

## 色散周期结构的辅助场时域有限差分法分析

鲁思龙<sup>1)</sup> 吴先良<sup>1)2)</sup> 任信钢<sup>1)</sup> 梅诣偲<sup>1)</sup> 沈晶<sup>1)2)</sup> 黄志祥<sup>1)†</sup>

1) (安徽大学, 计算智能与信号处理教育部重点实验室, 合肥 230039)

2) (合肥师范学院, 物理与电子工程系, 合肥 230061)

(2012年3月14日收到; 2012年4月1日收到修改稿)

利用辅助场时域有限差分 (FDTD) 方法分析色散周期结构的斜入射问题. 主要基于 Floquet 定理, 在 FDTD 迭代式中引入辅助场量, 结合变换的周期及吸收边界条件, 解决了周期结构斜入射问题的电磁特性仿真. 进一步将辅助场 FDTD 方法引入至色散周期结构的模拟, 结合 Z 变换方法, 给出了基于 Drude 色散模型的具体迭代公式. 数值计算结果表明所构建方法的有效性及其普适性.

**关键词:** 周期结构, 辅助场, Drude 模型, Z 变换

**PACS:** 47.11.Bc, 82.70.-y

## 1 引言

周期结构物体电磁特性的研究一直是电磁领域研究重要的课题. 近年来, 周期结构的应用获得较高的关注, 例如频率选择表面 (FSS)<sup>[1]</sup>, 光子晶体<sup>[2]</sup>, 开口环式谐振器 (SRRs)<sup>[3]</sup> 等. FDTD<sup>[4]</sup> 作为一种有效的电磁计算数值方法被广泛地应用于这些周期结构的计算中. 据 Floquet 定理, 无限长周期结构物体的特性能够通过在一个周期单元上设置周期边界来简化计算. 一些有效的 FDTD 方法被相继提出, 例如 Sin-Cosine<sup>[5]</sup> 方法、辅助场 FDTD 方法<sup>[4,6]</sup> 等.

色散周期结构<sup>[7,8]</sup> 由于其材料的特殊性质, 近年来成为研究的热点. 本文中, 我们采用辅助场 FDTD, 结合 Z 变换方法<sup>[9]</sup> 计算色散周期结构的电磁特性. 基于场变换, 引入新的变量  $P, Q$  对应电磁场  $E$  和  $H$ , 代入 FDTD 进行迭代计算, 同时, 对迭代公式进行适当修正, 以分裂场吸收层 (SPML)<sup>[10]</sup> 作为吸收边界. 文章第一部分给出辅助场 FDTD 方法计算 Drude 模型<sup>[11]</sup> 的基本理论. 第二部分, 我们给出三个算例, 与其他方法进行比

较, 验证了本方法计算的有效性和实用性.

## 2 理论和数值推导

## 2.1 辅助场 FDTD 的基本理论

基于 Floquet 定理, 周期结构的散射可以简化为一个周期单元的计算. 然而, 由于频域平面波的相位差转换到时域存在时间超前值问题, 传统 FDTD 方法无法解决周期结构中的斜入射问题. 因此, 据场变换理论, 采用了辅助场 FDTD 方法.

本文采用具有二维周期结构的三维模型进行分析研究. 模型中,  $x$  和  $y$  方向的周期分别为  $x_p$  和  $y_p$ ,  $z$  方向采用 SPML 吸收边界条件. 平面波入射在二维的周期结构上, 入射方向与  $z$  轴和  $x$  轴的夹角分别为  $\theta$  和  $\varphi$ . 平面波的电磁场形式如下:

$$\mathbf{E}(x, y, z, t) = \mathbf{E}_0(t) e^{j(k_x x + k_y y + k_z z)}, \quad (1)$$

$$\mathbf{H}(x, y, z, t) = \mathbf{H}_0(t) e^{j(k_x x + k_y y + k_z z)}, \quad (2)$$

其中,  $k_x = \frac{\omega}{c} \sin(\theta) \cos(\varphi)$ ,  $k_y = \frac{\omega}{c} \sin(\theta) \sin(\varphi)$ ,  $k_z = \frac{\omega}{c} \cos(\theta)$ ,  $k_0 = \frac{\omega}{c}$ ,  $c$  为自由空间的光速. 为简化起见, 定义  $\bar{k}_x = \sin(\theta) \cos(\varphi)$ ,  $\bar{k}_y =$

\* 国家自然科学基金重点项目 (批准号: 60931002, 61101064)、安徽省杰出青年基金 (批准号: 1108085J01) 和安徽省高校重点项目 (批准号: KJ2011A002, KJ2011A242) 资助的课题.

† E-mail: zxhuang@ahu.edu.cn

$\sin(\theta) \sin(\varphi)$ ,  $\bar{k}_z = \cos(\theta)$ .

依据 Floquet 定理, 定义新的变量组

$$\mathbf{P} = \mathbf{E} e^{-j(k_x x + k_y y)} / \eta_0, \quad (3)$$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{H} e^{-j(k_x x + k_y y)}, \quad (4)$$

其中  $\eta_0$  为真空中的波阻抗. 经变换后, 新的变量  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{Q}$  类似于垂直入射下的场量, 在进行 FDTD 迭代时, 周期边界的设置可以简化为

$$\mathbf{P}(x + x_p, y + y_p, z, t) = \mathbf{P}(x, y, z, t), \quad (5)$$

$$\mathbf{Q}(x + x_p, y + y_p, z, t) = \mathbf{Q}(x, y, z, t), \quad (6)$$

将 (3) 和 (4) 式的变换引入到 FDTD 的离散变换式中, 方程可以分成两个部分. 以  $P_z$  和  $Q_z$  为例:

$$\frac{\varepsilon_r}{c} \frac{\partial P_z}{\partial t} = \frac{\partial Q_y}{\partial x} - \frac{\partial Q_x}{\partial y} + jk_x Q_y - jk_y Q_x, \quad (7)$$

$$\frac{\mu_r}{c} \frac{\partial Q_z}{\partial t} = \frac{\partial P_x}{\partial y} - \frac{\partial P_y}{\partial x} + jk_y P_x - jk_x P_y, \quad (8)$$

此处, 采用场分裂的方法, 将上式分成两个部分, 引入分裂  $a$  变量场量  $P_a$  和  $Q_a$ :

$$\frac{\varepsilon_r}{c} \frac{\partial P_{za}}{\partial t} = \frac{\partial Q_y}{\partial x} - \frac{\partial Q_x}{\partial y}, \quad (9)$$

$$\frac{\mu_r}{c} \frac{\partial Q_{za}}{\partial t} = \frac{\partial P_x}{\partial y} - \frac{\partial P_y}{\partial x}, \quad (10)$$

由上式可见,  $P_{za}$  和  $Q_{za}$  的迭代形式对应电磁场垂直入射传统 FDTD 的迭代形式. 同理, 其他的  $P_a$  和  $Q_a$  分量也具有类似的公式.

进一步, 将  $a$  分量的计算代入 (7), (8) 式中, 最终可以得到总场的表达式

$$P_z = \left( \frac{\varepsilon_r}{\varepsilon_r - \beta} \right) \left[ P_{za} + \frac{\bar{k}_x}{\varepsilon_r} Q_{ya} - \frac{\bar{k}_y}{\varepsilon_r} Q_{xa} \right], \quad (11)$$

$$Q_z = \left( \frac{\varepsilon_r}{\varepsilon_r - \beta} \right) \left[ Q_{za} + \frac{\bar{k}_y}{\mu_r} P_{xa} - \frac{\bar{k}_x}{\mu_r} P_{ya} \right], \quad (12)$$

其中  $\beta = \frac{\bar{k}_x^2 + \bar{k}_y^2}{\mu_r}$ . 同理, 总场  $P_x$ ,  $P_y$ ,  $Q_x$  和  $Q_y$  可以以相同的形式得到.

计算出辅助场分量后, 只需根据 (3) 和 (4) 式进行逆傅里叶变换, 即可得到原电磁场  $\mathbf{E}$  和  $\mathbf{H}$  的值.

## 2.2 Drude 模型

介电常数的 Drude 模型表达式为

$$\varepsilon_r = \varepsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{j\omega\gamma_d + \omega^2}, \quad (13)$$

其中,  $\omega_p$  为等离子频率,  $\gamma_d$  为电碰撞系数.

由于介电常数与频率相关, 辅助场 FDTD 很难直接进行计算. 我们结合 Z 变换方法, 引入一组新

的变量, 其与辅助场  $\mathbf{P}, \mathbf{Q}$  的关系类似于电位移矢量  $\mathbf{D}$  与电场  $\mathbf{E}$  的关系. 定义变量  $M_{za}$  为

$$M_{za} = \varepsilon_r P_{za}, \quad (14)$$

将其代入 (9) 式, 可以得到

$$\frac{\partial M_{za}}{\partial t} = \frac{\partial Q_y}{\partial x} - \frac{\partial Q_x}{\partial y}, \quad (15)$$

$M_{za}$  可以通过 FDTD 迭代求解. 其与辅助场分量  $P_{za}$  的对应关系

$$M_{za} = \left( 1 - \frac{\omega_p^2}{j\omega\gamma_d + \omega^2} \right) P_{za}, \quad (16)$$

对上式进行 Z 变换:

$$\begin{aligned} M_{za}(z) = & P_{za}(z) + \frac{\omega_p^2 \Delta t}{\gamma_d} \\ & \times \left( \frac{(e^{\gamma_d \Delta t} - 1) z^{-1}}{1 - (1 + e^{\gamma_d \Delta t}) z^{-1} + e^{\gamma_d \Delta t} z^{-2}} \right) \\ & \times P_{za}(z), \end{aligned} \quad (17)$$

其中, 令

$$\begin{aligned} S_{za}(z) = & \frac{\omega_p^2 \Delta t}{\gamma_d} \left( \frac{(e^{\gamma_d \Delta t} - 1)}{1 - (1 + e^{\gamma_d \Delta t}) z^{-1} + e^{\gamma_d \Delta t} z^{-2}} \right) \\ & \times P_{za}(z), \end{aligned} \quad (18)$$

因此,  $P_{za}$  可以求解

$$P_{za} = M_{za} - z^{-1} S_{za}. \quad (19)$$

由 Z 变换的求解规则, 其中的  $z^{-n}$  中的上标“ $n$ ”代表前“ $n$ ”时刻的值, 据此可转换到时域迭代. 同理求解得出  $P_{ya}$  和  $P_{xa}$ .

据 (11) 式辅助场总场  $P_z$  可以表示为

$$\varepsilon_r P_z - \beta P_z = \varepsilon_r P_{za} + \bar{k}_x Q_{ya} - \bar{k}_y Q_{xa}. \quad (20)$$

令

$$M_z = \varepsilon_r P_z = \left( 1 - \frac{\omega_p^2}{j\omega\gamma_d + \omega^2} \right) P_z, \quad (21)$$

将 (14) 和 (21) 式代入 (20) 式, 得

$$M_z - \beta P_z = M_{za} + \bar{k}_x Q_{ya} - \bar{k}_y Q_{xa}. \quad (22)$$

类似  $S_{za}$  的引入, 通过引入变量  $S_z$ , 对 (21) 式进行 Z 变换, 可以得到

$$M_z(z) = P_z(z) + z^{-1} S_z(z). \quad (23)$$

将 (22) 式中的  $M_z$  替代为 (23) 式, 进而可以得到辅助场总场的表达式

$$P_z = \frac{1}{1 - \beta} (M_{za} - z^{-1} S_z + \bar{k}_x Q_{ya} - \bar{k}_y Q_{xa}). \quad (24)$$

同理, 辅助场总场  $Q_z, P_x$  等其他变量可以类似得到, 再利用辅助场 FDTD 方法求解, 从而得到电磁场  $E, H$  的值模拟色散周期结构的电磁特性.

### 3 数值算例

#### 3.1 频率选择表面 (FSS) 天线

首先, 用辅助场 FDTD 方法分析 FSS 的电磁特性, 用来验证本方法. 如图 1(a) 所示, 天线阵列排列在厚度  $h = 6 \text{ mm}$ , 介电常数为 2.2 的介质板上.  $x$  和  $y$  方向的周期长度为 15 mm.

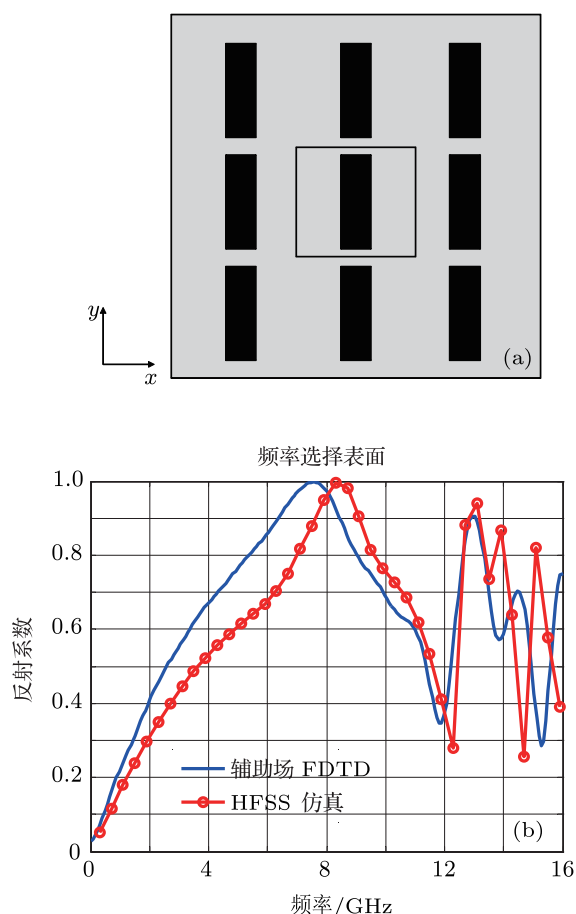


图 1 (a) FSS 的俯视图; (b) 平面波  $30^\circ$  入射时的反射系数

由图 1(b) 所示, 辅助场 FDTD 方法和 HFSS 的仿真结果基本符合, 从而验证了此方法有效性. 关于二者结果在高频处的差别, 经检查分析, 是由于 HFSS 软件本身精度所引起的.

#### 3.2 Drude 色散模型的验证

我们通过二维和三维结构的例子来进一步验证辅助场 FDTD 方法对色散周期结构计算的有效性. 贵金属银的 Drude 模型参数为:  $\omega_p = 1.37 \times 10^{16} \text{ rad/s}$ ,  $\gamma_d = 8.19 \times 10^{13} \text{ rad/s}$ .

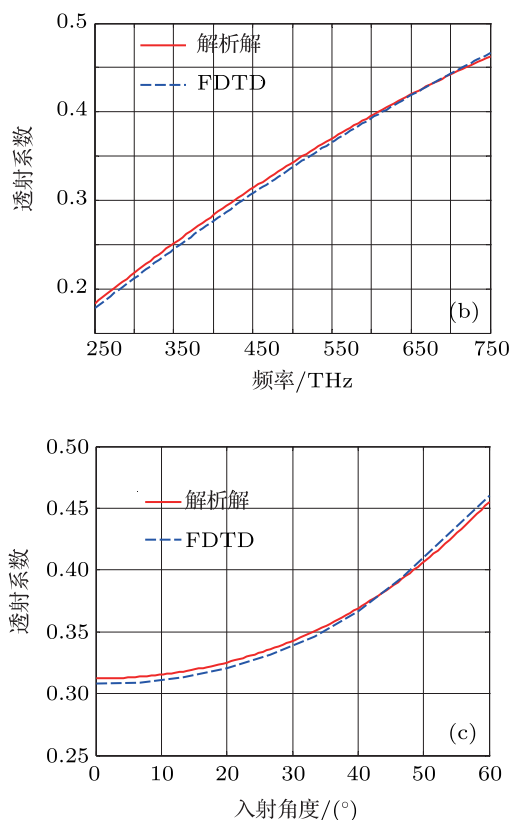
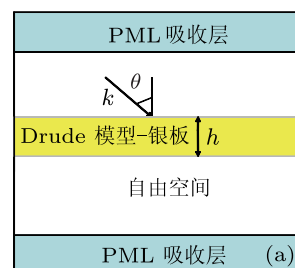


图 2 (a) 金属银板; (b)  $30^\circ$  入射时透射系数; (c) 不同角度入射时透射系数

如图 2(a) 所示, 二维结构中, Drude 模型的银板厚度  $h = 25 \text{ nm}$ , 以频率 250—750 THz 电磁波的入射. 图 2(b) 显示的结果是在入射角为  $30^\circ$  时银板透射系数的频带响应曲线. 图 2(c) 是在固定频率为 500 THz 时, 入射角度从  $0^\circ$  到  $60^\circ$  变化时的透射系数. 由计算结果可见, 我们的方法结果能与解析解很好地符合.

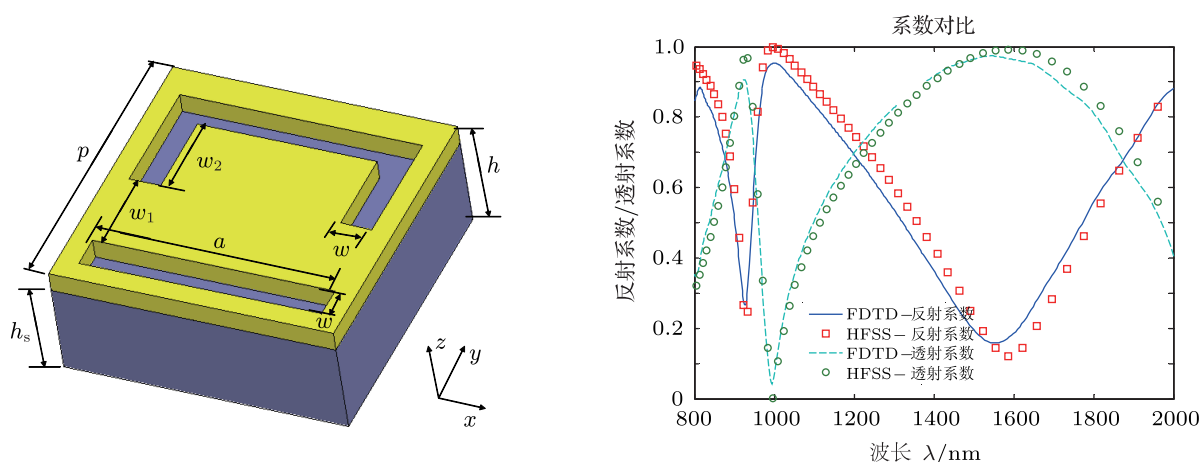


图3 (a) SRSs 结构图; (b) 垂直入射 SRSs 时对应散射参数

色散模型的第二个例子是具有实际应用的等离子体超材料结构: 三维的反对称开口环式缝隙 (SRSs) 结构<sup>[12]</sup>, 其在开关、传感器等方面有着广泛的应用. 具体结构如图 3(a) 所示.  $x, y$  方向的周期长度  $p = 540 \text{ nm}$ .  $z$  方向采用 SPML. 采用参数  $h = 220 \text{ nm}$ ,  $h_s = 180 \text{ nm}$ ,  $a = 460 \text{ nm}$ ,  $w_1 = 160 \text{ nm}$ ,  $w_2 = 160 \text{ nm}$ , 上层采用 Drude 模型, 参数与上例相同. 下层为介质基板, 介电常数  $\epsilon_r = 1.48$ .

散射参数 (反射及透射系数) 的计算结果如图 3(b) 所示, 我们的计算结果与 HFSS 的仿真结果基本吻合, 当然, 我们方法的时间和普适性优于 HFSS 软件仿真. 结果表明, 本文利用辅助场 FDTD 方法结合 Z 变换是一种有效的计算色散

周期结构的方法, 并具有实际应用价值.

## 4 结论

辅助场 FDTD 方法是一种可以计算周期结构斜入射问题并能得到宽频带特性的有效数值方法. 本文将进一步引入至色散周期结构的电磁散射参数提取之中. 通过与 Z 变换方法的结合, 我们给出了计算 Drude 模型的迭代公式. 数值结果与其他方法的比较表明, 本方法计算色散周期结构的具有可行性和有效性. 因此, 本方法可以进一步用以计算其他类型的色散结构, 为色散结构的设计提供技术支持.

- [1] Farahat N, Mittra R 2002 *IEEE Antennas and Propagation society International Symposium* **2** 568
- [2] Joannopoulos J D, Johnson S G, Winn J N Meade R D 2008 *Photonic crystals: Molding the flow of light* (2nd Ed.) (Princeton NJ: Princeton University Press)
- [3] Penciu R S, Aydin K, Kafesaki M, Koschny T, Ozbay E, Economou E N, Soukoulis C M 2008 *Opt. Express* **16** 18131
- [4] Taflov A, Hagness S C 2005 *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method* (3rd Ed.) (Artech House)
- [5] Harms P, Mittra R, Ko W 1994 *IEEE Trans. Antennas Propagate* **42** 1317

- [6] Roden A, Gedney S D 1998 *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques* **46** p420
- [7] Chu Y, Schonbrun E, Yang T, Crozier K B 2008 *App. Phys. Lett.* **93** 181108
- [8] Malynych S, Chumanov G 2003 *J. AM. Chem. Soc.* **125** 2896
- [9] Sullivan D M 1992 *IEEE Transactions on Antennas and Propagation* **40** 1223
- [10] Belkhir A, Baida F I 2008 *Phys. Rev. E* **77** 056701
- [11] Vial A, Grimault A S, Mac'ias D, Barchiesi D, Marc Lamy de la Chapelle 2005 *Phys. Rev. B* **71** 085416
- [12] Ren X G, Huang Z X, Wu X L, Lu S L, Wang H, Wu L, Li S 2012 *Computer Physics Communications* **183** 1192

# Study of periodic dispersive structures using splitfield FDTD method\*

Lu Si-Long<sup>1)</sup> Wu Xian-Liang<sup>1)2)</sup> Ren Xin-Gang<sup>1)</sup> Mei Yi-Cai<sup>1)</sup>  
Shen Jing<sup>1)2)</sup> Huang Zhi-Xiang<sup>1)†</sup>

1) (*Key Lab of Intelligent Computing & Signal Processing, Ministry of Education, Anhui University, Hefei 230039, China*)

2) (*Department of Physics and Electronic Engineering, Hefei Normal University, Hefei 230061, China*)

(Received 14 March 2012; revised manuscript received 1 April 2012)

## Abstract

The dispersive periodic structures are simulated by the split-field finite difference time domain (FDTD) method. According to the Floquet theorem, a set of auxiliary elements are introduced into the FDTD iteration to deal with electromagnetic simulation of oblique incidence on periodic structures, by combining the periodic and absorption boundary condition. We here extend the split-field method to the study of periodic dispersive structures by combining the Z transformation method. The iterative equations of the Drude dispersive model are also provided. By Comparing analytical and other numerical results, the efficiency and wide applicability of our method are demonstrated.

**Keywords:** periodic structure, split-field, Drude model, Z transform

**PACS:** 47.11.Bc, 82.70.-y

---

\* Project supported by the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60931002,61101064), the Fund for Distinguished Young Scholars of Anhui Province(Grant Nos.1108085J01), and the Key Program of the Higher Education Institutions of Anhui Province(Grant No. KJ2011A002, KJ2011A242).

† E-mail: zxhuang@ahu.edu.cn