

フォトニック結晶へ入射した光の エネルギー分岐比計算プログラム

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、フォトニック結晶へ入射した光のエネルギー分岐比計算プログラム `b-ratio` 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。

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。

- Digital UNIX T4.0D-3 + Digital Fortran 77,(90) コンパイラ.
- FreeBSD 4.8-STABLE + Gnu Fortran77 コンパイラ.
- FreeBSD 4.8-STABLE + Intel ifc コンパイラ.
- SuSe Linux 7.1 + PGI Fortran pgf77 コンパイラ.
- SuSe Linux 7.1 + Intel ifc コンパイラ.
- Solaris + Fujitsu Fortran compiler frt (ITBL マシン).

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 b-ratio_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 b-ratio_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 b-ratio
3. すべてのソースをコンパイルします。
% make
4. 分岐比計算を実行します。
% make go
5. 計算 JOB が投入されたことを確認します.(PBS only)
% qstat -a -u \$USER
6. 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.)
7. 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
8. 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

b-ratio.f: 分岐比計算メインプログラム

入力ファイル reci_2ds.dat (逆格子ベクトルを収めたファイル)

出力ファイル results/ref_b?p.dat (端面 B?, p 偏向の反射率)

results/ref_b?s.dat (端面 B?, p 偏向の反射率)

results/ref_b?_poy.dat (反射波のポインティングベクトル)

results/tra_b?_poy.dat (透過波のポインティングベクトル)

results/ref_b?_sp.dat (分散関係、反射係数の2乗)

results/tra_b?_sp.dat (分散関係、透過係数の2乗)

tm_main.f: 転送行列作成サブルーチン

sqrod_b?f: フォトニック結晶の境界面を B? とする構造のサブルーチン群。(Fig. 3 参照)

squarerod3w.f: フォトニック結晶の構造を決めるサブルーチン (sqrod_b?f へのシンボリックリンク)

mkdata.f: 計算結果処理プログラム

入力ファイル results/tra_b?_poy.dat (透過波のポインティングベクトル)

results/tra_b?_sp.dat (分散関係、透過係数の2乗)

出力ファイル b_b?.0N.xy (端面 B?, N 番目のバンドの分散関係)

t_b?s0N.xy (端面 B?, N 番目のバンドの s 偏光の透過率)

t_b?p0N.xy (端面 B?, N 番目のバンドの p 偏光の透過率)

k_b?.0N.xy (端面 B?, N 番目のバンドの伝搬角)

qsub_b-ratio: pbinvmx プログラムを PBS で実行のためのバッチスクリプト

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、図 1 に示すような、誘電体の柱が格子上に組合わさった Intersecting Square-Rod 構造である。これは図 2 で示す単位格子をもつ、単純立方格子である。今回は $\epsilon_a = 1, \epsilon_b = 13, s/d = 0.73$ として計算を行う。

Figure 4 は、バンドの低周波数領域において、 $k_{||} = (0, 0.1)$ の波数成分をもつ S 偏光、P 偏光の平面波が入射した場合の透過率、反射率を示している。(a) はバンドの拡大図、(b) は S 偏光の入射に対する各バンドへの分岐比、(c) は P 偏光の入射に対する分岐比で、(d)(e) はそれぞれ S 偏光、P 偏光に対する反射率である。



Figure 1: Intersecting Square-Rod 構造 ($3 \times 3 \times 3$)

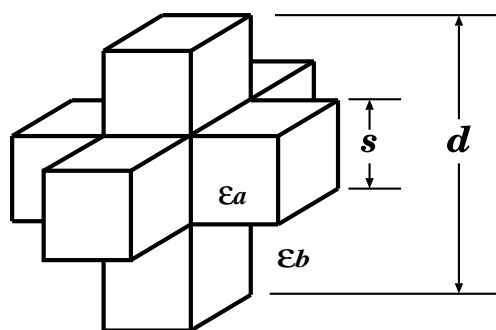


Figure 2: Intersecting Square-Rod 構造の単位格子

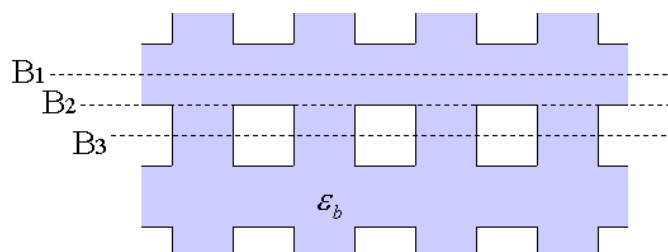


Figure 3: フォトニック結晶の境界面

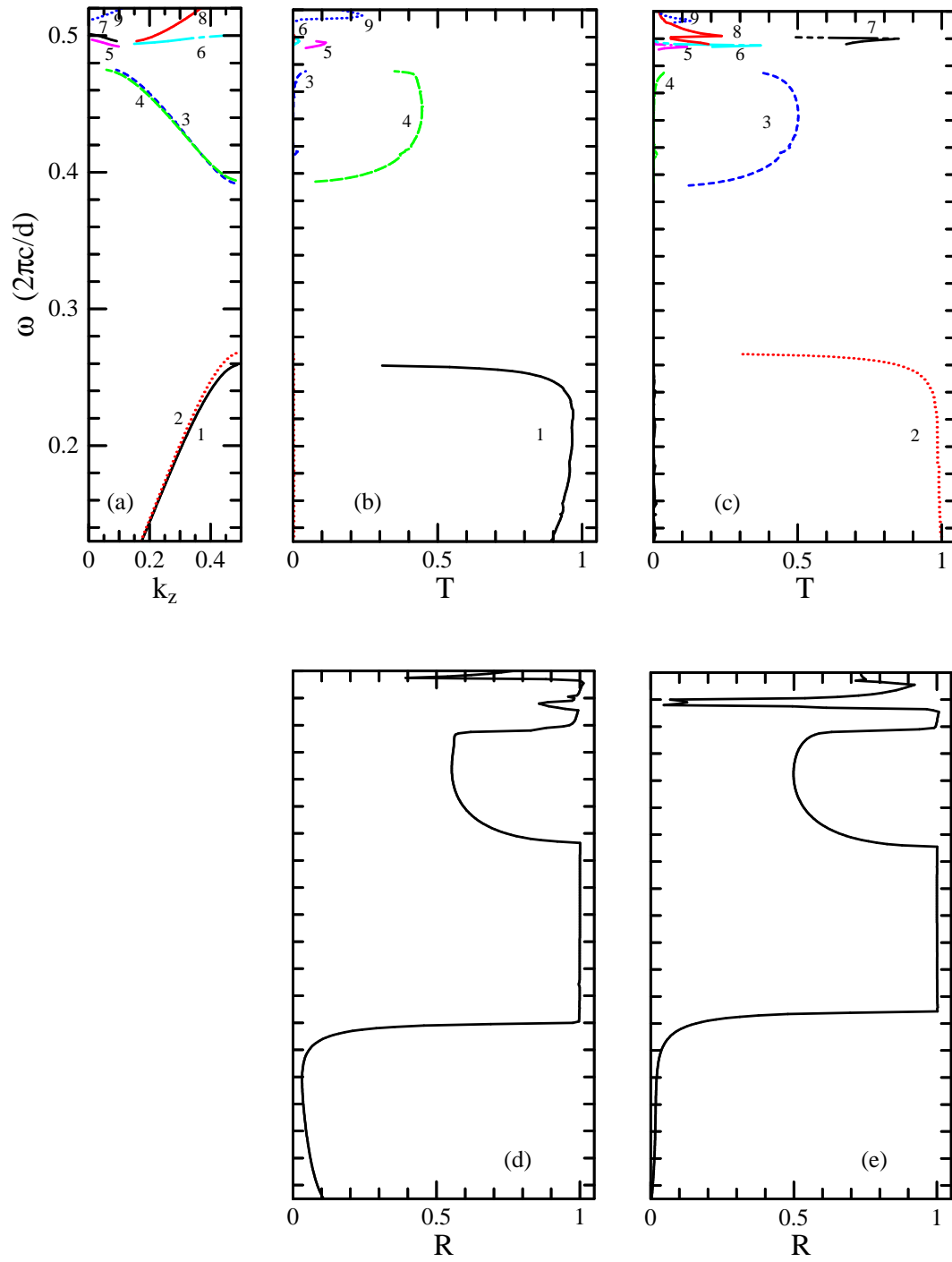


Figure 4: 低周波数領域での分岐比:(a) バンドの拡大図、(b)S 偏光に対する分岐比、(c)P 偏光に対する分岐比、(d)(e)S 偏光、P 偏光に対する反射率

5 その他の構造で計算する方法

サブルーチン `d_func` がフォトニック結晶の構造に関連するサブルーチンで、与えられた座標に対して、その点での誘電率を返します。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 `d_func`(Intersecting Square-Rod 構造) のソースプログラムを示します。

```
subroutine d_func(x,y,z,kotae)

real*8 x,y,z,kotae
real*8 epa,epb,ss,s2
parameter (epa=1.0d0,epb=13.0d0,ss=0.73d0)
s2=ss/2.d0

if (((abs(x) .lt. s2) .and. (abs(y) .lt. s2)) .or.
$ ((abs(y) .lt. s2) .and. (abs(z) .lt. s2)) .or.
$ ((abs(z) .lt. s2) .and. (abs(x) .lt. s2))) then
    kotae=epa
else
    kotae=epb
endif

end
```

6 参考文献

南 貴之, 修士論文, 大阪大学 (2001).