

文章编号: 0253-2239(2004)02-145-7

小孔衍射和近场散射数值计算的格林函数方法*

刘春香^{1,3} 程传福^{2,3} 任小荣³ 刘 曼^{2,3} 贾天卿² 张道中¹ 徐至展²

1 中国科学院物理研究所和凝聚态物理中心光物理实验室, 北京 100080
2 中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800
3 山东师范大学物理系, 济南 250014

摘要: 从简谐光波满足的亥姆霍兹方程出发, 将由格林定理得到的介质分界面上的积分方程转化为以表面上的光波及其导数为未知量的线性方程组, 并对其进行数值求解, 实现了光场的数值计算。然后将这一方法应用于亚波长尺度的小孔衍射的光波以及自仿射分形表面产生的随机光场及其在近场区域范围内的传播的计算。在随机表面产生的光场计算中, 提出了类比推导夫琅禾费面上散斑场自相关函数的方法产生随机表面, 以及计算其导数的傅里叶变换方法。对光场的计算结果表明, 在近场范围内, 光场随离开表面的距离的增加而迅速变化, 其传播特性完全不同于光场在远场范围内的传播特性。

关键词: 近场光学; 格林函数; 自仿射分形随机表面; 小孔衍射

中图分类号: O438 文献标识码: A

Green Function Method for the Numerical Calculations of Pinhole Diffraction and Near-Field Light Scattering

Liu Chunxiang^{1,3} Cheng Chuanfu^{2,3} Ren Xiaorong³ Liu Man^{2,3}
Jia Tianqing² Zhang Daozhong¹ Xu Zhizhan²

1 *Optical Physics Laboratory, Institute of Physics and Center for Condensed Matter Physics, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080*
2 *Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, The Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800*
3 *Shandong Normal University, Ji'nan 250014*

(Received 25 October 2002; revised 10 March 2003)

Abstract: Starting from the Helmholtz Equation, the integral equation of light wave on medium interfaces is obtained by use of Green theorem. Then the integral equation is discretized into a set of linear equations with unknown values of light wave and its derivative on the interface. Numerical solutions of these linear equations give the values of light waves. This method is applied to the calculations of both the pinhole diffraction in subwavelength scale and random light field produced by random self-affine fractal surfaces in near field. A method for generation of random self-affine fractal surfaces is proposed by analogy to the derivation process of the autocorrelation functions of speckles in Fraunhofer plane, and the Fourier transformation method for numerical derivative of the random surfaces is presented. The calculated results show that in near field, the random light fields vary dramatically with the distance increasing from the random surfaces, and the properties of light wave propagation are quite different from those of the light waves in far field.

Key words: near-field optics; Green function; random self-affine fractal surface; pinhole diffraction

* 国家自然科学基金(69978012)资助课题。

E-mail: chengchuanfu@yahoo.com

收稿日期: 2002-10-25; 收到修改稿日期: 2003-03-10

1 引 言

近场光学是研究距离物体表面一个波长以内的光学现象的新型学科。突破了传统光学分辨率极限的近场光学显微镜是近场光学原理的一个典型的应用实例,并且它的出现也为近场光学的研究和发展起到了重要推动作用。众所周知,近场内的光波既包括向远处传播的分量,又包括局限于物体表面一个波长量级以内的隐失波成分,并且近场区域的光波传播涉及光波自身的传播及其与表面材料的相互作用,这使得理论分析十分困难。因此,目前许多文献利用数值计算的方法来对近场光场的性质进行研究。常用的数值方法有格林函数法^[1~7]和时域有限差分(FDTD)^[8~11]方法等,这些方法对近场光学的研究和近场光学显微镜的设计起到了重要作用。

自仿射分形随机表面是一种能够较为精确地描述诸如从材料生长表面^[12~14]到天然散射体^[15,16]的许多实际表面的模型,近年来关于其光散射特性计算模拟研究引起了人们极大的兴趣。但是这些研究多数是基于光场衍射的基尔霍夫近似,来对此类表面在远场的散射特性进行研究的。关于自仿射分形随机表面在近场产生的随机光场性质的研究还比较少见。光场的数值计算方法为此类表面散射的近场光场的研究开展提供了可能的途径。我们知道,由于时域有限差分法需要在空间上进行有规则的格元分割,随机表面的高度分布的不规则性使得这种分割十分困难,甚至会由于计算量巨大而使实际计算过程不可实现。

光场数值计算的格林函数法利用格林定理,把简谐光波的传播问题简化为表面上的积分方程,降低了数值计算的复杂性和计算量。本文从简谐光波满足的亥姆霍兹方程出发,将由格林定理得到的介质分界面上的积分方程转化为以表面上的光波及其导数为未知量的线性方程组,对其进行数值求解,实现了光场的数值计算。我们将这一方法应用于亚波长尺度的小孔衍射的光波以及自仿射分形表面产生的随机光场及其在近场区域范围内的传播的计算。在自仿射分形表面产生的随机光场计算中,发现在近场范围内,光场随离开表面的距离的增加而迅速变化,这完全不同于光场在远场范围内的传播特性;在小孔衍射的计算中,演示了衍射光强随离开表面距离的增加而按指数衰减的传播特性。用格林函数法进行光场数值计算方法的实施,对于随机表面的

近场光散射特性的研究及近场光学显微镜的研究具有重要意义。

2 散射光场的推导

图 1 为光波在介质分界面上传播的示意图。

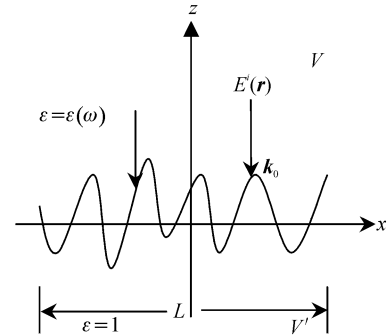


Fig. 1 The illustration diagram for the propagation of the light waves at the interface of dielectric media

为简单起见,我们仅讨论一维的情况。假定 s 偏振的平面光波 $E^i(\mathbf{r})$ 垂直入射,即波矢量 \mathbf{k}_0 垂直于 x 坐标平面, \mathbf{r} 为空间位置矢量。介质的分界面为长度为 L 的随机表面,其高度分布用 $z = D(x)$ 表示。介质分界面以上 $z > D(x)$ 的空间 V 为上半空间,其介电常量 $\epsilon(\omega) = n^2$,在本文中仅讨论 $\epsilon(\omega)$ 为实数的电介质。 $z < D(x)$ 的下半空间 V' 为真空 ($\epsilon = 1$)。则上半空间和下半空间的光波 $E(\mathbf{r})$ 和 $E'(\mathbf{r})$ 满足亥姆霍兹方程:

$$\nabla^2 E(\mathbf{r}) + k^2 E(\mathbf{r}) = 0, \quad z > D(x), \quad (\mathbf{r} \in V) \quad (1a)$$

$$\nabla^2 E'(\mathbf{r}) + k_0^2 E'(\mathbf{r}) = 0, \quad z < D(x), \quad (\mathbf{r} \in V') \quad (1b)$$

其中 $k_0 = |\mathbf{k}_0| = 2\pi/\lambda$, $k = \sqrt{\epsilon}k_0$ 。 $E(\mathbf{r})$ 和 $E'(\mathbf{r})$ 在界面上满足边值关系:

$$E(\mathbf{r})|_{z=D^{(+)}(x)} = E'(\mathbf{r})|_{z=D^{(-)}(x)}, \quad (2a)$$

$$\left[\frac{\partial E(\mathbf{r})}{\partial n} \right]_{z=D^{(+)}(x)} = \left[\frac{\partial E'(\mathbf{r})}{\partial n} \right]_{z=D^{(-)}(x)}, \quad (2b)$$

其中 $D^{(+)}$ 和 $D^{(-)}$ 分别表示从上半空间和下半空间无限趋近 $D(x)$ 的表面,偏导数为 $\frac{\partial}{\partial n} = \mathbf{n} \cdot \nabla$,

$$\mathbf{n} = \frac{1}{\gamma} \left\{ -\frac{d[D(x)]}{dx}, 1 \right\},$$

$$\gamma = \left(1 + \left\{ \frac{d[D(x)]}{dx} \right\}^2 \right)^{1/2}.$$

在上半空间和下半空间分别取亥姆霍兹方程的格林函数 $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 和 $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$,并由(1)式可得

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla_{\mathbf{r}'}^2 E(\mathbf{r}') - E(\mathbf{r}') \nabla_{\mathbf{r}'}^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 4\pi\delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)E(\mathbf{r}'), \quad (3a)$$

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla_{\mathbf{r}'}^2 E'(\mathbf{r}') - E'(\mathbf{r}') \nabla_{\mathbf{r}'}^2 G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 4\pi\delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)E'(\mathbf{r}'), \quad (3b)$$

在本文所讨论的一维情况下,格林函数可以表示为

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = i\pi H_0^{(1)}(k_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (4a)$$

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = i\pi H_0^{(1)}\{[\epsilon(\omega)]^{1/2} k_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\}, \quad (4b)$$

其中 $H_0^{(1)}$ 为第一种零阶汉开尔函数。我们分两种情况对(3)式进行积分^[2~4]:

1) 介质中($\mathbf{r}' \in V$),由格林定理可将介质中的光场 $E(\mathbf{r})$ 用入射光场和介质表面上的光场来表示:

$$E^{(i)}(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \left[E(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial E(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right] \gamma' = E(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in V, \quad (5a)$$

$$E^{(i)}(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \left[E(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial E(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right] \gamma' = 0, \quad \mathbf{r} \in V', \quad (5b)$$

其中 $\mathbf{r}' = [x', z = D(x')]$ 。

2) 真空中($\mathbf{r}' \in V'$),同样可以将光场用介质表面的光场来表示:

$$-\frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \left[E'(\mathbf{r}') \frac{\partial G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} - G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial E'(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right] \gamma' = 0, \quad \mathbf{r} \in V, \quad (6a)$$

$$-\frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \left[E'(\mathbf{r}') \frac{\partial G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} - G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial E'(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right] \gamma' = E'(\mathbf{r}'), \quad \mathbf{r} \in V', \quad (6b)$$

根据边值关系(2)式,我们将表面上的光场及其导数定义为表面上的两个源函数:

$$E(x) = E[x, D(x)] = E'[x, D(x)], \quad (7)$$

$$F(x) = \gamma \left[\frac{\partial E(\mathbf{r})}{\partial n} \right]_{z=D^{(+)}(x)} = \gamma \left[\frac{\partial E'(\mathbf{r})}{\partial n} \right]_{z=D^{(-)}(x)}, \quad (8)$$

将(7)式、(8)式分别代入(5a)式、(6a)式中,并使 \mathbf{r} 无限趋近于表面 $z \xrightarrow{\delta \rightarrow 0^+} D(x) + \delta$,可得到随机表面上的光场满足以下的关系式:

$$E^{(i)}[x, D(x)] + \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \left\{ E(x') \left[\frac{\partial G}{\partial z'} - D'(x') \frac{\partial G}{\partial x'} \right] - GF(x') \right\} = E(x), \quad (9a)$$

$$-\frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \left\{ E'(x') \left[\frac{\partial G_0}{\partial z'} - D'(x') \frac{\partial G_0}{\partial x'} \right] - G_0 F(x') \right\} = 0, \quad (9b)$$

上式中 $G_0 = G_0(x, x')$ 和 $G = G(x, x')$, (9)式即为表面上的光场所满足的积分方程。从解析的角度来说,在入射光波 $E^{(i)}$ 和界面高度分布 $D(x)$ 已知的情况下,可以通过求解上面的方程求出表面上的光场分布及其导数。然后再把(7)式、(8)式代入(6b)式中,我们可以将真空中任意一点的光场即透射光场表示为

$$-\frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \left\{ E'(x') \left[\frac{\partial G_0}{\partial z'} - D'(x') \frac{\partial G_0}{\partial x'} \right] - G_0 F(x') \right\} = E'(x), \quad x \in V' \quad (10)$$

由于解析求解积分方程(9)式即使在规则介质界面的条件下也是十分困难的,因此通常借助于数值计算的方法对其进行求解。在数值求解运算中,首先需要将(9)式进行数字离散化处理,通过将介质分界面在入射光照明范围 $[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$ 内等间隔的用 N 个点分割,并将积分转化为有限求和,从而使(9)式转化为以界面上 N 个点处的光场 E 及其导数 F 的值为未知量的线性方程组^[2,3,7]:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} + \mathbf{I} & \mathbf{B} \\ \mathbf{A}^{(0)} - \mathbf{I} & \mathbf{B}^{(0)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{F} \end{bmatrix} = 2 \begin{bmatrix} \mathbf{E}^{(i)} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (11)$$

式中 $\mathbf{E}^{(i)}$ 、 \mathbf{E} 、 \mathbf{F} 分别表示包含 N 个元素的列矩阵,它们第 n 个元素 $E_n^{(i)}$ 、 E_n 、 F_n 分别是函数 $E_x^{(i)}$ 、 $E(x)$ 、 $F(x)$ 在 $x_n = -\frac{L}{2} + (n-1)\Delta x$, ($\Delta x = \frac{L}{N-1}$, $n=1, 2, \dots, N$) 处的取值;式中矩阵 \mathbf{A} 和 \mathbf{B} 的元素分别表示为

$$\left. \begin{aligned} A_{mn} &= \frac{i\sqrt{\epsilon}k_0 \Delta x}{2} \frac{D'(x_n)(x_m - x_n) - [D(x_m) - D(x_n)]}{\{(x_m - x_n)^2 + [D(x_m) - D(x_n)]^2\}^{1/2}} \times \\ &\quad H_1^{(1)}(\sqrt{\epsilon}k_0 \{(x_m - x_n)^2 + [D(x_m) - D(x_n)]^2\}^{1/2}), \quad (m \neq n) \\ A_{mn} &= \frac{-\Delta x}{2\pi\gamma^2} D''(x_n), \quad (m = n) \end{aligned} \right\} \quad (12a)$$

$$\left. \begin{aligned} B_{mn} &= (i\Delta x/2) H_0^{(1)}(\sqrt{\epsilon}k_0 \{(x_m - x_n)^2 + [D(x_m) - D(x_n)]^2\}^{1/2}), \quad (m \neq n) \\ B_{mn} &= (i\Delta x/2) H_0^{(1)}(\sqrt{\epsilon}k_0 \gamma \Delta x/2e), \quad (m = n) \end{aligned} \right\} \quad (12b)$$

其中 \mathbf{I} 为单位矩阵, 子矩阵 $\mathbf{A}^{(0)}$ 、 $\mathbf{B}^{(0)}$ 对应于真空中的情形, 它们的元素 $A_{mn}^{(0)}$ 、 $B_{mn}^{(0)}$ 的值为 \mathbf{A} 、 \mathbf{B} 的元素 A_{mn} 、 B_{mn} 在真空中 (即 $\epsilon=1$ 时) 的取值。

3 近场光场数值计算的实现与小孔衍射光场的计算

亚波长尺度的小孔衍射不仅是近场光学研究中的重要例子, 而且其衍射光场的研究结果是近场光学显微镜探针设计的重要依据。作为本文实现光场数值计算的应用实例和结果验证, 我们在光场数值计算的编程实施过程中首先对小孔衍射光场进行了计算。

在计算模拟中, 我们设定入射光波 $E^{(i)}$ 是振幅为 1、波长为 $0.6328 \mu\text{m}$ 的平面波, N 取 1000 个点,

$$\left\{ \begin{aligned} Y_0(Z) &\approx -iH_0^{(1)}(Z) \approx \frac{2}{\pi} \ln(Z), & Z \rightarrow 0, \\ Y_\nu(Z) &\approx -iG_\nu^{(1)}(Z) \approx -\frac{1}{\pi} \Gamma(\nu) \left(\frac{1}{2}Z\right)^{-\nu}, & \nu > 0, \end{aligned} \right. \quad (13)$$

和

$$\left\{ \begin{aligned} J_\nu(Z) &= \sqrt{\frac{2}{\pi Z}} \cos\left(Z - \frac{1}{2}\nu\pi - \frac{\pi}{4}\right), \\ Y_\nu(Z) &= \sqrt{\frac{2}{\pi Z}} \sin\left(Z - \frac{1}{2}\nu\pi - \frac{\pi}{4}\right), \end{aligned} \right. \quad Z \rightarrow \infty, \quad (14)$$

其中 J_ν 和 Y_ν 分别表示 ν 阶贝塞尔函数和诺埃曼函数, 在其宗量取中间值 ($0.1 < Z < 17.5$) 时, 将与汉开尔函数相应的贝塞尔函数和诺依曼函数的数值按宗量 0.1 的间隔输入到程序的数组中, 对于宗量为该范围内任意值的汉开尔函数的数值, 用数组中两个邻近宗量值对应的汉开尔函数的数值通过线性插值来进行计算。在系数矩阵 \mathbf{A} 、 \mathbf{B} 以及 $\mathbf{A}^{(0)}$ 、 $\mathbf{B}^{(0)}$ 的元素构造完毕后, 利用复系数方程组的全选主元高斯消去法^[17] 解(9)式中的 $2N$ 阶方程组, 从而求得介质分界面上的散射光场及其导数。在获得界面上的光场 $E(x')$ 及其导数 $F(x')$ 后, 然后根据(10)式进行数值积分, 便得到光波由介质向真空中传播时经小孔衍射后的光场。

介质设定为玻璃介质 ($n = 1.532$)。由(12)式可以看出, 线性方程组系数矩阵的元素 A_{mn} 、 B_{mn} 以及 $A_{mn}^{(0)}$ 、 $B_{mn}^{(0)}$ 的构造需要用到第一种零阶和一阶汉开尔函数, 对于小孔衍射来说, 这些元素的表达式中的系数和宗量中用到的表面高度 $D(x_n)$ 及其导数均可设为 0。在编程中利用汉开尔函数和贝塞尔函数以及诺埃曼 (Neumann) 函数之间的关系

$$H_\nu^{(1)}(x) = J_\nu(x) + iY_\nu(x),$$

并判断其宗量

$$Z = \sqrt{\epsilon}k_0 \{(x_m - x_n)^2 + [D(x_m) - D(x_n)]^2\}^{1/2}$$

和

$$Z = \sqrt{\epsilon}k_0 \gamma \Delta x/2e$$

的数值, 在它们很小 ($Z < 0.1$) 和很大 ($Z > 17.5$) 的极限情况下, 我们采用渐近表达式

图 2(a)~图 2(c) 分别给出了小孔孔径 L 分别为 50 nm、100 nm 和 200 nm 时表面上的光强和在表面后不同距离 R 处的衍射光强分布。在衍射光场的计算中, 光强的横向范围 L' 是小孔孔径的 2 倍。图 2 中的光场强度曲线按其 中间部分从上到下依次为表面上的光强分布和距表面 $\lambda/100$ 、 $\lambda/50$ 、 $\lambda/30$ 、 $\lambda/10$ 、 $\lambda/5$ 、 $\lambda/2$ 和 λ 处的各平面上的光强分布。与小孔近场衍射的现有文献的理论结果, 如与文献 [18] 的结果相比可以看出, 图 2 的结果与该文献中图 4 的是一致的。在图 3(a)~图 3(c) 中, 我们分别给出了上述三个小孔在距离小孔表面不同距离 R 处衍射光强分布在中间 L 的范围内平均值随距离

的变化。在图中也给出了它们按指数衰减的拟合曲线。可以看出衍射光强的值大致是呈指数衰减的，

这也与现有的结论是吻合的，从而进一步验证了本文理论方法和程序编写的正确性。

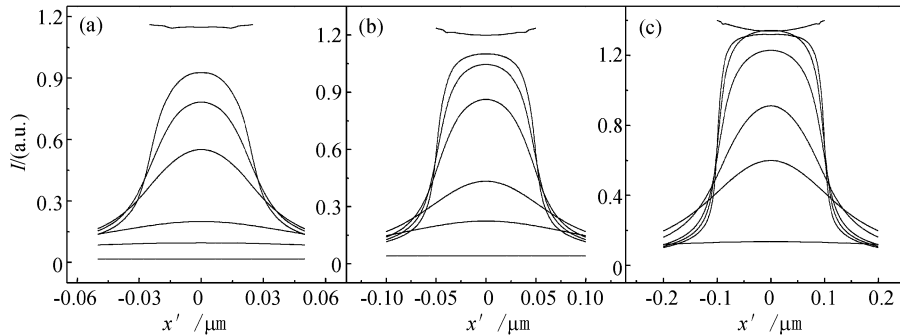


Fig. 2 The intensity distribution at the interfaces of the pinholes with aperture size.
(a) $L=50$ nm, (b) $L=100$ nm, (c) $L=200$ nm

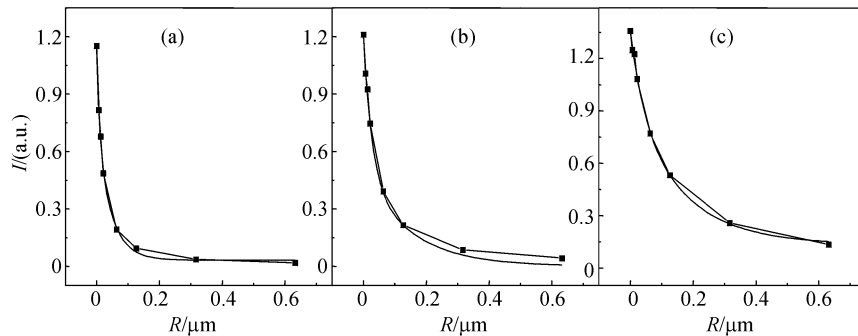


Fig. 3 The diffracted intensities versus the distance R from the surfaces for pinholes with different aperture size.
(a) $L=50$ nm, (b) $L=100$ nm, (c) $L=200$ nm

4 自仿射分形随机表面的模拟产生及其近场散射光场的计算

由于自仿射分形随机表面能够很好地描述许多实际表面,在用近场光学显微镜对这些实际表面探测时,其光纤探针所探测的是该类表面近场的散射光强。因此,研究此类表面的近场散射光场与随机表面特性之间的关系,对于近场光学显微图象的解释具有重要意义。同时,由于自仿射分形随机表面形貌的局域分形特征,可以引起较强的随机隐失波,对其在近场内的传播特性的认识也具有重要的学术意义。此外,目前在近场光学的研究中,多数文献局限于规则表面产生的近场光波的研究,其理论和数值计算比较简单;对于随机表面来说,其近场光波特性却要复杂得多,因此对自仿射分形随机表面的近场光波进行模拟计算研究对于研究领域的拓展是非常有益的。下面我们提出自仿射分形随机表面的近场光场计算的方法,并给出了初步的计算结果。

与小孔衍射的光场计算相比,在自仿射分形随

机表面的近场散射光场计算中,系数矩阵元素的构造还要涉及到表面高度的产生及其导数的计算。为此,提出以下类比推导夫琅禾费面上散斑场相关函数过程的一维自仿射分形随机表面的产生方法。自仿射分形表面的高度分布的自相关函数可表示为

$$R_h(\rho) = \langle D(x)D(x+\rho) \rangle = \omega^2 \exp[-(\rho/\xi)^{2\alpha}], \quad (15)$$

其中 $\langle \cdot \rangle$ 表示系综平均, ρ 为相关间隔, ω 和 ξ 分别为随机表面的粗糙度和横向相关长度, α 为表面的粗糙指数,它与表面的分形维数 D_f 之间的关系为 $\alpha = d - D_f$, d 为表面所嵌入空间的维数,且 $0 \leq \alpha \leq 1$ 。由于 $R_h(\rho)$ 是 ρ 的对称下降函数,其傅里叶变换是非负实数,因此可以定义“孔径函数” $p(u)$:

$$\begin{cases} p(u) = [P(u)]^{1/2}, \\ P(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^2 \exp\left[-\left(\frac{v}{\xi}\right)^{2\alpha}\right] \exp(i2\pi uv) dv, \end{cases} \quad (16)$$

用下面的傅里叶变换作为复高度函数的产生公式:

$$D_c(x) = D_r(x) + iD_i(x) =$$

$$\sqrt{2} \int_{-\infty}^{+\infty} p(u) \exp[i2\pi\eta(u)] \exp(-i2\pi ux) du, \quad (17)$$

其中 $D_r(x)$ 和 $D_i(x)$ 分别为 $D_c(x)$ 的实部和虚部, $\eta(u)$ 是均值为 0 的实变量白噪声过程 $\langle \eta(u) \rangle = 0$,

$\langle \eta(u)\eta(u') \rangle = \delta(u-u')$ 。由傅里叶变换定理,并注意到 $\exp[i2\pi\eta(u)]$ 是复白噪声过程,其实部和虚部的均值均为零,我们可以得到 $D_c(x)$ 和 $D_r(x)$ 及 $D_i(x)$ 的自相关函数^[19]:

$$\begin{aligned} \langle D_c(x)D_c^*(x+\rho) \rangle &= 2\langle D_r(x)D_r(x+\rho) \rangle = 2\langle D_i(x)D_i(x+\rho) \rangle = \\ &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} [p(u)]^2 \exp(-i2\pi u\rho) du = 2w^2 \exp[-(\rho/\xi)^{2\alpha}], \end{aligned} \quad (18)$$

由于(17)式中的 D_c 可以看作是大量基元 $\exp[i2\pi\eta(u)]\exp(-i2\pi ux)$ 的相干叠加^[16],由统计理论中的中心极限定理可知, $D_r(x)$ 和 $D_i(x)$ 都是均值为零的高斯随机过程。根据(17)式, $D_r(x)$ 和 $D_i(x)$ 都可作为自仿射分形表面高度的数值分布。在本文的计算中,我们只采用了实部 $D_r(x)$ 。

从严格的数学角度来说,分形随机表面的重要特征是其高度分布处处连续但不可微,因此,其高度的一阶和二阶导数 $D'(x)$ 和 $D''(x)$ 不能按常规的两点差分法来对其进行数值计算。为此我们采用下面的傅里叶变换的方法对表面的高度来进行求导。首先对表面高度分布进行数字傅里叶变换:

$$H(f_x) = \int_{-\infty}^{+\infty} D(x_0) \exp(-i2\pi f_x x_0) dx_0, \quad (19)$$

表面高度函数的导数则通过 $D(x)$ 的逆傅里叶变换对求一阶、二阶导数来获得,即

$$\frac{dD(x_0)}{dx_0} = \int_{-\infty}^{+\infty} i2\pi f_x H(f_x) \exp(i2\pi f_x x_0) df_x, \quad (20)$$

和

$$\frac{d^2 D(x_0)}{d^2 x_0} = \int_{-\infty}^{+\infty} (i2\pi f_x)^2 H(f_x) \exp(i2\pi f_x x_0) df_x, \quad (21)$$

利用上述方法,在产生随机表面样本的同时可以得到其一阶和二阶导数的数值分布。

图 4 给出了用上述方法产生的表面长度 L 为 $20 \mu\text{m}$ 的 4 个表面样本。它们的均方根粗糙度 w 均取 $0.2 \mu\text{m}$, 横向相关长度均为 $0.5 \mu\text{m}$, 粗糙指数 α 分别取 1.0、0.8、0.6 和 0.4, 对应的表面分形维数分别为 1.0、1.2、1.4 和 1.6, 在每个表面样本的产生中均使用了同一组随机数。对所产生的随机表面我们按(15)式进行了相关函数的计算及表面参量拟合,拟合得到的表面参量与设定的表面参量相符合。

在获得表面的高度分布 $D(x)$ 及其导数后,根

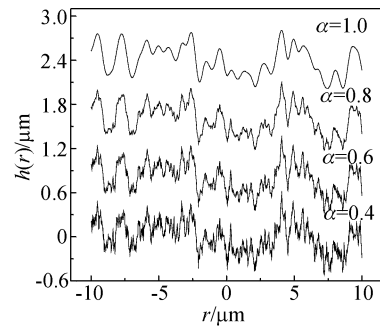


Fig. 4 The four generated random surface samples with different α

据在前面两小节中所说的方法构造自仿射分形表面光散射的矩阵元素 A_{mn} 、 B_{mn} 以及 $A_{mn}^{(0)}$ 、 $B_{mn}^{(0)}$, 并采用同样的方法求解线性方程组,可以得到随机表面上的光场 $E(x)$ 及其导数 $F(x)$ 的数值分布。

在光场的实际数值计算中,通过调整表面参量和表面长度,可以得到在不同表面参量条件下的表面上和衍射光场的光强分布。图 5(a)~图 5(d) 中实线由下到上依次表示表面长度 L 取 $5 \mu\text{m}$ 其它表面参量与图 4 给出的 4 个表面样本的参量相同时,在表面上和离开表面 0.1λ 、 0.5λ 、 1.0λ 处的散射光场的强度分布,为了能够在同一幅图中清楚地显示,我们分别在离开表面的各个不同距离处的光强分布中加上了一定适当的背底。由这些结果可以看出:

1) 除 $\alpha=1$ 的情况外,表面上和近场范围内光场的强度分布出现局域的起伏;随着表面粗糙指数的减小,即随着表面分形维数的增加,这种局域的起更加剧烈。对于同一表面样本来说,随着离开表面距离的增加,光场强度的这种局域起伏逐渐减小。在离开表面一个波长的距离时,光强分布中的这种局域起伏便消失了。

2) 在近场的范围内,光强分布随着离开表面距离的增加而急剧变化。这些现象都是与非近场散射光场的传播特性完全不同的。

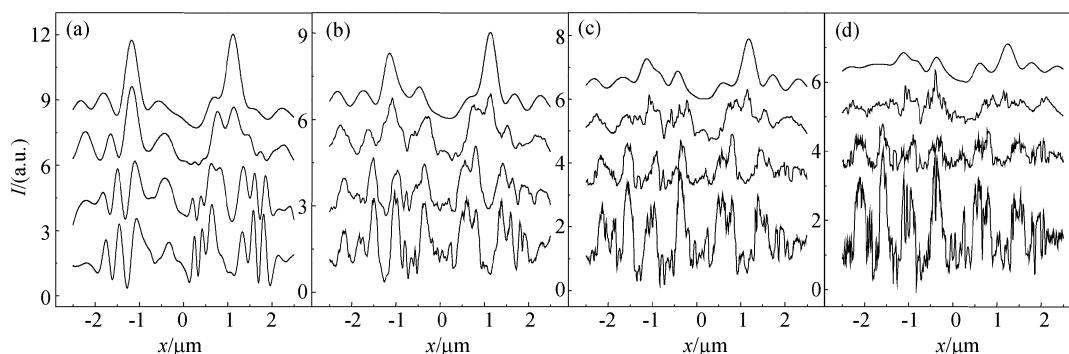


Fig. 5 The intensity distributions at the distances $R=0, 0.1\lambda, 0.5\lambda$ and 1.0λ for random surfaces with
(a) $\alpha=1.0$, (b) $\alpha=0.8$, (c) $\alpha=0.6$, (d) $\alpha=0.4$

总结 本文利用格林函数和边界条件,通过数值求解光场所满足的积分方程实现了对近场光场的数值计算,并将这一方法应用于小孔衍射和随机表面产生的近场光场的计算。所得到的小孔衍射的结果对于近场光学显微镜探针的设计具有较好的参考意义。在随机表面近场光场的计算中,我们提出了自仿射分形随机表面模拟产生及其导数计算的方法,并发现此类表面的近场散射光场在传播特性上与熟知的非近场随机光场有很大的不同。虽然这些现象的理论解释尚有待于进一步探索,但我们相信,这些结果的发现对于近场随机光场的研究的开展具有重要意义。

参 考 文 献

- 1 Kelso C M, Flammer P D, DeSanto J A *et al.*. Integral equations applied to wave propagation in two dimensions: modeling the tip of a near-field scanning optical microscope. *J. Opt. Soc. Am. (A)*, 2001, **18**(8):1993~2001
- 2 Sanchez-Gil J A, Nieto-Vesperinas M. Light scattering from random rough dielectric surfaces. *J. Opt. Soc. Am. (A)*, 1991, **8**(8):1270~1286
- 3 Maradudin A A, Michel T, McGurn A R *et al.*. *Ann. Phys.*, (NY), 1990, **203**(2):255~307
- 4 Sanchez-Gil J A, Garcia-Ramos J V. Calculations of the direct electromagnetic enhancement in surface enhanced Raman scattering on random self-affine fractal metal surfaces. *J. Chem. Phys.*, 1998, **108**(1):317~325
- 5 Sanchez-Gil J A, Garcia-Ramos J V. Near-field electromagnetic wave scattering from random self-affine fractal metal surfaces: Spectral dependence of local field enhancements and their statistics in connection with surface-enhanced Raman scattering. *Phys. Rev. (B)*, 2000, **62**(15):10515~10525
- 6 Sanchez-Gil J A, Nieto-Vesperinas M. Resonance effects in multiple light scattering from statistically rough metallic surfaces. *Phys. Rev. (B)*, 1992, **45**(15):8623~8633
- 7 Maradudin A A, Mendez E R, Michel T. Backscattering effects in the elastic scattering of P-Polarized light from a large amplitude random metallic grating. *Opt. Lett.*,

- 1989, **14**(3):151~156
- 8 Vasilyeva E, Taflove A. Three-dimensional modeling of amplitude-object imaging in scanning near-field optical microscopy. *Opt. Lett.*, 1998, **23**(15):1155~1157
- 9 Taflove A. *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*. Artech House, Norwood, Mass, 1995
- 10 Zhou Qing, Zhu Xing, Li Hongfu. Study on light intensity distribution of tapered fiber in near-field scanning microscopy. *Acta Physica Sinica (物理学报)*, 2000, **49**(2):210~214 (in Chinese)
- 11 Zhu Yanjie, Dong Xiaopeng, Yang Xiaoli *et al.*. Application and improvement of finite-difference time-domain algorithm in the analysis of optical waveguides. *Acta Optica Sinica (光学学报)*, 2003, **23**(5):565~571 (in Chinese)
- 12 Qi Hongji, Cheng Chuanfu, Yuan Jingmei *et al.*. Morphology analysis and growth mechanism of zirconium dioxide thin film. *Acta Optica Sinica (光学学报)*, 2003, **23**(8):974~979 (in Chinese)
- 13 Meakin P. *Fractals, Scaling and Growth Far from Equilibrium*. London: Cambridge University, 1998
- 14 Lopez J M. Scaling approach to calculate critical exponents in anomalous surface roughening. *Phys. Rev. Lett.*, 1999, **83**(22):4594~4597
- 15 Qi Dongping, Liu Deli, Teng Shuyun *et al.*. Morphological analysis by atomic force microscope and light scattering study for random scattering screens. *Acta Physica Sinica (物理学报)*, 2000, **49**(7):1260~1266 (in Chinese)
- 16 Wong P Z. Scattering by inhomogeneous systems with rough internal surfaces: Porous solids and random-field Ising systems. *Phys. Rev. (B)*, 1985, **32**(11):7417~7424
- 17 Xu Shiliang. *A Collection of FORTRAN Programs of Algorithms (FORTRAN 算法程序集)*. Beijing: Tsinghua University Press, 1992. 31~33 (in Chinese)
- 18 Xie Jianping, Wu Weimin, Fang Hui *et al.*. Boundary diffraction method for aperture near-field diffraction. *Chin. Phys. Lett.*, 1999, **16**(11): 311 ~ 813 (in Chinese)
- 19 Dainty J C. *Laser Speckle and Related Phenomena*. 2nd ed. Berlin: Springer-Verlag, 1984