で800nmの波長はシリコン内部では1/4の200nmとなるため、電場の強度（白線）が場所によって違います。電子はこの電場によって動きます。図2の赤青の濃淡を見るとこの電場強度に従って運動していることが分かります。この電子運動により、電子励起や光の反射・透過を理解することができます。この他にもスピン（磁気）や格子振動、加工の初期過程や光の波長変換などの計算が可能です。



図2: シリコン薄膜にレーザーを照射している時の電子の運動の様子。赤は電子密度の増加、青は減少を表している。

め、電場の強度（白線）が場所によって違います。電子はこの電場によって動きます。図2の赤青の濃淡を見るとこの電場強度に従って運動していることが分かります。この電子運動により、電子励起や光の反射・透過を理解することができます。この他にもスピン（磁気）や格子振動、加工の初期過程や光の波長変換などの計算が可能です。

SALMONのもう一つの特徴として効率的な大規模計算が可能であるという点が挙げられます。図3は1万原子によるガラス（SiO₂）の光励起シミュレーションの例です。

計算はスーパーコンピュータ富岳全システムの1/6を使った大規模計算になります。このような大規模な系のダイナミクスを計算した例はなく、大きな計算を効率良く計算できるSALMONの利点が活かされた例です。

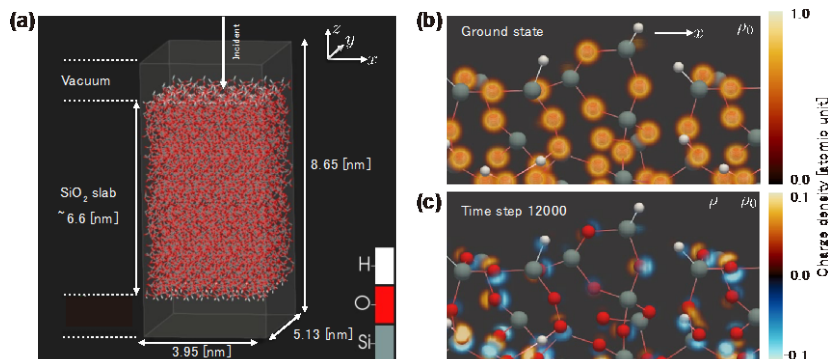


図3: ガラス薄膜の光・電子・イオンダイナミクス計算。富岳の1/6を利用した大規模計算（Int. J. High Performance Computing Applications, 36, 182 (2022).）。（b）: 光励起前 （c）: 光励起後に電子の密度変化の様子（赤が密度増加）が確認できる（ 9×10^{-15} 秒後）

◆これからの発展

SALMONは世界唯一の電子・光高精度シミュレーションを可能とするオープンソースプログラムです。現在はナノメートル空間のフェムト秒領域のダイナミクスの記述を得意としていますが、最新の計算技術や理論を取り入れていくことでより大きな領域、長い時間の記述を可能にすることを考え開発を続けています。

ゆくゆくは「光のシミュレーションがしたいならSALMONを使っておけば大丈夫」、と言われるデファクトスタンダードソフトウェアとなる事を目指します。



8月の科学館



利用状況

先月から始まった親子工作イベントは8月25日に最終日を迎えました。夏休みのご家族連れのほか、Super Science High School や科学クラブのツアー団体などもお迎えし、月間の来館者数は4,000名を越える結果となりました。

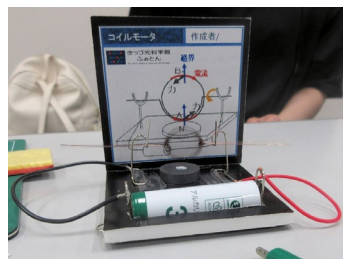
また、京都新聞社の取材を受け、京都新聞山城版の「たんけん山城」に掲載されました。



紙コップカメラ



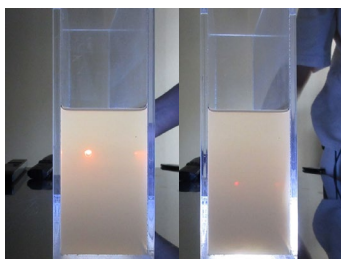
ミラー偏光板



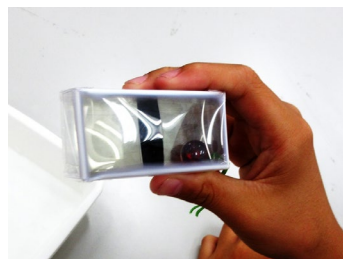
コイルモーター



日光写真



実演「夕日を作る」



不思議な箱

QST
きつづ元科学館ふおとん

9月のふおとん

2024

10月号もお楽しみに!!

ワークショップについて【参加費無料】●当日、都合により工作内容が変更となる場合がございます。

- 当日の朝、先着順にて受付致します。(午前・午後各1回)
- 工作は保護者同伴となります。
- 申し込み時必ず保護者様とお子様いっしょにお並び下さい。
- 家族お子様2人までの参加となり、おひとり1日1回となります。

のぞいてみよう! 不思議な光の世界

プラネタリウム

平日		土曜	
EM EYE 第三の目	今日の星空	こころのディオ	ふたへきなる宇宙
11:00(10:50入場)	14:00(13:50入場)	11:00(10:50入場)	14:00(13:50入場)

日曜・祝日

世界遺産 宇宙への扉	THE MOON 月のふし
11:00(10:50入場)	14:00(13:50入場)

●先着順、定員になり次第終了となります。
●ご覧になられる方のみまでお並びください。
●上映10分前入場時におそいでない方が優先となります。
●当日、都合により内容が変更となる場合がございます。

9/16 定例108 お月見プラバン ①10:15-10:45 ②15:00-15:30 (お月見お月見)

9/23 定例108 はればははのクワゼリ ①10:15-10:45 ②15:00-15:30 (お月見お月見)

9/30 通常開館 観内自由見学・プラネタリウム ①11:00 ②13:50入場 ③14:00 ④15:30入場

9/28(土) 9/29(日) 設備点検のため臨時休館致します。

関西研 日記

Day. 11

夏休みの思い出
～庶務課員編～



庶務課員A

家族旅行で金沢・福井に行ってきました。ちょうどお盆休み期間だったので特に恐竜博物館は大混雑で、携帯電話が突如圏外になるなど、大変な思いをしました。金沢では、いけすに入った蟹を息子が食べたいと言うので、北海道産ではありましたが仕方なく注文して食べるなどしました。おいしかったです。

庶務課員B

ハウステンボスに行ってきました。夏休み中でしたが、思ったほどの混雑はありませんでした。午前中はプール、午後はアトラクション、夜はイルミネーションやランタンフェスティバルなどを楽しみました。ヒマワリ畑とヨーロッパの街並みで非日常感を味わう事ができ、いいリフレッシュになりました。



庶務課員C

家族で北海道に行きました。トマムに雲海を見に行ったり、富良野では気球に乗り、高さ40mから素晴らしい北の大地を一望することができました。今回のメインは「ノースサファリサッポロ」という動物園でベンガルトラの檻の中に入り対面でエサやりをすることでした。はじめは怖かったですが、至近距離で見ると毛並みや目がきれいで、とても貴重な経験をすることができました。

庶務課員D

小学生の息子と天橋立で有名な京都府宮津市へブルーインパルスの展示飛行を見に行ってきました。当日は、猛暑にもかかわらず、数時間前から大勢の観客が訪れており、ブルーインパルスの人気の高さに驚かされました。青空の下で描かれる白いラインはとても力強く、美しく、その見事なフォーメーションに息子も私も大興奮！夏休みの忘れられない思い出となりました。



今月のギャラリー

8月8日（木）にSPRING-8/SACLAの見学に来所した岡山大学理学部物理学科の1年生約20名に対し、岡山大学のOBである藤原主任研究員、押目主任研究員がQSTでの研究紹介を行うとともに、BL11XUとBL22XUの見学を行いました。なかなか見学できないビームラインを見ることが研究の最前線を体感していただきました。（播磨地区）



8月は10件の施設見学があり、たくさんの方々にご来所いただきました。夏休みの課題で「量子」をテーマにしてきた高校生や、ニホニウムがきっかけで加速器に興味がある小学生等、科学に関心のある方の見学が増えてとてもうれしく思います。（木津地区）



今月の一言

ふおとん君グッズ好評配布中！
見学に来た方を中心に缶バッジをお配りしています。他グッズへの展開も計画しています。



関西光量子科学研究所

関西研だより



2024年9月号

発行日：2024年9月1日

発行元：関西光量子科学研究所
〒619-0215

京都府木津川市梅美台8丁目1番地7

Tel：0774-85-2914

Fax：050-3730-8563

関西研ホームページ <https://www.qst.go.jp/site/kansai/>

関西研YouTube https://www.youtube.com/channel/UCGQohC8igUdeiLFTx_1KhtA

関西研X https://twitter.com/kpsi_kizu