

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 光・電子融合第一原理計算ソフトウェアの開発と応用
2. 研究代表者名及び主たる共同研究者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

矢花 一浩（筑波大学計算科学研究センター 教授）

主たる共同研究者

信定 克幸（分子科学研究所 准教授）

飯田 健二（分子科学研究所 助教）

乙部 智二（量子科学技術研究開発機構関西光科学研究所 主幹任研究員）

### 3. 事後評価結果

○評点（2021年度事後評価時）：

A+ 非常に優れている
-------------

○総合評価コメント：

（以下、2021年度課題事後評価時のコメント）

本課題は光と電子が密接に結合する多体系において原子スケールから記述した第一原理計算に基づくプログラムSALMONの開発・公開し、先端の光科学技術の発展に寄与する国際標準ソフトウェアと認知を得ることを目標とした意欲的なプロジェクトである。

原子層物質に特徴的な非線形光応答の解明や、超短パルスレーザーと物質の相互作用における原子運動効果の解明などの高い学術的成果を上げる一方、SALMONの公開セミナーを積極的に開催するなど研究チームとして地道な努力を続けた。その結果、SALMONのウェブサイトのページビューやダウンロード数は着実に伸び、SALMON開発者以外の海外含めたユーザー利用による論文も出版されるなど、先端のナノ光学や超高速現象の解明に有用なソフトウェアとして国際的に高く認知されつつあると判断できる。特許出願件数は少ないものの、ソフトウェア自体の著作権を確保するなどの取り組みは妥当である。

最先端ソフトウェアとしての地位を維持するためには、新たな機能追加とメンテナンスが必要になるが、そのための若手研究者育成も充分成されており今後の展開を期待したい。

（2022年12月追記）

第一原理計算で光伝搬を記述する世界で唯一のオープンソフトウェアを開発し、国内外で高い評価を得るに至り、20年以上の歴史のある同種のソフトウェア OCTOPUS と並ぶ認知を得つつある。本研究領域では異色のテーマではあったが、100%目標を達成し期待に違わぬ活躍であった。追加支援では、スピン軌道相互作用も計算できるプログラムに進化させて、トポロジカル絶縁体  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  の光応答の計算に成功し目標を達成した。よって追加支援については「A 優れている」と判断する。

長期にわたり安定して SALMON の開発を進める仕組み作りのため、開発の中心を徐々に関西光科学研究所に移し長期的な開発体制を構築した。また 8 機関の参加を得て SALMON 開発者会議を定期的に開催し裾野の拡大に尽力した。

海外から数名の研究者を長期間受け入れるとともに、SALMON を用いた国際的な共同研究でも成果をあげた。