

# 金属介质在时域有限差分中的几种处理方法<sup>\*</sup>

杨光杰 孔凡敏<sup>†</sup> 李 康 梅良模

(山东大学信息科学与工程学院, 济南 250100)

(2006 年 12 月 5 日收到, 2007 年 2 月 9 日收到修改稿)

金属在“超颖物质”中有重要应用,分析和仿真金属介质很有意义.对比了时域有限差分(FDTD)中金属介质的三种计算方法:ADE(Auxiliary Differential Equation), PLRC(Piecewise Linear Recursive Convolution)和 Sakoda 提出的方法.通过数值验证,发现 ADE 和 PLRC 的数值结果完全相同. Sakoda 的方法在计算卷积时采用台阶近似,有一定误差.改进 Sakoda 方法的卷积计算后,结果与其他两种方法完全相同.

关键词:超颖物质,金属,FDTD,ADE,PLRC

PACC:8140T,7865E,7110

## 1. 引 言

科学发展的今天,人们已经不满足于研究和利用自然存在的各种物质,创造一种新的结构,使其具有全新的物质特性,成为了科学研究的新目标.这种物质被称为“超颖物质”(metamaterials).金属在“超颖物质”中扮演了重要角色.早在 1968 年, Veslago 提出了负折射率材料的概念<sup>[1]</sup>,其介电常数和磁导率同时为负值.由于没有得到实验验证,处于理论研究阶段.1996 年, Pendry 提出金属光子晶体作为一种新型材料,可以把等离子体频率降低到微波频段<sup>[2]</sup>,又在 1999 年,用开口金属环构造了磁性物质,其磁导率在一定条件下可以为负值<sup>[3]</sup>.又因为金属的介电常数在低于等离子体频率时为负值,两者结合,构成了负折射的基础.从而引导了“超颖物质”研究的新潮流.2000 年, Pendry 提出负折射材料可以放大消逝波,所以可以做成完美透镜,从而突破衍射极限<sup>[4]</sup>.并用单层银纳米薄板实现此透镜.2001 年, Shelby 等用实验验证了用金属线和金属环构成的特殊结构的物质,具有负折射特性<sup>[5]</sup>.现在,金属光子晶体,负折射材料和超棱镜现象已成为研究的热点.出现了一些优秀的研究成果<sup>[6-10]</sup>.最近文献 [11, 12] 报道了“超颖物质”可用于隐形斗篷<sup>[11, 12]</sup>.

表面等离子体<sup>[13]</sup>是金属的另一个重要特性,

1998 年, Ebbesen 等人发现,在金属薄膜上的圆形小孔阵列对光有超强的透射作用<sup>[14]</sup>.后来又有了许多关于表面等离子体的性质与应用的研究.如金属光栅的透射<sup>[15]</sup>,表面等离子体与其他电磁模式的耦合<sup>[16]</sup>,通过金属表面结构的起伏实现对波束赋形<sup>[17]</sup>,基于表面等离子体的光波导<sup>[18]</sup>,由纳米金属线阵列实现亚波长成像<sup>[19]</sup>.

所以对金属材料的理论计算,有重要的意义.金属是一种色散介质,其介电常数是频率的函数.而 FDTD 能处理各种色散介质.下面我们分析 FDTD 中金属的几种计算方法.

## 2. 计算方法

在 FDTD<sup>[20]</sup>中,金属的计算方法有 ADE<sup>[21]</sup>, PLRC<sup>[22-24]</sup>和 Sakoda<sup>[25]</sup>采用的方法.我们将给出各种方法的计算公式,并通过实例对比各种方法的性能.

### 2.1. ADE(Auxiliary Differential Equation Method)

金属是一种色散介质,其介电常数是频率的函数,我们采用 Drude 模型

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega - j\gamma)}, \quad (1)$$

在没有外加电流的情况下,根据 Maxwell 旋度方程

<sup>\*</sup> 教育部科学技术重点项目(批准号:105101)和山东省自然科学基金(批准号:31170005200605)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: kongfm@shu.edu.cn

$$\nabla \times H = \frac{\partial D}{\partial t} = j\omega D \quad (2)$$

和本构关系

$$D(\omega) = \epsilon_0 \cdot \epsilon(\omega) \cdot E(\omega) + \frac{\epsilon_0 \omega_p^2}{j\omega\gamma - \omega^2} E(\omega), \quad (3)$$

所以,

$$\nabla \times H = \epsilon_0 j\omega E(\omega) + \frac{\epsilon_0 j\omega \cdot \omega_p^2}{j\omega\gamma - \omega^2} E(\omega). \quad (4)$$

引入辅助变量,令

$$J(\omega) = \frac{\epsilon_0 j\omega \cdot \omega_p^2}{j\omega\gamma - \omega^2} E(\omega), \quad (5)$$

则

$$\nabla \times H = \epsilon_0 j\omega E(\omega) + J(\omega). \quad (6)$$

转化为时域,

$$\nabla \times H = \epsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t} + J. \quad (7)$$

根据(5)式,

$$j\omega\gamma \cdot J(\omega) - \omega^2 J(\omega) = \epsilon_0 j\omega \cdot \omega_p^2 E(\omega), \quad (8)$$

并转化到时域,我们得到

$$J^{n+1} = K \cdot J^n + \beta \cdot (E^{n+1} + E^n), \quad (9)$$

其中

$$K = \frac{\left(1 - \frac{\gamma\Delta t}{2}\right)}{\left(1 + \frac{\gamma\Delta t}{2}\right)}, \quad \beta = \frac{\frac{\epsilon_0 \omega_p^2 \Delta t}{2}}{\left(1 + \frac{\gamma\Delta t}{2}\right)}. \quad (10)$$

作如下近似:

$$J^{n+\frac{1}{2}} = \frac{J^{n+1} + J^n}{2} = \frac{1+K}{2} \cdot J^n + \frac{\beta}{2} \cdot (E^{n+1} + E^n). \quad (11)$$

把(11)式代入(7)式得

$$E^{n+1} = \frac{(2\epsilon_0 - \beta\Delta t)}{(2\epsilon_0 + \beta\Delta t)} E^n + \frac{2\Delta t}{(2\epsilon_0 + \beta\Delta t)} \cdot \nabla \times H^{n+\frac{1}{2}} - \frac{(1+K)\Delta t}{(2\epsilon_0 + \beta\Delta t)} \cdot J^n. \quad (12)$$

这就是电场的迭代公式,磁场的迭代格式与普通介质相同.

## 2.2. PLRC (Piecewise Linear Recursive Convolution)

令

$$\phi(\omega) = \frac{\omega_p^2}{j\omega\gamma - \omega^2}, \quad (13)$$

变换到时域

$$\phi(t) = \frac{\omega_p^2}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) U(t), \quad (14)$$

根据傅里叶变换的性质,频域相乘对应于时域卷积

$$D(t) = \epsilon_0 E(t) + \epsilon_0 \int_{\tau=0}^t E(t-\tau) \phi(\tau) d\tau, \quad (15)$$

在每一个时间间隔内  $n\Delta t \rightarrow (n+1)\Delta t$ ,  $E$  的取值以斜线代替台阶

$$E(\tau) = E^n + \frac{E^{n+1} - E^n}{\Delta t} (\tau - n\Delta t), \quad (16)$$

写成反转时间的形式

$$E(n\Delta t - \tau) = E^{n-m} + \frac{E^{n-m-1} - E^{n-m}}{\Delta t} (\tau - m\Delta t). \quad (17)$$

代入(15)式得

$$D^n = \epsilon_0 E^n + \epsilon_0 \sum_{m=0}^{n-1} [E^{n-m} \chi^m + (E^{n-m-1} - E^{n-m}) \xi^m], \quad (18)$$

其中

$$\chi^m = \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \phi(\tau) d\tau, \quad \xi^m = \frac{1}{\Delta t} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} (\tau - m\Delta t) \phi(\tau) d\tau. \quad (19)$$

将(18)式代入 Maxwell 旋度方程

$$\nabla \times H = \frac{D^{n+1} - D^n}{\Delta t}, \quad (20)$$

化简得

$$E^{n+1} = \left( \frac{1 - \epsilon^0}{1 - \xi^0 + \chi^0} \right) E^n + \left( \frac{\Delta t / \epsilon_0}{1 - \xi^0 + \chi^0} \right) \nabla \times H^{n+\frac{1}{2}} + \left( \frac{1}{1 - \xi^0 + \chi^0} \right) \psi^n, \quad (21)$$

$\psi^n$  的计算通过下面的迭代公式:

$$\psi^n = (\Delta\chi^0 - \Delta\xi^0) E^n + \Delta\xi^0 E^{n-1} + e^{-\gamma\Delta t} \psi^{n-1}, \quad (22)$$

其中

$$\chi^0 = \frac{\omega_p^2 \Delta t}{\gamma} + \frac{\omega_p^2}{\gamma^2} \cdot (e^{-\gamma\Delta t} - 1), \quad (23)$$

$$\Delta\chi^0 = -\frac{\omega_p^2}{\gamma^2} \cdot (e^{-\gamma\Delta t} - 1)^2, \quad (24)$$

$$\xi^0 = \frac{\omega_p^2 \Delta t}{2\gamma} + \frac{\omega_p^2}{\gamma^3 \Delta t} \cdot [(1 + \gamma\Delta t) e^{-\gamma\Delta t} - 1], \quad (25)$$

$$\Delta\xi^0 = \frac{\omega_p^2}{\gamma^3 \Delta t} \cdot [(1 + \gamma\Delta t) e^{-\gamma\Delta t} - 1] [1 - e^{-\gamma\Delta t}]. \quad (26)$$

## 2.3. Sakoda 的方法

把(15)式两边对  $t$  求导得

$$\frac{1}{\epsilon_0} \frac{\partial D}{\partial t} = \frac{\partial E}{\partial t} + \omega_p^2 \int_{\tau=0}^t E(t-\tau) e^{-\gamma\tau} d\tau, \quad (27)$$

直接计算(27)式中的积分,令

$$I = \int_{\tau=0}^t E(t-\tau)e^{-\gamma\tau}d\tau = \int_{\tau=0}^{n\Delta t} E(n\Delta t-\tau)e^{-\gamma\tau}d\tau, \quad (28)$$

代入(27)式得

$$\frac{1}{\epsilon_0} \nabla \times H^{n+\frac{1}{2}} = \frac{E^{n+1} - E^n}{\Delta t} + \omega_p^2 \cdot I^{n+\frac{1}{2}}. \quad (29)$$

进一步推导得

$$E^{n+1} = \frac{1}{\alpha} E^n + \frac{\Delta t}{\alpha \epsilon_0} \nabla \times H^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\beta}{\alpha} I^n, \quad (30)$$

其中

$$\alpha = 1 + \frac{\omega_p^2 \Delta t^2}{2}, \beta = \frac{(1 + e^{-\gamma \Delta t}) \omega_p^2 \Delta t}{2}. \quad (31)$$

$I^n$  的计算通过下面的递推公式:

$$I^{n+1} = \Delta t E^{n+1} + e^{-\gamma \Delta t} I^n. \quad (32)$$

### 3. 数值性能分析

我们用上述的三种方法计算一维金属/介质光子晶体的透过率. 其结构图1所示,在SiO<sub>2</sub>衬底上生成5层Ag薄膜,单层厚度为12nm,4层MgF<sub>2</sub>薄膜,单层厚度为120nm. 计算中取 $\Delta s = 1\text{nm}$ ,  $\Delta t = \Delta s/2c$ .



图1 光子晶体的结构

计算结果如图2所示, ADE方法的结果与 PLRC的结果完全相同, Sakoda的方法与二者稍有不同,幅度低一点. 这是因为计算(28)的积分时采用台阶近似. 仿照 PLRC的方法计算积分(28), 得到改进的 Sakoda方法.

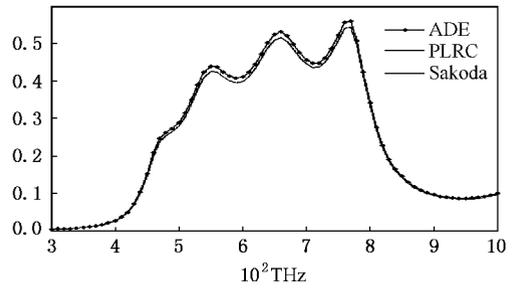


图2 三种方法计算的一维金属光子晶体的透过率

$$E^{n+1} = \frac{2 - \omega_p^2 \Delta t \xi^0}{2 + \omega_p^2 \Delta t (\chi^0 - \xi^0)} E^n + \frac{2\Delta t}{\epsilon_0} \frac{1}{2 + \omega_p^2 \Delta t (\chi^0 - \xi^0)} \nabla \times H^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\omega_p^2 \Delta t}{2 + \omega_p^2 \Delta t (\chi^0 - \xi^0)} S^n, \quad (33)$$

$$S^{n+1} = (\alpha - \beta) E^{n+1} + \beta E^n + e^{-\gamma \Delta t} S^n, \quad (34)$$

其中

$$\chi^0 = \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma \Delta t}), \quad (35)$$

$$\xi^0 = \frac{1}{\gamma^2 \Delta t} [1 - (1 + \gamma \Delta t) e^{-\gamma \Delta t}], \quad (36)$$

$$\alpha = \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-2\gamma \Delta t}), \quad (37)$$

$$\beta = \frac{1}{\gamma^2 \Delta t} [1 - (1 + \gamma \Delta t) e^{-\gamma \Delta t}] [1 + e^{-\gamma \Delta t}]. \quad (38)$$

改进后, 我们发现 Sakoda 的方法与 ADE 和 PLRC 的结果完全相同.

### 4. 结 论

ADE, PLRC 和改进的 Sakoda 方法的数值结果相同. 其中 ADE 方法的推导简单, 并且可以应用到其他色散介质, 如 Debye, Lorentz 介质, 还可以应用到非线性介质. 所以推荐使用.

[1] Veselago V G 1968 *Sov. Phys. Usp.* **10** 509  
 [2] Pendry J B, Holden A J, Stewart W J, Youngs I 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 4773  
 [3] Pendry J B, Holden A J, Robbins D J, Stewart W J 1999 *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques* **47** 2075

[4] Pendry J B 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 3966  
 [5] Shelby R A, Smith D R, Schultz S 2001 *Science* **292** 77  
 [6] Zhou P, You H Y, Wang S Y, Li H Y, Yang Y M, Chen L Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2276 (in Chinese) [周 鹏、游海洋、王松有、李合印、杨月梅、陈良尧 2006 *物理学报* **51** 2276]

- [ 7 ] Zhang X D 2004 *Phys. Rev. B* **70** 195110
- [ 8 ] Hu X H, Chan C T 2004 *App. Phys. Lett.* **85** 1520
- [ 9 ] Ao X Y, He S L 2005 *App. Phys. Lett.* **87** 101112
- [ 10 ] Lu Z G, Gong Y B, Wei Y Y, Wang W X 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3590 ( in Chinese ) [ 路志刚、宫玉彬、魏彦玉、王文祥 2006 物理学报 **55** 3590 ]
- [ 11 ] Leonhardt U 2006 *Science* **312** 1777
- [ 12 ] Pendry J B, Schurig D, Smith D R 2006 *Science* **312** 1780
- [ 13 ] Jia W L 2005 *Ph. D. Thesis* ( Fudan University ) ( in Chinese ) [ 贾武林 2005 博士论文 ( 复旦大学 ) ]
- [ 14 ] Ebbesen T W, Lezec H J, Ghaemi H F, Thio T, Wolff P A 1998 *Nature* **391** 667
- [ 15 ] Tan C L, Yi Y X, Wang G P 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1063 ( in Chinese ) [ 谈春雷、易永祥、汪国平 2002 物理学报 **51** 1063 ]
- [ 16 ] Zheng J J, Sun G 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2751 ( in Chinese ) [ 郑俊娟、孙刚 2005 物理学报 **54** 2751 ]
- [ 17 ] Martin-Moreno L, Garcia-Vidal F J, Lezec H J, Degiron A, Ebbesen T W 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 167401
- [ 18 ] Karalis A, Lidorikis E, Ibanescu M, Joannopoulos J D, Soljačić M 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 063901
- [ 19 ] Ono A, Kato J, Kawata S 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 267404
- [ 20 ] Ge D B, Yan Y B 2005 *Finite-Difference Time-Domain Method for Electromagnetic Waves* Second Edition ( Xidian University Press ) [ 葛德彪、闫玉波 2005 电磁波时域有限差分法 第二版 ( 西安电子科技大学出版社 ) ]
- [ 21 ] Okoniewski M, Mrozowski M, Stuchly M A, 1997 *IEEE Microwave and Guided Wave Letters* **7** 121
- [ 22 ] Kelley D F, Luebbers R J 1996 *IEEE Transactions on Antennas and Propagation* **44** 792
- [ 23 ] Liu S B, Gu C Q, Zhou J J, Yuan N C 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1283 ( in Chinese ) [ 刘少斌、顾长青、周建江、袁乃昌 2006 物理学报 **55** 1283 ]
- [ 24 ] Liu S B, Zhu C X, Yuan N C 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2804 ( in Chinese ) [ 刘少斌、朱传喜、袁乃昌 2005 物理学报 **54** 2804 ]
- [ 25 ] Sakoda K, Kawai N, Ito T 2001 *Phys. Rev. B* **64** 045116

## Several methods for dealing with metal in FDTD<sup>\*</sup>

Yang Guang-Jie Kong Fan-Min Li Kang Mei Liang-Mo

( School of Information Science & Engineering , Shandong University , Jinan 250100 , China )

( Received 5 December 2006 ; revised manuscript received 9 February 2007 )

### Abstract

There are important applications of metal in metamaterials. Three methods for dealing with metal in FDTD are analyzed and compared. ADE ( auxiliary differential equation method ) and PLRC ( piecewise linear recursive convolution ) have the same numerical result. However, there is a little difference between Sakoda's method and ADE. It is due to the error in calculation of convolution integral with Sakoda's method. Improving the convolution integral with the method used in PLRC, these three methods give the same results.

**Keywords** : metamaterials , metal , FDTD , ADE , PLRC

**PACC** : 8140T , 7865E , 7110

<sup>\*</sup> Project supported by the Foundation for Key Program of Ministry of Education , China ( Grant No. 105101 ) and the Natural Science Foundation of Shandong Province , China ( Grant No. 31170005200605 ).