

## 伝統的イオン衝突シミュレーションプログラムの改善手法の検討

### Study on gradual improvement of historic simulation programs for ion beam physics

京都大学 ○青木 学聡

Kyoto Univ., °Takaaki AOKI

E-mail: aoki.takaaki.6v@kyoto-u.ac.jp

SRIM や MARLOWE 代表されるモンテカルロ法、二体衝突モデルに基づくイオン衝突シミュレーションソフトウェアは、登場から数十年が過ぎ、広く利用されるようになった。その一方、この期間のコンピューティング環境の変化に対し、ソフトウェアが追従できない問題が明らかとなってきた。この問題は、ソフトウェアの実行環境、ソフトウェアを記述するプログラミング言語、入出力のためのユーザーインターフェース、機械的なデータ交換のためのフォーマット等、多様な内容を含む。これまで、これらのソフトウェアによるデータ出力が実験結果との対比により多数残されており、またユーザー教育の知見から、既存のソフトウェアの破壊的な変更ではなく、漸進的な進化を継続的に進める必要がある。

発表者らはこれまでに、MARLOWE の入力パラメータファイルを編集する GUI や出力データ整形を行うツール群を開発し、利用環境の改善を実施してきた[3, 4]。また開発の途上で得られた知見を SRIM での入出力の改善にも転用する[5]等、種々のイオン衝突シミュレーションの UI、データ形式の共通基盤化の検討を進めている。本発表では、これらの取り組みの経緯と今後の展望について報告する。

[1] SRIM - The Stopping and Range of Ions in Matter, <http://srim.org>

[2] MARLOWE 15b, Computer Simulation of Atomic Collisions in Crystalline Solids, <http://www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/psr-0137/>

[3] 青木 学聡, 瀬木 利夫, 松尾 二郎, 「MARLOWE 二体衝突シミュレータのプリ・ポストプロセス」, 第 62 回応用物理学会春季学術講演会, 14a-C1-1 (2015/3/11-14).

[4] Marlowe User Interface (marlowe\_ui) [https://bitbucket.org/marlowe\\_ui/marlowe\\_ui](https://bitbucket.org/marlowe_ui/marlowe_ui)

[5] SUZU, <https://github.com/takaakiaoki/suzu>