

仕様書

I 一般仕様

1. 件名 SALMON への長さゲージ SBE と位相緩和項の導入

2. 目的

国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構（以下「QST」という。）が開発中の SALMON コードの半導体ブロッホ方程式(SBE)のゲージ依存性を改善し、より高度な計算を可能とする。SALMON は科学研究費助成事業 基盤 B「レーザー加工に於ける蓄積効果の大規模計算による解明」で利用している光・電子相互作用の第一原理計算を行うプログラムパッケージである。現在の SALMON の SBE は速度ゲージを利用しているため緩和などの効果を入れることができない、これをゲージ依存性がない長さゲージに変更し緩和を含めた一般的な電子励起過程に対応できるようにする。

3. 納期 令和 8 年 2 月 2 日

4. 納入場所

京都府木津川市梅美台 8-1-7

QST 関西光量子科学研究所 研究棟 2 階 B201

5. 業務内容（詳細は II. 技術仕様による。）

(1) 現状、SALMON に導入されている SBE(VG-SBE)とは別に、長さゲージ(LG)による SBE(LG-SBE)を導入し位相緩和を入れた計算を可能なモードを追加する。利用する式は論文（Physical Review Letters 131, 236902(2023)）を基本とする。計算手法などは別途示すノートを参照して行う。

(2) LG-SBE は SALMON のバルク計算モードで利用できるようにする。

(3) インプットパラメータを新たに設定し VG-SBE, LG-SBE を選択可能とする。

6. 提出図書 下記の書類を提出すること。

II 章で述べる動作確認を検証できるファイル及び作業報告書一式。

7. 検査条件

I 章 5 項及び II 章に示す作業完了後、I 章 6 項に定める提出書類等の納入、II 章 12 項に示す条件の合格をもって検査合格とする。

8. 支給品

(1) LG-SBE 実装のための計算手法ノート 1 式

(2) テスト計算用データ 1 式

9. グリーン購入法の推進

(1) 本契約において、グリーン購入法（国等による環境物品等の調達の推進等に関する法律）に適合する環境物品（事務用品、OA 機器等）が発生する場合は、これを採用するものとする。

(2) 本仕様で定める提出図書（納入印刷物）については、グリーン購入法の基本方針に定める「紙類」の基準を満たしたものであること。

10. その他

受注者は、本業務を実施することにより取得したデータ、技術情報、成果その他全ての資料及び情報を、発表もしくは公開することはできない。ただし、あらかじめ書面により QST の承認を受けた場合はこの限りではない。

II 技術仕様

1. 現在のインプットパラメータ `sbe,maxwell_sb` を `vg_sbe,maxwell_vg_sbe` と変更し、新たにインプットパラメータ `lg_sbe,maxwell_lg_sbe,t_2, am_s` を作成。`lg_sbe` ではバルクモード、`maxwell_lg_sbe` では LG-SBE を使ったマルチスケールモードを選択するパラメータである。`t_2` は LG-SBE で利用する位相緩和の時間であり正の実数とする。`t_2` の単位はインプットパラメータ (`unit_system`) で指定する単位系とする。`am_s` は II 章 7 項とノートで示す時間発展の精度を指定するパラメータであり、正の整数とする。
2. 計算は全て原子単位系とすること。
3. SALMON 内 (`src/ssbe/g_s_info_ssbe.f90`) で計算している遷移双極子 (`dnm:gs%d_matrix`) を利用する。新たなファイル構造によってはこの部分をコピーして利用して良い。
4. レーザーの電場方向ベクトルとの内積 d_{nm}^r を計算し、絶対値と位相成分に分ける。電場 E の絶対値が 0 で方向が不定となる場合は時間発展に d_{nm} が必要ないため、計算を行わないものとする。
5. バンドエネルギー及び密度行列 q_{nm} の K 微分を行う機能を追加する。このために以下の処理を行う
 - (1) 遷移双極子や密度行列の K 点は 1 次元の連続配列 `ik` で格納されているので、 (b_1, b_2, b_3) 成分と `ik` を関連付ける 3 次元配列に変換する。具体的な変換方法は `src/common/lattice.f90` を参照すること。
 - (2) 微分は逆格子ベクトル方向で行う。微分は周期境界条件を科した 4 点中心差分とする。
 - (3) 微分したものは行列 `src/ssbe/g_s_info_ssbe.f90/g_s%b_matrix` を用いて Cartesian coordinate (x, y, z 座標) に変換する。
6. 密度行列の時間微分の計算(ノート式(6)(7))を実装すること。
7. Adams-Moulton 法による時間発展機能(ノート式(30)(31))を実装。計算精度はインプットパラメータ `am_s` で指定する。
8. LG-SBE はバルクモード (`src/ssbe/realtime_ssbe.f90` 参照) に対応すること。
9. 電流密度を計算する。ノート式(11)(14)参照。
10. Shift vector (ノート式(30))は 0 が代入されるように設定すること。
11. 外部出力は現在のアウトプットフォーマットに準拠すること。

12. シリコンに対してバルクモードで VG-SBE 及び LG-SBE を用いて計算を行い比較し、報告書に含むこと。計算結果の比較は吸収エネルギー量での比較とする。この時のレーザーの偏光は直線偏光とし、偏光方向は反転対称性のある結晶方向と一致させること。このテスト計算に必要なデータ一式は QST が用意する。
13. 12.で検証する吸収エネルギー量の差が 10%以上の時は QST 側と共にコードレビューを行い、その結果を報告書に追記すること。

(要求者)

部課(室)名：量子応用光学研究部 超高速電子ダイナミクス研究プロジェクト

氏名：乙部 智仁