

# 逆行列対角化法による フォトリック結晶バンド計算プログラム

大阪大学大学院 基礎工学研究科 張 研究室

2003年9月11日

このテキストでは、逆行列対角化法を用いたフォトリックバンド計算プログラム `pbinvmx` の使用方法およびプログラムの構成について簡単にまとめてあります。詳細については順次改訂を行い追加する予定です。

## 1 動作環境

### 1.1 動作条件

本プログラムが動作させるためには、次の動作環境が必要です。

- FORTRAN77 に準拠したコンパイラがインストールされていること。
- 数値計算ライブラリ LAPACK, BLAS もしくはその互換数値計算ライブラリがインストールされていること。(LAPACK, BLAS は [netlib \(http://netlib.bell-labs.com/netlib/master/readme.html\)](http://netlib.bell-labs.com/netlib/master/readme.html) から入手可能です。)

### 1.2 動作確認環境

本プログラムは以下の環境で動作することが確認されています。

- DEC Digital UNIX V4.0D + Digital Fortran 77,(90) コンパイラ + LAPACK,BLAS ライブラリ。
- FreeBSD + Gnu Fortran77 コンパイラ + ATLAS ライブラリ。
- FreeBSD + Intel ifc コンパイラ + ATLAS ライブラリ。
- SuSe Linux + PGI Fortran pgf77 コンパイラ + ATLAS ライブラリ。
- SuSe Linux + Intel ifc コンパイラ + ATLAS ライブラリ。
- Solaris + Fujitsu Fortran compiler frt + BLAS,LAPACK ライブラリ。

### 1.3 著作権と免責事項

本プログラムの著作権および免責事項については `Copyright` というファイルに記してあります。プログラムを御使用になる前に必ずお読み下さい。

## 2 使用方法

### 2.1 配布ファイルの展開と実行

配布ファイルは pbinvmx\_XXX.tgz (XXX は version 番号) です。  
その配布ファイルの展開方法とコンパイル方法, 計算の実行方法, ITBL 並列計算機システムでの計算の確認, 取消の方法を以下に説明します。

1. アーカイブを計算を行いたいディレクトリで展開します。  
% gzip -dc pbinvmx\_XXX.tgz | tar xvf -
2. 展開して作成されたディレクトリ pbinvmx に 移動します。  
% cd pbinvmx
3. すべてのソースをコンパイルします。  
% make
4. バンド計算に必要なパラメタの計算を実行します。(今回の演習では省略可)  
% make detw
5. バンド計算を実行します。  
% make band  
入力ファイル   reci\_fcc.dat (逆格子ベクトルを収めたファイル)  
                  lpx\_fcc.dat (バンド計算を行う  $k$  点を収めたファイル)  
出力ファイル   band.dat (バンド計算結果出力ファイル)
6. 計算 JOB が投入されたことを確認します。(PBS only)  
% qstat -a -u \$USER
7. 投入されている JOB を停止します。(PBS only)  
% qdel "Job ID"       ("Job ID" は qstat で確認します.)
8. 計算ディレクトリ中の \*~, \*.o に該当するファイルをすべて消去します。  
% make clean
9. 計算ディレクトリを配布時の状態に戻します。  
% make vclean

NOTE: 上記 5,6 などの PBS (Portable Batch System) に固有な操作方法の詳細については, オンラインマニュアルを御覧ください。

## 2.2 配布ファイルの詳細

アーカイブには次のファイルが含まれています.

README :

Copyright : 著作権表示と免責事項の記述

Makefile : プログラムをコンパイル, 実行するための makefile

pbinvmx.f: バンド計算メインプログラム

入力ファイル reci\_fcc.dat (逆格子ベクトルを収めたファイル)

lpx\_fcc.dat (バンド計算を行う  $k$  点を収めたファイル)

出力ファイル band.dat (バンド計算結果出力ファイル)

new\_cp.f: 対角化する行列を作成するためのサブルーチン群

layer\_sq.f: layer-by-layer 構造のフォトニック結晶用サブルーチン群

n\_detw.f:

入力ファイル reci\_fcc.dat (逆格子ベクトルを収めたファイル)

出力ファイル lay\_w\_o1.xy (計算結果出力ファイル 1)

lay\_w\_sm.xy (計算結果出力ファイル 2)

qsub\_pbinvmx: pbinvmx プログラム実行のためのバッチスクリプト

qsub\_n\_detw: n\_detw プログラム実行のためのバッチスクリプト

band\_all.dat: lpx\_fcc.dat.org に含まれるすべての  $k$  点でバンド計算をした結果)

## 3 本実習で行うこと

まず, 上記の「配布ファイルの展開と実行」で説明した手順で, アーカイブを展開, プログラムのコンパイルを行って頂きます. 次にテスト計算を行います. 実際に計算 job の投入は行って頂きますが, 計算結果の最終確認などは別途各自で行って下さい. 本実習では各自が独りでこの計算プログラムを実行, 計算結果を得られるようにすることと, 別の構造で計算する場合にどのようにプログラムを拡張すれば良いかについて重点を置いて説明します.

## 4 計算するフォトニック結晶構造

本実習でモデルとしてしようするフォトニック結晶構造は, Figure 1 に示すような, 誘電体柱が交互に積層された, Layer-by-Layer 構造である. この構造は, 単位格子が fcc 構造であり, 構造パラメータは  $\epsilon = 3.6^2, c/a = 1.22$ , 誘電体の充填率  $\beta = 0.266$  とする. この構造でのバンド構造を Figure 2 に示す.

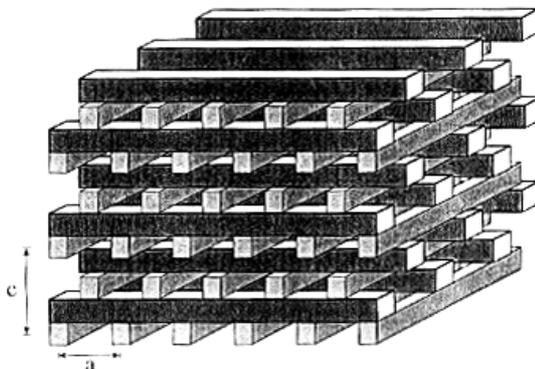


Figure 1: Layer-by-Layer 構造

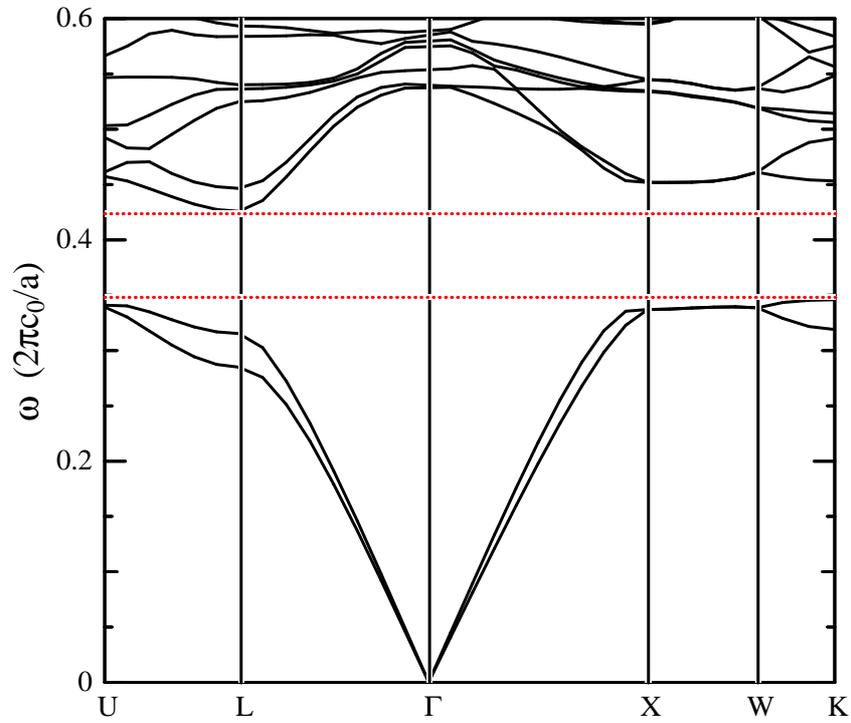


Figure 2: Layer-by-Layer 構造でのフォトニックバンド構造

## 5 その他の構造での計算方法

サブルーチン `ftdiel` がフォトニック結晶の構造に関連するサブルーチンで構造に応じた誘電率のフーリエ成分  $\epsilon(\mathbf{g})$  を生成します。このプログラムを置き換えることにより別構造のフォトニック結晶での計算が可能になります。以下に サブルーチン `ftdiel`(Layer-by-layer 構造の場合) のソースプログラムを示します。

```

*****Layer-by-layer photonic crystal *****
subroutine ftdiel(gsub,epua,epub,radc,egg)
integer gsub(3)
double precision epua,epub,radc
complex*16 egg
real*8 thez,thexi,theit,frait,siz,sixi,siit
double precision pi
intrinsic dsin,cexp
pi = 4.d0*atan(1.d0)

*----- Modify below for other structures -----
if (gsub(1).eq.0 .and. gsub(2).eq.0 .and. gsub(3).eq.0) then
  egg=cplx(epub+(epua-epub)*radc)
else
  thez=pi/4.d0*dble(gsub(3))
  thexi=pi/2.d0*dble(gsub(1)+gsub(2))
  theit=pi/2.d0*dble(-gsub(1)+gsub(2))
  if (gsub(3).eq.0) then
    siz=1.d0
  else
    siz=dsin(thez)/thez
  endif
  if ((gsub(1)+gsub(2)).eq.0) then
    fraxi=1.d0
    sixi=radc
  else
    fraxi=dsin(thexi)/thexi
    sixi=dsin(thexi*radc)/thexi
  endif
  if ((-gsub(1)+gsub(2)).eq.0) then
    frait=1.0d0
    siit=radc
  else
    frait=dsin(theit)/theit
    siit=dsin(theit*radc)/theit
  endif
  egg=cplx((epua-epub)/2.d0*siz)
  $      *(cexp(cplx(0.d0,thez))*cplx(frait*sixi)
  $      +cexp(cplx(0.d0,-thez))*cplx(fraxi*siit))
endif
*----- Modify above for other structures -----

return
end
*****

```

## 6 参考文献

南 貴之, 修士論文, 大阪大学 (2001).