

✧ 电子信息前沿技术丛书

翻译版

FDTD技术领域执牛耳者Taflowe教授之集大成巨著

**Advances in FDTD Computational Electrodynamics:
Photonics and Nanotechnology**

FDTD计算电动力学中的新进展

—— 光子学与纳米技术

[美] 艾伦·泰福勒 (Allen Taflove)

[美] 阿尔达凡·奥斯库奥依 (Ardavan Oskooi)

[美] 斯蒂芬·G. 约翰松 (Steven G. Johnson) 著

● 刘佳琪 张生俊 王明亮 薛 晖 艾 夏 莫锦军 译

● 余文华 张生俊 赵 雷 审 校

清华大学出版社



 电子信息前沿技术丛书

**Advances in FDTD Computational Electrodynamics:
Photonics and Nanotechnology**

FDTD计算电动力学中的新进展

——光子学与纳米技术

[美] 艾伦·泰福勒 (Allen Taflove)

[美] 阿尔达凡·奥斯库奥依 (Ardavan Oskooi)

[美] 斯蒂芬·G. 约翰松 (Steven G. Johnson) 著

● 刘佳琪 张生俊 王明亮 薛晖 艾夏 莫锦军 译



清华大学出版社
北京

Translation from the English Language Edition:

Advances in FDTD Computational Electrodynamics: Photonics and Nanotechnology, by Allen Taflove and
Ardavan Oskooi, Steven G. Johnson, ISBN: 978-1-60807-170-8.

Copyright © 2013 by Artech House. All rights reserved.

北京市版权局著作权合同登记号 图字: 01-2014-1852

本书封面贴有清华大学出版社防伪标签,无标签者不得销售。

版权所有,侵权必究。侵权举报电话: 010-62782989 13701121933

图书在版编目(CIP)数据

FDTD 计算电动力学中的新进展: 光子学与纳米技术/(美)艾伦·泰福勒(Allen Taflove), (美)阿尔
达凡·奥斯库奥依(Ardavan Oskooi), (美)斯蒂芬·G. 约翰松(Steven G. Johnson)著; 刘佳琪等译. —北
京: 清华大学出版社, 2019

(电子信息前沿技术丛书)

书名原文: Advances in FDTD Computational Electrodynamics: Photonics and Nanotechnology

ISBN 978-7-302-50796-3

I. ①F… II. ①艾… ②阿… ③斯… ④刘… III. ①电磁计算—研究 ②光子—研究 ③纳米技
术—研究 IV. ①TM15 ②O572.31 ③TB383

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2018)第 189154 号

责任编辑: 文 怡

封面设计: 台禹微

责任校对: 李建庄

责任印制: 沈 璐

出版发行: 清华大学出版社

网 址: <http://www.tup.com.cn>, <http://www.wqbook.com>

地 址: 北京清华大学学研大厦 A 座

邮 编: 100084

社 总 机: 010-62770175

邮 购: 010-62786544

投稿与读者服务: 010-62776969, c-service@tup.tsinghua.edu.cn

质量反馈: 010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn

课件下载: <http://www.tup.com.cn>, 010-62795954

印 装 者: 三河市铭诚印务有限公司

经 销: 全国新华书店

开 本: 185mm×260mm 印 张: 33.25

字 数: 802 千字

版 次: 2019 年 7 月第 1 版

印 次: 2019 年 7 月第 1 次印刷

定 价: 168.00 元

产品编号: 055256-01

作者简介

艾伦·泰福勒 (Allen Taflove)，美国西北大学全职教授，西北大学电气工程专业学士、硕士、博士。自 1972 年以来致力于发展 FDTD 基础理论、算法及应用。2010 年泰福勒教授的工作被 Nature Milestones|Photons 收录，称其为求解麦克斯韦方程组数值方法的两位主要先驱者之一。当前，泰福勒是世界上他引最高的技术类作者之一，他的三本安泰科 (Artech) 版图书《计算电动力学：时域有限差分法》的综合引用居工程史十大被引书籍之首，并且在物理学史上他引率最高书籍中排名第七。

阿尔达凡·奥斯库奥依 (Ardavan Oskooi)，日本京都大学博士后研究员，多伦多大学工程科学专业学士，麻省理工学院 (MIT) 计算设计与优化专业硕士，MIT 材料科学与工程专业博士。奥斯库奥依博士与约翰松教授领导了 Meep 软件的开发。Meep 软件是 MIT 开发的功能强大、免费、开源的麦克斯韦方程组求解器 (FDTD 软件包)。Meep 软件被超过 600 份杂志引用，下载量超过 54000 次。

斯蒂芬·G. 约翰松 (Steven G. Johnson)，麻省理工学院 (MIT) 应用数学与物理教授，MIT 物理学、数学及计算机科学学士，物理学博士。独立及共同发表 150 余篇论文，出版一本 2008 版教科书，授权 27 项专利。约翰松教授的研究成果主要集中在纳米光子学系统及光子晶体的设计及理解方面。他也因几款免费数值软件包而著名，包括 MPB 和 Meep 电磁建模仿真工具，以及快速傅里叶变换的 FFTW 软件包，他也因 FFTW 软件包获得 1999 年数值软件威尔金森 (Wilkinson) 奖。

译者简介

刘佳琪，北京航天长征飞行器研究所研究员，博士生导师，副总工程师，所长助理，试验物理与计算数学国家重点实验室常务副主任，中国运载火箭技术研究院某技术中心总工程师，中国航天科技集团有限公司学术带头人、副总研究员，中国航天科技集团有限公司第一研究院首席专家。研究方向包括飞行器总体设计、空间目标特征提取与识别技术、空间目标光电特征控制技术、空间先进电子技术以及空间信息对抗射频辐射式/注入式仿真技术等。中央军委装备发展部专业组专家，中央军委科技委主题专家组专家，战略支援部队专业组专家，火箭军专业组专家，国家自然科学基金委评审专家。作为项目负责人主持多项科研项目，其中包括原总装备部重大专项，国防重大实验设施研制，原总装备部专业组预研项目，探索一代重大项目，中央军委科技委前沿创新项目，国防基础科研重点项目，火箭军、战略支援部队预研课题，国家重点型号工程某分系统研制等。

张生俊，北京航天长征飞行器研究所研究员，高级专家，研究生导师。国际宇航联空间安全委员会委员，装备发展部某领域专业组专家，某重大基础项目专家组成员，中国复合材料学会超材料分会常务理事，中国空间法学会理事，中国宇航学会电推进委员会、空间电子学委员会委员，光学薄膜重点实验室兼职教授，西安电子科技大学兼职研究生导师。长期从事目标特征及控制，周期性结构电磁学，等离子体生成及与电磁波相互作用，频率选择表面、光子晶体设计及应用等研究，曾从事晶体生长、光电薄膜与器件等研究，担任多个国际会议专题召集人及主持人。主持国家自然科学基金面上项目2项，承担各类国家级预研及研究项目十余项。发表研究论文20余篇，授权专利20余项。

翻译版序言

时域有限差分方法作为计算电磁学的基础方法,已经在电磁科学研究和工程应用等许多方面取得了巨大的成就。在时域有限差分方法发展的半个世纪中,有重要贡献的学者包括 K. S. Yee, Allen Taflove, J. P. Berenger 以及 Stephen Gedney 等。在众多对时域有限差分方法有重要贡献的学者中,真正将时域有限差分方法发展成为应用工具的关键人物是美国西北大学的 Allen Taflove 教授。

除了对时域有限差分方法一系列原始的科学贡献外,Allen Taflove 教授的著名专著 *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method* (Artech House 出版社,1995)成为计算电磁学者学习时域有限差分方法的必备参考文献。《FDTD 计算电动力学中的新进展——光子学与纳米技术》一书是 Allen Taflove 教授的又一力作,并恰逢麦克斯韦方程组发表 150 周年之际出版,是计算电磁学界的一件大事和幸事。

该书是时域有限差分方法用于求解光子学和纳米问题的方法和应用总结。能够将该书翻译成中文,介绍给更多的中国学生和学者,将对计算电磁学的发展起到十分重要的作用。我非常感谢试验物理与计算数学国家重点实验室刘佳琪研究员和张生俊研究员组织将该书翻译成中文,能够让更多中国学者通过该书了解计算电磁学的最新进展。

Allen Taflove 教授是我十分尊重的知名学者,也是我多年的好朋友。我对在该书的翻译过程中 Allen Taflove 教授提供的热情帮助和支持表示衷心感谢。衷心希望该书能够对中国学者的计算电磁学研究 and 应用做出贡献。

余文华于江苏师范大学

江苏徐州

2019 年 4 月

译者的话

把一种语言翻译成另一种语言,本身就是一项浩大的工程,特别是将一本由多位不同风格的作者编写、针对浪尖级革命性技术的巨著翻译成中文,更是如此。我们怀着敬畏和认真学习之心,倾以所能及之力,历经两年多时间,经过无数个夜灯下的苦熬,终于全部完成本书的翻译及多轮的校核,就像怀胎十月的母亲终于要听到婴儿的哭声一样,充满期待和忐忑。

本书作者 Taflove 教授从事 FDTD 研究几十年,出版了第一本 FDTD 专著,多年来一直致力于 FDTD 技术发展的研究和教育推广,他的 FDTD 教材已经是全世界都在使用的经典教科书。本书是作者对于 FDTD 技术在新兴技术领域研究与应用的集大成和经验总结,希望中文版能像其英文版一样,对所有学习 FDTD 技术及开展光子学、纳米技术等领域仿真研究的学生、学者们有所帮助。

感谢所有参与翻译的译者们,也感谢我们的家属,这本书是利用我们 8 小时以外的时间翻译出来的,他们为此做出了巨大的奉献。本书以试验物理与计算数学重点实验室为主翻译,主要翻译人员有刘佳琪、张生俊、王明亮、薛晖、艾夏、莫锦军;其中,王明亮翻译第 1~5 章,莫锦军翻译第 6~10 章,张生俊、薛晖翻译第 11~15 章及序言,刘佳琪、陈姝媛、艾夏翻译第 16~20 章。全书由余文华教授、张生俊研究员、赵雷副教授审校,江苏轩途的张尧然博士校对了部分章节。感谢译者所在单位北京航天长征飞行器研究所、国防科技大学和北京系统工程研究所的大力支持,感谢江苏师范大学数学与统计学院研究生庞烁烁、张欣以及陈浩卿校对书中方程和插图,更感谢清华大学出版社的大力支持。

感谢原书作者 Taflove 教授,在本书初稿即将完成之际就为中文版写了饱含殷切希望的序。

书海浩瀚,付梓艰难,具诚恐之心,怀敬重之意,受时间之限,本书译本推迟至今方勉强交付,然,本书涉及学科广泛,限于时间和译者的学识和文字把握能力,书中不当之处期望读者斧正,以便我们改进提高。来信可发至 zhangsj98@sina.com,或联系清华大学出版社。

刘佳琪 张生俊

2016 年 1 月首稿

2019 年 4 月终稿

中文版序

《FDTD 计算电动力学中的新进展——光子学与纳米技术》中文版出版工作始于 2015 年,恰逢麦克斯韦方程组发表 150 周年。2015 年是重要的一年,也是我在 FDTD 方面最早的两篇论文发表 40 周年之际。

现在,全世界的研究者们都同意,FDTD 比其他任何求解方法(不管是解析方法还是数值计算方法)更多揭示了麦克斯韦方程组的伟大力量和庞大的范围。

随着我们进入这样一个时代,在能得到的超级计算机上,FDTD 可以处理单个模型中超过 10^{12} 个场矢量分量,在跨越从近直流到可见光的电磁波频谱范围解决绝对庞大尺度的问题已经不是难题。

在光谱的光学部分(本书的范畴),这种兆级三维 FDTD 模拟正促进光子学和纳米技术的进展,这将在人类通信和计算能力的革命化,了解基本生命过程,以及诊断和治疗诸如癌症这种令人恐惧的疾病方面具有应用潜力。

这里我谨代表我的共同作者——Ardavan Oskooi 博士和 Steven G. Johnson,进一步感谢刘佳琪博士和张生俊博士,他们组织了中文版的翻译;感谢余文华博士和赵雷博士,他们对全书翻译的准确性和协调性进行了仔细的核对;也感谢 Artech House 出版社和清华大学出版社,他们对这件事给予了极大的支持。

我们热切欢迎来自全中国的大学与企业单位的广大读者,也希望你们在 FDTD 计算电磁学的应用和推进中取得巨大成功!

Allen Taflove,西北大学

美国伊利诺伊州埃文斯顿

2015 年 1 月

光子学与纳米技术的进展可能带来人类在通信能力、理解基本生命过程的计算能力以及对恐怖的疾病(如癌症)的诊断和治疗能力方面的变革。对于追求这些进展而言,关键是理解并建立光与纳米尺度、三维(3D)材料结构相互作用的合适模型。这类结构的重要几何特征和材料非均匀性可能小到几十个原子的排列。当前,已经确认对这种纳米结构与光相互作用最有效的计算模拟方法是基于经典电动力学基本麦克斯韦方程组的数值求解,视需要辅以与量子电动力学(更基础,但计算起来更麻烦)的空间局域化混杂。

本书针对工作在光子学和纳米技术所有领域的学术和工业界研究人员,对光与纳米尺度材料结构相互作用的计算表述和实施的当前现状进行了综述。对于采用时域有限差分(FDTD)技术求解麦克斯韦方程组而言,过去40年来主要由作者之一(Taflove)^①在电气工程领域开展了研究工作,过去12年来主要由我们中的两个作者(Oskooi和Johnson)^②在物理学领域中开展了研究。

在一个层面上,本书对Artech出版社于2005年出版的Taflove和Hagness的《计算电动力学——时域有限差分方法》(第三版)^③中所讨论的FDTD技术进行了更新(总体应用方面)(假定本书的读者熟悉麦克斯韦方程组的FDTD求解基础,如书中所表述)。在另一个层面上,本书给出了新近FDTD技术大范围的进展综述,旨在求解光子学与纳米技术中大家高度感兴趣的特定电流问题。

本书第1~7章展现了模拟通用电磁波相互作用的FDTD和时域伪谱(PSTD)算法新近的重要进展。各章概要简述如下。

第1章“三维交错网格局域傅里叶基PSTD并行处理技术”,由M. Ding和K. Chen撰写。本章讨论了一种新的在电大尺寸、开域、三维空间有效求解全矢量麦克斯韦方程组的交错网格、局域傅里叶基PSTD技术。与早先的并列网格PSTD方法相比,这种新的PSTD

① 参见在线文章, <http://www.nature.com/milestones/miklephotons/full/miklephotons02.html>, 该文中,“自然里程碑|光子学”将Toflove教授引证为求解麦克斯韦方程组数值方法的两大主要先驱之一。

② Oskooi博士和Johnson教授在麻省理工学院(MIT)领导开发了一套功能强大、免费、开源的FDTD麦克斯韦方程组求解器软件工具——Meep(MIT电磁方程组传播的缩写),该软件可从<http://ab-initio.mit.edu/meep>网站下载。已经有超过600篇出版的期刊文章引用了Meep,下载量超过54000次。

③ 根据罗彻斯特大学光学学院的研究,截至2012年9月,《计算电动力学——时域有限差分方法》三个版本(1995, 2000, 2005)的总引用率居Google scholar[®]引用率最高的物理学书籍的第7位。参见: http://www.optics.rochester.edu/news-events/news/google_scholar.html。

表述随计算域的尺寸增大更加有效,而且更为重要的是,避免了 Gibbs 现象伪影。这使得具有高对比度材料界面的介质结构的精确 PSTD 模拟成为可能。文中展现了完整的算法,包括针对单轴完美匹配层(UPML)吸收边界条件(ABC)的实现。

第2章“基于拉盖尔多项式的无条件稳定 FDTD 方法”,由 B. Chen, Y. Duan 和 H. Chen 撰写。本章讨论了一种实现基于 3D 拉盖尔多项式的无条件稳定 FDTD 技术和有效 PML ABC 的高效算法。与传统拉盖尔基 FDTD 方法相比(这些传统方法要求求解庞大的稀疏矩阵),这种新的技术能够在一个完整的更新周期里仅要求求解 6 个三对角矩阵和 3 个显式方程。这就提供了优异的计算精度,比交替方向隐式 FDTD 方法好得多,并可以在计算机集群上高效并行处理。

第3章“精确总场/散射场平面波源条件”,由 T. Tan 和 M. Potter 撰写。本章讨论了一种适合于任意传播角度和极化角、稳定因子以及不同纵横比的高效精确总场/散射场平面波源。该技术使得入射平面波以零泄漏进入到散射场区,直到机器精度水平。与主要的 3D 网格要求相比,增加的计算机内存和执行时间本质上可以忽略不计。

第4章“电磁波源条件”,由 A. Oskooi 和 S. G. Johnson 撰写。本章给出了电流源与 FDTD 仿真中最终电磁波之间关系的专题讨论。所展现的技术适用于大范围的模拟应用,从确定性辐射、散射和导波问题到与热和量子起伏相互作用的纳米尺度材料结构。本章由讨论入射场和等效电流开始,考核等效原理和 FDTD 模型中的等效电流的离散和色散。随后是对分离入射与散射场的方法的综述,不论是散射体、波导还是在周期结构环境。另一个主题是电流源与所产生的局域态密度的关系。这里,关键内容包括麦克斯韦方程本征问题和态密度、辐射功率和谐振模式、辐射功率和局域态密度、FDTD 中局域态密度的计算、局域态密度中的凡霍夫(Van Hove)奇异性,以及其谐振腔和珀塞尔(Purcell)增强。随后的主题包括对于入射到周期表面上的波能够以少量仿真覆盖宽范围频率和入射角的波源技术;在周期系统矩形超级元胞中高效激励本征模的源;能够模拟切伦科夫(Cherenkov)辐射和多普勒频移辐射的移动源;通过蒙特卡罗—朗之万(Langevin)方法能够模拟近场中复杂形状材料物体间辐射热传输的热源。

第5章“严格 PML 验证和用于各向异性色散媒质的修正不分裂 PML”,由 A. Oskooi 和 S. G. Johnson 撰写。本章讨论了一种直截了当的技术来验证任何提出的 PML 公式的正确性,而没有考虑其实现。已经发现,已出版的几种声称用于各向异性媒质、周期媒质以及斜波导的 PML 仅仅是绝热伪 PML 吸收体的实例而已。本章还讨论了用于各向异性色散媒质的一种高效、修正、不分裂的 PML 公式,包括典型 UPML 建议的简单重构(refactorization)。本章附录给出了 PML 复数坐标延展基的专题讨论,以及将耦合模式理论应用到光子晶体 FDTD 模拟时有效绝热伪 PML 吸收体的分析和设计中。

第6章“基于亚像素平滑的不连续媒质精确 FDTD 仿真”,由 A. Oskooi 和 S. G. Johnson 撰写。本章讨论在笛卡儿 FDTD 网格中,在模拟无网格对齐(non-grid-aligned)各向同性和各向异性界面时,用于二阶精度的一种高效局域(亚像素)媒质平滑技术。该技术基于严格微扰理论(总结在本章附录中),而不是专门的试探(ad hoc heuristic)。该技术相对于早先的方法大大改善了精度,但并没有增加所需要的计算存储空间或运行时间。亚像素平滑还有一个额外的好处:它允许仿真中对几何形状的改变连续响应,如在优化或参数研究过程中会出现这种情况,而不是在媒质界面穿过像素边界时以不连续跳跃改变。此外,

这产生了随网格精度变化更加平缓的误差收敛,使得仿真精度评估更容易,并使得通过外插获得另一个量级的仿真精度成为可能。不像那些需要通过修正的场更新方程或更大的模板和复杂的取决于位置的差分方程来获得高阶精度的方法,亚像素平滑使用标准中心差分表达式,很容易通过简单的材料处理在 FDTD 中实现。

第 7 章“电磁场统计变化分析的随机 FDTD”,由 S. M. Smith 和 C. M. Furse 撰写。本章讨论一种新的随机 FDTD 技术。该技术提供了一种高效地评估由模型电特性的随机变量引起的电磁波相互作用数值仿真中的统计变量的方法。这些变量的统计直接并入到 FDTD 中,在这里计算了每个运行步下,空间和时间每一点上场的最终均值和方差估计。仅使用两次 S-FDTD 计算得到的场的方差就能够有效“支撑”使用暴力蒙特卡罗技术的结果,后者是在成百上千次运行之后得到的。这样,S-FDTD 技术具有节省计算时间的巨大潜力,并开启了在生物电磁学、生物光子学以及地球物理学应用中评估统计参数的可能性,这些领域中材料电气特性具有不确定性或可变性。

第 8~20 章给出了近年来旨在求解光子学和纳米技术中大家高度感兴趣的特殊电流问题的 FDTD 技术广泛的综述。按出现顺序,主题包括:

(1) 等离激元学(着重与量子力学的混合模型),包括有源等离激元学、非局域电动力学以及紧束缚于邻近金属纳米结构的染料分子的光学性质的修正。

(2) 变换电磁学,包括非对角各向异性超材料斗篷。

(3) 超材料,包括由非矩形等离激元组分组成的周期性亚波长光学结构。

(4) 显微镜及纳米尺度光刻的计算光学成像的广泛指导。

(5) 生物光子学应用,包括细胞内结构的成像/表征和对早期癌症纳米尺度上细胞内异常指示的敏感。

(6) 非旁轴空间光孤子传播及其与纳米尺度材料结构的相互作用。

(7) 真空量子现象,包括黑体辐射和耗散开放系统中的电磁扰动,以及任意材料几何结构中的卡西米尔(Casimir)力。

(8) MIT 开发的灵活、免费的 FDTD 软件包——Meep。

这些章节简要总结如下。

第 8 章“有源等离激元的 FDTD 模拟”,由 I. Ahmed, E. H. Khoo 和 E. P. Li 撰写。本章讨论了新近出现的混合 FDTD/量子力学技术,这一技术用来模拟那些等离激元器件,它们具有能够通过泵浦获得增益的集成半导体元件。这一新技术将模拟元件的金属组分的洛伦兹-特鲁德(Lorentz-Drude)模型与半导体组分的多级、多电子量子模型集成起来。总结了两个应用的例子:对两个金片间薄的、电泵浦 GaAs 媒质中传播的 175fs 光学脉冲的放大;来自嵌入了金纳米柱的 GaAs 微腔共振器的共振偏移和辐射。附录综述了近年来金属光学性质的关键点模型。与之前的模型相比,该模型能够在更宽的光学波长范围内对各种金属体的介电常数色散性质提供更精确的处理。

第 9 章“任意形状纳米结构非局域光学性质的 FDTD 计算”,由 J. M. McMahon, S. K. Gray 和 G. C. Schatz 撰写。在小于 10nm 尺度上,相对于基于体介电常数的假定预测,量子力学效应能导致金属的异常光学性质。对这种纳米结构,完全的量子力学处理是最好的,但相对于这些结构尺寸而言这是不现实的。但是,通过使用与块体金属介电模型不同的介电模型,在经典电动力学中并入某些量子效应是可能的。本章中,主要感兴趣的量子效应需要

一个介电模型。该介电模型中空间上某一点处材料的极化不仅取决于局部电场,而且取决于其邻域的电场。本章讨论了一种计算由这种空间非局域介电函数描述的任意形状纳米结构光学的响应的技术。本技术基于将导电电子的流体动力学特鲁德模型转换为运动方程,这随后在麦克斯韦—安培定律中起到电流场的作用。后者在麦克斯韦旋度方程的 FDTD 求解中以自洽方式并入。使用这一混合技术,给出了各种尺寸一维(1D)、二维(2D)及三维(3D)金纳米结构的模拟结果。这些结果证实,当感兴趣的特征尺寸降到 10nm 以下,模拟光与金纳米结构相互作用时包括了非局域介电现象的显著影响。

第 10 章“分子光学特性计算中经典电动力学与量子力学的耦合: RT-TDDFT/FDTD 方法”,由 H. Chen, J. M. McMahon, M. A. Ratner 和 G. C. Schatz 撰写。本章讨论了一种新的多尺度计算方法来将等离激元纳米粒子的散射电场合并到周围染料分子的量子力学光学特性计算中。对于给定的染料分子,依据其相对于纳米粒子的位置,首先用 FDTD 方法计算与频率相关的散射响应函数。随后,使用该响应函数通过多维傅里叶变换计算染料分子上的时间相关散射电场,以反映纳米粒子极化对染料分子上局域电场的作用效果。最后,采用实时时间相关密度函数理论(RT-TDDFT)方法来获得存在纳米粒子局域电场的情况下,期望的染料分子的光学特性。使用这一技术,模拟了 N3 染料分子的增强吸收光谱和吡啶分子的增强拉曼光谱,假定它们靠近直径 20nm 的银纳米球。计算得到的信号放大反映出染料分子的单个电子的波状响应与银纳米球的介电媒质的集体行为间的强烈耦合。总的来讲,这一混合方法提供了跨越量子力学与经典电动力学(即 FDTD)之间关于长度和时间尺度的鸿沟的桥梁。

第 11 章“变换电磁学激发的 FDTD 方法进展”,由 R. B. Armenta 和 C. D. Sarris 撰写。变换电磁学利用了麦克斯韦方程组的坐标不变性特性来综合人工材料的介电常数和磁导率张量,以用指定的方式来导行电磁波。本章给出了如何基于不变性原理采用麦克斯韦方程组坐标系无关表示,提供强大的附加 FDTD 能力,包括弯曲材料边界的共形模拟、假定有新的波传播特征的人工材料的合成,以及移动的电脉冲高精度跟踪的时间相关离散。这些增强的 FDTD 能力的例子,由麦克斯韦方程组的坐标变换,包括投影到与一般曲线坐标系有关的共变—协变基矢量得到。

第 12 章“非对角各向异性超材料斗篷的 FDTD 建模”,由 N. Okada 和 J. B. Jole 撰写。如果不进行适当的处理,直接应用 FDTD 来仿真具有非对角各向异性本构参数的基于变换的超材料,容易导致数值不稳定。本章讨论了一种通过确保数值导出的 FDTD 方程精确对称来解决这一不稳定问题的技术基础、公式和验证。这项技术的关键步骤包括找到本征值和对角化本构张量。在这一对角化过程之后,此前报道的任一个针对绝对角超材料情形的 FDTD 算法都可以应用。这一技术通过一个由非对角各向异性超材料组成的基于变换的椭圆斗篷的二维 FDTD 模型进行实证。发现这一斗篷能够在设计波长时,显著降低所包裹的椭圆形完美金属(PEC)柱的双站雷达散射截面和总散射截面。事实上,随着 FDTD 模型网格的逐渐细化,被包裹的 PEC 柱的散射趋于快速接近零。但是,有效散射减缩的带宽只有约 4%;这一带宽如此之窄,可以描述为仅仅是一个散射零深。这一窄的带宽似乎限制了此类斗篷的实际应用。

第 13 章“超材料结构的 FDTD 建模”,由 Costas. D. Sarris 撰写。本章从两个互补的预期给出了将 FDTD 应用到超材料分析与设计中几类关键问题的综述。首先,展现了几种感

兴趣超材料结构的瞬态响应的 FDTD 分析。这包括负折射率媒质和“完美透镜”,具有负群速的人工传输线,支持谐振锥现象的平面各向异性网格。其次,研究了实现超材料结构的周期性几何形状。此处使用的主要工具是与阵列扫描技术耦合的正弦—余弦方法。应用这一工具得到与平面周期性正折射率与负折射率传输线相关的色散特征(以及,如果需要的话,电磁场),以及由多片具有正、等效折射率的二维传输线组成的平面微波“完美”透镜。本章接下来综述了模拟具有等离激元组元的光学超材料的三角形网格 FDTD 技术,以及该技术如何与正弦—余弦方法耦合来分析周期性等离激元微结构。该微结构要求比使用笛卡儿 FDTD 网格和简单的台阶化所可能达到的更好的倾斜与弯曲金属表面建模。最后,应用周期性三角形网格 FDTD 技术精确得到由银微米柱阵列构成的亚波长等离激元光子晶体的色散特征及电磁模式。

第 14 章“采用 FDTD 方法计算光学成像”,由 I. R. Capoglu, J. D. Rogers, A. Taflove 和 V. Backman 撰写。本章基于麦克斯韦旋度方程组三维求解,给出了关于构成光学成像系统的新生电磁场模型基础的理论原则的综合而严格的专题讨论(tutorial discussion)。这些模型提供了由光学显微镜(亮场、暗场、相衬等)以及光度学和光刻中每一种电流形式形成的计算合成成像能力。聚焦、数值孔径变化等可以通过改变几种输入参数进行调节——从字面意义上说,是计算机上的显微镜。这就使得有可能在 $10^7:1$ 的距离尺度动态范围内进行现有的和假定的光学成像技术仿真,即从几纳米(感兴趣微结构中 FDTD 体元尺寸)到几厘米(成像面的位置,在此处计算单个像素的幅度和相位谱)。这一专题表明,一般的光学成像系统如何能够分割为 4 个自包含的亚组元[照射、散射、采集和归核化(refocusing)],以及对每个亚组元如何进行数学分析。在每个亚组元模拟中使用的近似数值方法通过合适的细节来解释。在适用的情况下会引用相关的实际应用。最后,通过包括微尺度结构的显微成像计算合成在内的几个实施实例实证了理论和数值结果。总的来讲,本章对那些从严格电磁场观点对模拟光学系统有兴趣的人来说,构建了一个很有用的起始点。这一方法的显著特色是对离散基信号处理问题的额外关注,这是有限方法如 FDTD 的关键问题,其中,只在有限套空间和时间点上计算电磁场。

第 15 章“采用 FDTD 方法计算光刻技术”,由 G. W. Burr, J. T. Azpiroz 撰写。本章给出了基本物理概念的综合而严格的专题讨论,以及 FDTD 的数值考虑,对其理解对实现半导体微芯片制造中的超大规模集成电路(VLSI)光刻的电磁场计算是至关重要的。随着 VLSI 技术特征维度的缩小和复杂度的增加,作为光刻技术基础的电磁场相互作用的通常的几何近似可能变得越来越不准。然而,预计对浸没式与极紫外(EUV)光刻系统的同时精确仿真是在可以预见的未来半导体制造中的越来越关键的部分。虽然所要求的三维电磁场的严格计算可能比近似方法慢得多,但快速周转(turnaround)仍然是重要的。FDTD 方法提供了诸如灵活、快速、精确、并行计算,以及具备仿真很宽范围材料的能力等优点。事实上,作为 VLSI 光刻基础的电磁场的 FDTD 计算,当前提供了对精度与周转时间的最佳组合,以理解和模拟相当小的图案的场效应。

第 16 章“FDTD 和 PSTD 在生物光子学中的应用”,由 I. R. Capoglu, J. D. Rogers, C. M. Ruiz, J. J. Simpson, S. H. Tseng, K. Chen, M. Ding, A. Taflove 和 V. Backman 撰写。本章定性讨论了生物光子学领域中麦克斯韦旋度方程的 FDTD 和 PSTD 计算求解的技术基础和代表性应用。本章突出的 FDTD 应用揭示了其提供个体生物细胞内光学相互作用的超高精度模型的

能力,并且提供了高级计算显微镜技术的物理内核。本章突出的 PSTD 应用表明其模拟与许多生物细胞团簇,甚至生物组织宏观切片的光学相互作用的能力,特别是在考虑发展对增强光学背散射和浊度抑制的物理现象的深刻理解时,尤其如此。在所有这些中,一个关键目的是告知读者 FDTD 和 PSTD 如何使麦克斯韦方程组在很宽范围的生物光子学技术的分析和设计中工作。这些技术展现出对提升细胞尺度过程的基本科学理解的希望,并提供重要的医疗应用(特别是癌症早期探测)。

第 17 章“空间孤子的 GVADE FDTD 建模”,由 Z. Lubin, J. H. Greene, 以及 A. Taflove 撰写。本章讨论的通用矢量辅助差分方程(GVADE)FDTD 方法,是基于第一原理、具有线性与非线性色散混合的材料中电磁波相互作用全矢量解的强大工具。该技术提供了麦克斯韦旋度方程组的一种直接时域解,没有任何简化旁轴、慢变包络或标量近似。另外,它可以应用任意非均匀材料几何结构,线性和非线性极化都可以通过麦克斯韦—安培定律并入。本章导出了由一个三极 Sellmeier 色散、一个瞬时 Kerr 非线性特性、一个色散拉曼非线性特性表征的熔石英逼真模型中电磁场的 GVADE FDTD 时间步进算法(这里,假定电场在入射面有纵向和横向分量)。接下来,该技术扩展到模拟一个由线性 Drude 色散表征的等离激元金属。随后,GVADE FDTD 方法应用到单个非旁轴和超功率空间光子,一对密集、共传播、非旁轴空间孤子的相互作用,亚波长气孔空间光子散射,以及非旁轴空间光子和薄的金膜之间的相互作用。结论是 GVADE FDTD 技术将在光学通信,以及计算包含微米、纳米尺度的光子电路中找到新的应用,这些光子电路要求控制具有重要亚波长特征的线性和非线性材料中的复杂电磁波现象。

第 18 章“黑体辐射和耗散开放系统中电磁扰动的 FDTD 建模”,由 J. Andreasen 撰写。本章讨论了 FDTD 方法如何模拟由于输出耦合产生的开口腔内的电磁场波动。该项讨论的基础是扰动—耗散定理。该定理规定,由泄漏导致的腔体场耗散伴随着热噪声,这里采用经典电动力学仿真。FDTD 网格的吸收边界处理为向网格内辐射的黑体。不同温度下的噪声源用与之等效的黑体辐射谱来合成。当在 FDTD 网格中放置介质腔体,热辐射就耦合到腔体并贡献给腔体场的热噪声。在马尔可夫链中,此时腔体光子寿命远比热辐射相干时间长,腔体模式中 FDTD 计算的热噪声数量与由朗之万方程给出的结果一致。这验证了最初来自腔体开启或输出耦合的热噪声的数值模型。FDTD 仿真还证实,在非马尔可夫链中,腔体模式中热光子稳态数量超过了真空模式中的,这是由于腔体内部热场的结构干涉。FDTD 数值模型的优点是热噪声是在没有任何腔体模式先验知识的情况下在时域中加入的。因此,该技术可应用于仿真其模式在 FDTD 计算之前还是未知的复杂开系统。随着与腔体泄漏有关的热噪声不区分模式地自然引入,这一方法对其模式在频率上重叠得厉害的泄漏严重的漏腔特别有用。因而,这里讨论的方法可以应用到很宽范围的量子光学问题。

第 19 章“任意形状媒质的卡西米尔力”,由 A. Oskooi 和 S. G. Johnson 撰写。本章讨论了 FDTD 模拟如何提供了一种灵活的方法来计算本质上任意构型和组分的微米及纳米结构的卡西米尔力。不像提出了这一应用的其他数值技术那样,FDTD 不是一种结构专用技术,因而,非常通用的代码,如 MIT 的免费可得的 Meep 软件(第 20 章),无须修改即可应用。本章从建立 FDTD-Casimir 技术的理论基础开始。随后是对在电流源采用快速收敛的谐振扩展的一种高效实现的讨论。接着,给出了考虑非零温度的扩展 FDTD-Casimir 技术的方法。本章提供了 5 个 FDTD-Casimir 模拟例子,以全三维仿真结束,其中卡西米尔力取

决于一个关键的分离参数从引力向斥力转变。总体上,除了提供基本物理现象仿真之外,这些 FDTD-Casimir 模拟方面的发展可能使得有机会进行由复合材料组成的新的微纳机械系统设计。

第 20 章“Meep: 灵活免费的 FDTD 软件包”,由 A. Oskooi 和 S. G. Johnson 撰写。本章讨论了 MIT 开发的免费、开源的 FDTD 算法软件工具 Meep(MIT 电磁方程组传播的缩写),可从 <http://ab-initio.mit.edu/meep> 网站下载。Meep 是一种全功能的软件包,包括:像任意各向异性、非线性以及色散电、磁介质这样的模拟能力;各种边界条件包括对称和 PML 边界条件;分布内存并行;笛卡儿坐标系以及柱坐标系下一维、二维以及三维空间网格;灵活的输出和场计算。Meep 还提供了一些与众不同的特性:分析谐振模型的高级信号处理技术;笛卡儿网格下倾斜与弯曲介质界面精确模拟的亚像素平滑技术;开发了时域代码的频域求解器;完整的脚本功能;完备的优化工具。本章首先讨论了组成 FDTD 网格和具备并行化能力的块(chunks)形基本结构单元;其次回顾了针对输入与输出,达到连续空一时模拟目的的 Meep 内核设计的基本原理;最后讨论了 Meep 针对非线性材料和 PML 的有些与众不同的设计复杂性;针对通量谱和谐振模式的 Meep 计算方法的重要方面;仅需要对现有 FDTD 算法最小修改,就可以实现的 Meep 频域求解器构想的验证;以及用户如何通过脚本界面进入 Meep 的功能特性。总体上,像 Meep 这样免费、开源的全功能 FDTD 软件包在进行电磁现象新研究方面具有至关重要的作用。它不仅降低了标准 FDTD 仿真的门槛,同时 FDTD 算法的简单性与 Meep 源代码的开源访问相结合,提供了研究与经典电动力学耦合的新物理现象的捷径。

致谢

我们真诚地向本书的所有作者表示谢意。当然,我们还要感谢各自的家庭成员,在本书完成过程中,他们表现出了极大的耐心并一直保持良好的精神状态。

Allen Taflove,伊利诺伊州埃文斯顿

Ardavan Oskooi,日本东京

2012 年 11 月

图书资源支持

感谢您一直以来对清华版图书的支持和爱护。为了配合本书的使用,本书提供配套的资源,有需求的读者请扫描下方二维码,在图书专区下载,也可以拨打电话或发送电子邮件咨询。

如果您在使用本书的过程中遇到了什么问题,或者有相关图书出版计划,也请您发邮件告诉我们,以便我们更好地为您服务。

我们的联系方式:

地址:北京市海淀区双清路学研大厦 A 座 701

邮编:100084

电话:010-62770175-4608

资源下载: <http://www.tup.com.cn>

客服邮箱: tupjsj@vip.163.com

QQ: 2301891038 (请写明您的单位和姓名)

教学交流、课程交流



清华电子



扫一扫,获取最新目录

用微信扫一扫右边的二维码,即可关注清华大学出版社公众号“清华电子”。

目录

第 1 章 三维交错网格局域傅里叶基 PSTD 并行处理技术	1
1.1 引言	1
1.2 动机	1
1.3 局域傅里叶基与重叠区域分解	3
1.4 SL-PSTD 技术的关键特征	3
1.4.1 局域傅里叶基 FFT	3
1.4.2 吉布斯现象伪影的缺失	6
1.5 介质系统的时间步进关系式	6
1.6 消除单频激励的相速度数值误差	7
1.7 理想匹配层吸收外部边界的时间步进关系式	8
1.8 消除近场向远场变换的数值误差	10
1.9 在分布存储巨型计算集群上的实现	11
1.10 SL-PSTD 技术验证	13
1.10.1 平面波照射介质球的远场散射	13
1.10.2 双层同心电介质球中电偶极子的远场辐射	14
1.11 总结	15
参考文献	15
第 2 章 基于拉盖尔多项式的无条件稳定 FDTD 方法	17
2.1 引言	17
2.2 传统三维拉盖尔基 FDTD 方法的公式	18
2.3 高效三维拉盖尔基 FDTD 方法的表达形式	21
2.4 PML 吸收边界条件	24
2.5 数值结果	27
2.5.1 平行板电容器：均匀三维网格	27
2.5.2 屏蔽的微带线：一维方向上的阶梯网格	28
2.5.3 PML 吸收边界条件特性	29
2.6 总结与结论	30