

doi: 10.3788/gzxb20154411.1105002

# 斜入射周期结构模拟的迭代时域有限差分方法

沈晨阳<sup>1</sup>, 方明<sup>1</sup>, 黄志祥<sup>1</sup>, 吴先良<sup>1,2</sup>

(1 安徽大学 电子信息工程学院 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 电子信息工程学院, 合肥 230061)

**摘 要:** 基于时域有限差分法引入一种基于迭代的算法, 主要原理是通过时间步进方式, 用先迭代产生的已知场近似当前迭代所需的未知场, 使近似场和真实场之差随迭代次数的增加而逐渐减小. 探讨了该算法的具体实现过程, 给出了收敛性分析, 发现无限长金板反射系数的计算结果与解析解在数值上高度一致, 从而验证了该方法的正确性. 将该算法引入到三维色散结构模型仿真中, 从理论上验证了在硅表面放置纳米圆柱结构所具有的超透射现象. 研究表明, 所构建方法克服了传统方法受入射角度限制、缺少时域场演化过程和需要大量网格剖分等方面的缺点, 为色散周期结构在斜入射条件下的传输特性研究提供了新的解决途径.

**关键词:** 斜入射; 传输特性; 时域有限差分方法; 周期结构; 迭代算法

中图分类号: O441.4

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2015)11-1105002-7

## Analysis of Periodic Structures at Oblique Incidence by Iterated Finite-difference Time-domain Method

SHEN Chen-yang<sup>1</sup>, FANG Ming<sup>1</sup>, HUANG Zhi-xiang<sup>1</sup>, WU Xian-liang<sup>1,2</sup>

(1 Key Laboratory of Intelligent Computing and Signal Processing of Ministry of Education, Anhui University, Hefei 230039, China)

(2 School of Electronic and Information Engineering, Hefei Normal University, Hefei 230061, China)

**Abstract:** A algorithm based on the iterative method was presented with Finite-Difference Time-Domain (FDTD) arithmetic. The main principle is that the unknown field for the current iteration is replaced approximately by the field produced in previous iteration with the time-stepping method. The difference between approximated and real fields decreases with the increase of iterations. Specific procedure of the algorithm was discussed and the convergence analysis was presented. By calculating the reflection coefficient of infinite gold plate and compare it with analytical solutions, it is concluded that the two results are highly consistent with each other numerically and this algorithm turns out to be right. The transmission of three-dimensional dispersive structure with nano cylindrical structure on silicon surface is simulated to verify this method. Results clearly show that this method overcomes the limitation of incidence angle, lack of time domain field evolution procession and need for large meshes compared with traditional methods, which provide a new solution for transmission properties of dispersive periodic structures under oblique incidence conditions.

**Key words:** Oblique incidence; Transmission characteristics; Finite-Difference Time-Domain (FDTD); Periodic structure; Iterated algorithm

**OCIS Codes:** 050.1755; 150.1135; 220.4241; 260.2030

**基金项目:** 国家自然科学基金(Nos. 61471001, 51277001)、安徽自然基金(Nos. 1508085JD03, 1508085QF130)和高等学校博士学科点专项科研基金(No. 20123401110009)资助

**第一作者:** 沈晨阳(1991-), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为电磁场数值计算方法. Email: 593308115@qq.com

**导师(通讯作者):** 黄志祥(1979-), 男, 教授, 博士, 主要研究方向为电磁高性能计算及新型材料电磁特性. Email: zxhuang@ahu.edu.cn

**收稿日期:** 2015-06-10; **录用日期:** 2015-09-08

<http://www.photon.ac.cn>

## 0 引言

近年来,周期结构在电磁领域中的应用获得越来越多的关注,例如电磁带隙结构、滤波器件、太阳能电池等,从而使科研人员对周期结构的研究变得尤为迫切<sup>[1]</sup>.时域有限差分(Finite-Difference Time-Domain, FDTD)<sup>[2]</sup>法作为一种高效的计算工具被广泛地应用于周期结构的传输特性研究中.为了提高计算效率,根据Floquet定理,可以通过取周期结构的一个周期单元外加边界条件来代替整个结构<sup>[3]</sup>.然而,由于频域平面波的相位差转换到时域存在时间超前项问题,所以传统FDTD法无法解决周期结构中的斜入射问题.

随着FDTD技术的不断发展,多种解决方法相继提出,主要分为“直接法”和“场变换法”两类.直接法是基于普通的FDTD方法,如sine-cosine方法<sup>[4]</sup>及谱域FDTD方法<sup>[5]</sup>.Sine-cosine方法采用双平面波同时入射的方式且波源设置为单频点单角度,从而使周期方向的波数分量为常量,这样在由频域转换到时域的过程中就消除了时间的滞后和超前项.但该方法受限于单频点单角度的设置,无法得到宽频信息.谱域FDTD法在计算周期结构传输特性方面是一种简单而又有效的手段,它通过同时改变入射角和角频率,使周期方向的波数保持定值,用这种方法可以得到宽频信息.但是它对固定角度入射的纳米结构等离子体材料的研究不是十分理想.场变换法是利用场变换的方法来消除相移问题,比如分裂场方法<sup>[6]</sup>,它通过在频域中引入新的变量来消除相位差,转换到时域时就解决了时间超前项无法获取的问题.但是当入射角增大时,这种方法的稳定性就会下降,因此在计算入射角比较大尤其是掠入射的情况下很难得到稳定的结果.

本文采用了一种基于FDTD的迭代算法<sup>[7-8]</sup>,可以有效克服传统方法的缺点.这种方法通过若干次数值计算后得到正确的结果.在每次迭代的过程中都会把计算得到的场值记录下来,利用上一次迭代产生的场值结合时间步进的方法近似代替当前迭代所需的未知场值,并且近似场和真实场之差会随着迭代次数的增加而逐渐减小,最终得到收敛结果.

## 1 基本理论

### 1.1 周期结构的斜入射分析

在垂直入射条件下,以 $x$ 轴方向为周期的二维平面结构内各点场值满足

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}_1, t) = \mathbf{F}(\mathbf{r}_2, t) \quad (1)$$

式中 $\mathbf{F}$ 表示电场或磁场, $\mathbf{r}_1$ 和 $\mathbf{r}_2$ 分别表示周期单元左右边界的位置矢量, $t$ 表示时间变量.然而,在斜入射条件下,周期边界条件会包含时间的滞后和超前项,其表达式变为

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}_1, t) = \mathbf{F}(\mathbf{r}_2, t + a \sin \theta / c) \quad (2)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}_2, t) = \mathbf{F}(\mathbf{r}_1, t - a \sin \theta / c) \quad (3)$$

式中 $\theta$ 表示入射角, $a$ 表示周期长度, $c$ 表示光在入射媒质中的传播速度.从式(2)可以得出,周期边界处的场值更新需要用到未来时刻的场值,但是它在计算过程中是未知的.如何解决在斜入射条件下关于时间超前项的场值获取问题是周期结构模拟的关键.

### 1.2 迭代FDTD算法的构造

总场/散射场技术常被用于在垂直入射条件下周期结构的传输特性研究中.典型的算法构造是在总场/散射场边界引入入射电磁波以及式(1)所述周期边界条件的应用.但是在斜入射条件下,由于未来时刻的场值是未知的,所以无法在计算中直接应用式(2)所述的周期边界条件.本文采用的方法是在周期单元的边界上使用特殊的总场/散射场修正,需要注意的是:和传统方法相比,它最大的区别是取代了式(2)所述周期边界条件的应用.接下来介绍本文在斜入射条件下研究周期结构所采用的迭代算法.

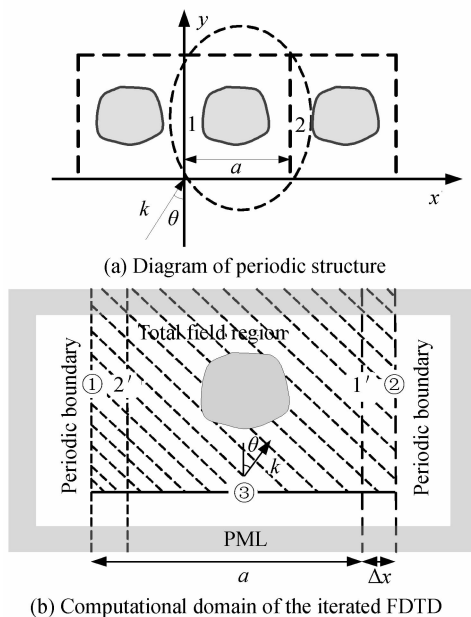


图1 斜入射条件下周期结构的处理  
Fig. 1 Process of periodic structures under the condition of oblique incidence

图1是本方法在斜入射条件下处理周期结构的算法构造图.边界1和2为所计算结构的周期边界,边界1'和2'为计算过程中的辅助边界,在边界3处引入平面电磁波斜入射到该周期单元中,其中总场区域为图中阴影部分. $\Delta x$ 为网格步长,用于分隔辅助边界和总场/散射场边界.这样做的目的是为了更加明确地定义总场区内各种场的修正.本方法是在传统的总场/散射场修正之前在边界1和2处采用了时间步进的边界条件.具体形式可表示为

$$\mathbf{F}_q(\mathbf{r}_1, t) = \mathbf{F}_{q-1}(\mathbf{r}_1', t + \delta t) \quad (4)$$

$$\mathbf{F}_q(\mathbf{r}_2, t) = \mathbf{F}_q(\mathbf{r}_{2'}, t - \delta t) \quad (5)$$

式中  $\delta t = a \sin \theta / c$ , 下标  $q$  表示迭代次数. 它的主要原理是把迭代过程中记录在辅助边界  $1'$  和  $2'$  处的场值通过时间步进的方式分别传输到边界  $1$  和  $2$  处, 然后用于传统的总场/散射场修正计算中. 对于时间超前项, 可以由上一次迭代时记录在  $1'$  处的场值得到. 而对于时间滞后项, 可以由当前迭代时记录在  $2'$  处的场值得到. 为了记录边界  $1$  处的电场和磁场, 需要一个大小为  $6NT/dt$  的内存缓存区, 其中  $T$  表示计算所需的时间,  $dt$  表示计算所采用的时间步长,  $N = N_y \times N_z$  是边界  $1$  处横截面的网格数. 同样在边界  $2$  处也需要一个大小为  $6NT/dt$  的缓存区来记录时滞场. 在  $t < 0$  和  $t > T$  的时刻, 传输场设置为  $\mathbf{F}_q(\mathbf{r}_{1'}, \mathbf{r}_{2'}, t) = 0$ ; 第一次迭代时边界  $1$  和  $2$  靠近总场区域的场值也设置为零. 图 2 是平面电磁波斜入射到真空中的时域场分布图, 从图中可以清晰得观察到整个迭代的过程. 当迭代达到收敛的时候, 靠近边界  $1$  左边区域和边界  $2$  右边区域的散射场变为零.

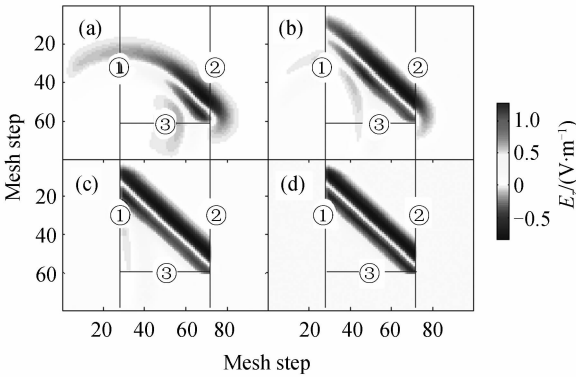


图 2 平面电磁波斜入射条件下的迭代过程. (a)~(d) 分别代表 1~4 次的场分布

Fig. 2 The iterative process of plane electromagnetic wave under the condition of oblique incidence, (a) to (d) represent the first to the fourth iteration respectively

## 2 具体执行过程

这种特殊的总场/散射场修正需要在边界  $1$  和  $2$  处采用时间步进的边界条件, 所以必须在辅助边界  $1'$  和  $2'$  处记录计算过程中产生的场值. 为了执行这个过程, 可以通过在边界  $2'$  处设置 C-缓存区和边界  $1'$  处设置 P-缓存区分别记录当前迭代和先前迭代产生的场值. 由于每一种内存缓存区都只记录自己相应的场值, 因此可以把这些缓存区表示成一系列时序性的空间子区域, 每个空间子区域的大小为  $N = N_y \times N_z$ . C-缓存区所有的空间子区域  $n_c$  只记录  $[t - \delta t, t]$  这段时间内边界  $2'$  处的场值变化, 而 P-缓存区所有的空间子区域  $n_p$  需记录整个迭代过程中边界  $1'$  处的场值变化. 接下来确定  $n_c$  和  $n_p$  的具体数目. 假定用  $k$  表示当前计算所在的时间步, 相应的计算时间为  $t_k = k\Delta t$ . 在每次迭代

过程中, 所有的时间步  $k$  用  $0$  到  $n$  表示,  $n\Delta t = T$  表示整个计算所需的时间. 定义一个整数  $m \geq 0$ , 那么  $\delta t = (m + \tau)\Delta t$ , 其中  $0 \leq \tau < 1$ . 把  $t \pm \delta t$  时刻的场值用  $t_{k \pm m}$  和  $t_{k \pm (m+1)}$  时刻的场值通过线性插值的方式重新表示, 式(4)和式(5)变为

$$\mathbf{F}_q(\mathbf{r}_1, t_k) = (1 - \tau)\mathbf{F}_{q-1}(\mathbf{r}_{1'}, t_{k+m}) + \tau\mathbf{F}_{q-1}(\mathbf{r}_{1'}, t_{k+m+1}) \quad (6)$$

$$\mathbf{F}_q(\mathbf{r}_2, t_k) = (1 - \tau)\mathbf{F}_q(\mathbf{r}_{2'}, t_{k-m}) + \tau\mathbf{F}_q(\mathbf{r}_{2'}, t_{k-m-1}) \quad (7)$$

需要指出, 辅助边界上的场值在  $t < 0$  或  $t > T$  时刻假定为零. C-缓存区的空间子区域总数  $n_c = M + 1$ , 当  $\tau = 0$  时,  $M = m$ ; 当  $0 < \tau < 1$  时,  $M = m + 1$ . P-缓存区的空间子区域总数  $n_p = n + 1$ , 大小和计算所需的总时间不相等. 这些在 C(P)-缓存区的空间子区域被分别按顺序排列成  $0$  到  $n_c - 1$  ( $n_p - 1$ ) 的形式.

### 2.1 C-缓存区的实现过程

C-缓存区只记录当前迭代过程中产生的场值, 当下一次迭代开始时所记录的场值将重新清零. 设定  $i_0 = 0$  是缓存区空间子区域的初始位置, 用  $j = i_0 + k$  表示当前所在的空间子区域, 这时第  $k$  个时间步的场值被记录在边界  $2'$  处. 把缓存区的各个空间子区域排列成如图 3 所示的圆环, 如第  $j - l$  个空间子区域记录的是  $t_{k-l}$  时刻计算得到的场值, 其中  $l$  等于  $0, 1, \dots, M$ . 将  $j - l$  除以  $n_c$  进行取余的操作 (用 mod 表示取余操作), 有

$$(j - M) \bmod n_c = (j - M) \bmod (M + 1) = (j + 1) \bmod n_c \quad (8)$$

$$(j - (M - 1)) \bmod n_c = (j - (M - 1)) \bmod (M + 1) = (j + 2) \bmod n_c \quad (9)$$

可以得出在  $t_{k-M}$  和  $t_{k-(M-1)}$  时刻的场值被分别记录在第  $(j + 1) \bmod n_c$  和第  $(j + 2) \bmod n_c$  个空间子区域中. C-缓存区在算法中第  $k$  个时间步的执行过程遵循以下的步骤: 首先, 把当前迭代的场值  $\mathbf{F}_q(\mathbf{r}_{2'}, t_k)$  记录在 C-缓存区的第  $j$  个空间子区域中, 其中  $j = k \bmod n_c$ . 具体位置可以通过在图 3 中进行旋转操作确定. 然后, 执行基本的 FDTD 场值更新过程. 接下来, 把  $\mathbf{F}_q(\mathbf{r}_{2'}, t_{k-M})$  和  $\mathbf{F}_q(\mathbf{r}_{2'}, t_{k-(M-1)})$  从相应的空间子区域中读取出来, 用于

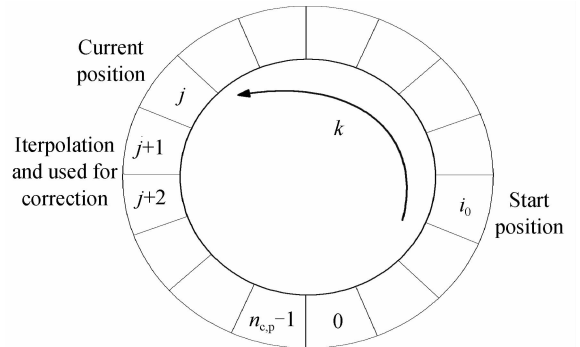


图 3 一系列时序性的空间子区域  
Fig. 3 The time-ordered sequence of space slices

式(7)所述的线性插值计算中得到  $\mathbf{F}_q(\mathbf{r}_2, t_k)$ . 最后, 进行传统的总场/散射场修正计算. 这种方法也可以用于垂直入射条件下周期结构的计算中, 此时这种特殊的修正计算就相当于传统的周期边界条件, 其中时间滞后项  $\delta t=0$ , 空间子区域的总数  $n_c=1$ .

### 2.2 P-缓存区的实现过程

P-缓存区记录的是先前迭代过程中产生的场值, 在第一次迭代开始前对其场值进行清零. 在第  $k$  个时间步, 当前计算产生的场值被记录在边界  $1'$  处的第  $j=i_0+k$  个空间子区域中, 先前记录的数据则会从第  $(j+1) \bmod n_p$  和第  $(j+2) \bmod n_p$  个空间子区域中被读取出来. 在每次迭代过程中, 如图 3 所示以  $i_0$  为初始位置逆时针旋转  $m-1$  个子区域, 通过这种方式的移动保证了第  $(j+1) \bmod n_p$  和第  $(j+2) \bmod n_p$  个空间子区域对应的是先前迭代中  $t_{k+m}$  和  $t_{k+m+1}$  时刻的场值, 用它们来近似代替本次迭代中所需的未来时刻场值. 第一次迭代时设置初始位置  $i_0=0$ , 那么在第  $q$  次迭代的第  $k$  个时间步, P-缓存区的执行过程遵循以下的步骤: 首先, 把当前迭代的场值  $\mathbf{F}_q(\mathbf{r}_1, t_k)$  记录在 P-缓存区的第  $j$  个空间子区域中, 其中  $j=(i_0+k) \bmod n_p$ . 然后, 执行基本的 FDTD 场值更新过程. 接下来, 如果  $k \leq n-m$ , 把上一次迭代中对应的未来时刻场值  $\mathbf{F}_{q-1}(\mathbf{r}_1, t_{k+m})$  和  $\mathbf{F}_{q-1}(\mathbf{r}_1, t_{k+m+1})$  从 P-缓存区的第  $(j+1) \bmod n_p$  和第  $(j+2) \bmod n_p$  个空间子区域中读取出来, 用于式(6)所述的线性插值计算中得到  $\mathbf{F}_q(\mathbf{r}_1, t_k)$ . 如果  $k > n-m$ , 那么它们的场值假定为零. 最后, 进行传统的总场/散射场修正计算. 在每次迭代结束时, 开始位置移动到  $i_0=(m-1)(q-1) \bmod n_p$  处.

### 3 收敛性分析

当场值不再随迭代次数的增加而变化时(这里不再变化指的是两者之差小于定值  $\beta$ ), 可以认为计算达到收敛条件, 即满足

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{q+i}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{E}_q(\mathbf{r}, t) < \beta, \mathbf{H}_{q+i}(\mathbf{r}, t) - \\ \mathbf{H}_q(\mathbf{r}, t) < \beta, i > 0 \end{aligned} \quad (10)$$

一般  $\beta$  根据具体算例所需的准确度确定, 本文分析的三个算例中  $\beta$  取  $10^{-7}$ . 为了提高计算效率, 只需观察某些点在下次迭代时的变化情况, 当达到收敛条件时即可终止计算. 在图 2 内选取几个待测观察点, 如图 4 所示它们的场值之和从第五次迭代后就不再发生变化, 说明计算达到收敛条件.

为了证明收敛的过程, 把边界 1 和边界 2 上的源信号表示成  $\mathbf{F}_q = \mathbf{F}_{\text{conv}} + \delta\mathbf{F}_q$  的形式, 其中  $\mathbf{F}_{\text{conv}}$  代表收敛解,  $\delta\mathbf{F}_q$  代表一些错误信号. 由于麦克斯韦方程组和对场  $\mathbf{F}_q(\mathbf{r}, t)$  进行时移操作都是线性的, 所以在每次迭代过程中, 边界处产生的错误信号  $\delta\mathbf{F}_q$  与  $\mathbf{F}_{\text{conv}}$  认为是可分离的. 任何错误信号在下次迭代过程中都会被重

新返回到边界, 并且幅值会逐渐变小. 假设在  $t=0$  时刻, 在边界 1 处有一些任意的错误信号  $\delta\mathbf{F}_q$ .

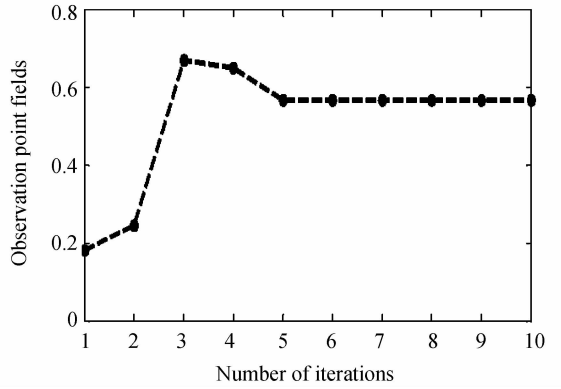


图 4 场值随迭代次数的变化曲线

Fig. 4 Fields of observation points along with the iteration number

首先信号传输到边界  $1'$  处至少需要时间  $\delta t_{11'}$  =  $|r_1' - r_1|/c = a/c$ , 此时在该边界它会被记录下来, 然后用式(4)描述的过程对其进行时移的操作并传输到边界 1 处, 所以总的延迟时间  $\delta t_1 = \delta t_{11'} - \delta t = a(1 - \sin\theta)/c$ , 当  $\theta$  不等于  $90^\circ$  时, 它的值必大于零. 在本次迭代中, 该信号同样会被记录在边界  $2'$  处, 然后用式(5)描述的过程传输到边界 2 处. 由此可知在  $[0, \delta t_1)$  这段时间内, 下一次迭代时错误信号  $\delta\mathbf{F}_{q+1}$  在边界 1 处的值等于零. 同样在边界 2 处, 在小于  $\delta t_2 = a(1 + \sin\theta)/c$  这段时间内错误信号  $\delta\mathbf{F}_{q+1}$  也等于零. 所以在总的计算时间  $T$  内, 在边界 1 和边界 2 处的源信号都将与其包含的错误信号分离(错误信号被延迟了时间  $T$ ). 由于在  $t < 0$  时  $\delta\mathbf{F}_q$  的值等于零, 经过多次迭代之后, 这些等于零的信号就会被移到未来时刻的计算中, 取代那些被延迟的非零信号. 假定计算所需的迭代次数为  $n_{\text{iter}}$ , 当计算达到收敛时有

$$\delta\mathbf{F}_q(t) = 0, \mathbf{F}_q(t) = \mathbf{F}_{\text{conv}}(t), q \geq n_{\text{iter}} \quad (11)$$

在图 4 中, 当迭代次数  $q > 5$  时, 在给定的时间范围内  $\delta\mathbf{F}_q = 0$ . 这就解释了场值不再发生变化的原因. 以上所述中, 假定边界 3 是不产生错误信号的.

其次, 由于在计算空间内的散射和衍射, 一些错误信号没有被边界  $1'$  和边界  $2'$  记录下来, 而是被 PML 所吸收, 所以在下次迭代中没有返回. 这种错误的减少主要取决于所研究结构的特性.

### 4 数值算例及结果分析

通过计算不同周期结构的传输曲线来验证算法的正确性. 入射波采用微分高斯脉冲, 其形式为  $(t-t_0) \cdot \exp[-(\frac{t-t_0}{t_w})^2]$ , 其中参量  $t_0$  和  $t_w$  的选取只需满足所需要的频谱范围.

#### 4.1 二维薄层金板

这里首先分析二维无限长金板的反射系数,网格步长为 4nm,金板的厚度为 40nm,周期长度为 100nm.用 Drude 模型对其介电常量进行拟合,具体表达式为

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} - \frac{\omega_D^2}{\omega^2 - i\omega\gamma_D} \quad (12)$$

其中背景介电常量  $\epsilon_{\infty} = 9.0685$ , 等离子谐振频率  $\omega_D = 1.3544 \times 10^{16}$  rad/s, 损耗频率  $\gamma_D = 1.1536 \times 10^{14}$  rad/s. 用辅助差分方程将金的介电常量表达式离散后应用到 FDTD 算法中<sup>[9]</sup>.

图 5 为入射角等于  $40^\circ$  时金板反射系数随波长的变化曲线. 图 6 为固定波长为 800 nm 时, 反射系数随入射角度的变化曲线. 从图中可以看出本方法计算所得的反射系数和解析计算的结果保持高度一致. 由此可见, 本方法能够很好地对色散周期结构 Drude 模型进行分析, 从而验证了它的正确性和有效性.

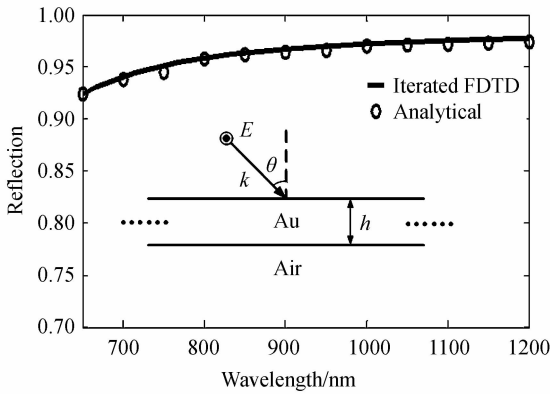


图 5 金板反射系数随波长的变化曲线

Fig. 5 Reflection coefficient of gold plate with the change of wavelength

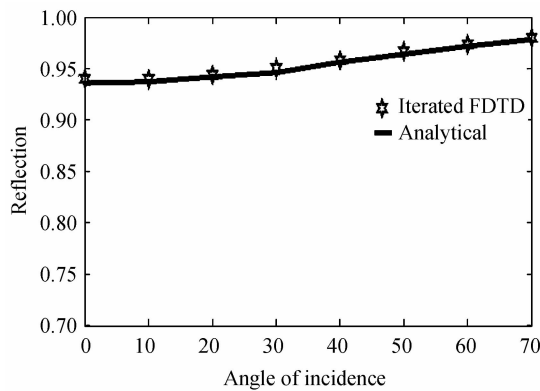


图 6 金板反射系数随入射角度的变化曲线

Fig. 6 Reflection coefficient of gold plate with the change of incident angle

#### 4.2 三维色散 FSS 结构

频率选择表面结构(Frequency Selective Surface, FSS)的主要作用是对电磁波具有频率选择特性即滤波特性. 当周期单元在某一频率谐振时, 电磁波在此频

率会被结构全部反射或透射, 具有较大的应用价值<sup>[10]</sup>. 图 7 为 FSS 结构的一个周期单元, 其中  $x, y$  方向为周期方向, 周期单元长度  $P = 300$  nm,  $z$  方向设置 PML 吸收边界, 网格步长为 5nm. 模型分为上下两层, 其中上层为厚度  $h_1 = 100$  nm 的银层, 用 Drude 模型对其介电常量进行拟合, 其中背景介电常量  $\epsilon_{\infty} = 1$ , 等离子谐振频率  $\omega_D = 1.347 \times 10^{16}$  rad/s, 损耗频率  $\gamma_D = 3.21 \times 10^{13}$  rad/s. 矩形开口的参量  $b_1 = 105$  nm,  $b_2 = 150$  nm. 下层为介电常量  $\epsilon = 2.25$  的玻璃介质. 电磁波的入射方向与  $z$  轴的夹角  $\theta = 20^\circ$ .

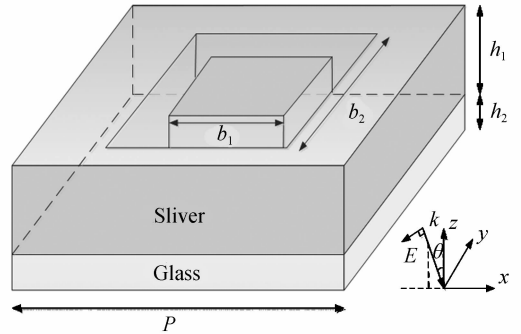


图 7 色散 FSS 结构

Fig. 7 Dispersive FSS structure

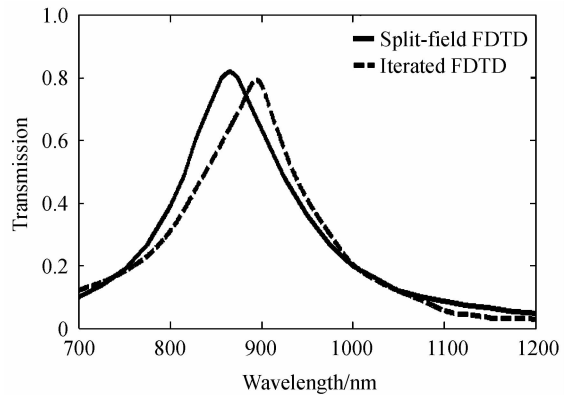


图 8 入射角为  $20^\circ$  时透射系数随波长的变化曲线

Fig. 8 The curve which reflects the relationship between the transmission coefficient of the FSS structure and the wavelength when the incident angle is  $20^\circ$

图 8 是  $\lambda$  射角为  $20^\circ$  时透射系数随波长的变化曲线. 从图 8 可知, 通过本方法计算得到的结果与分裂场 FDTD 结果有着较好的吻合, 关于两者在峰值处的偏差是由于使用迭代算法计算时采用了共形技术<sup>[11]</sup>, 减少了由于阶梯近似带来的计算误差. 算例结果表明该结构在波长为 900 nm 附近时透射效果明显增强, 可以很好地体现出 FSS 结构的选频特性.

#### 4.3 增强透射模型

首先引入一种增强硅表面光透射的结构, 在其表面放置硅纳米圆柱, 并涂上  $\text{Si}_3\text{N}_4$  涂层, 其中硅的介电常量模型来源于参考文献<sup>[12]</sup>. 如图 9 所示,  $x, y$  方向为周期方向, 周期单元长度  $P$  为 450 nm,  $z$  方向设置

PML 吸收边界, 网格步长为 5 nm. 圆柱的直径  $d$  为 250 nm, 高  $h$  为 150 nm,  $\text{Si}_3\text{N}_4$  涂层的厚度为 60 nm. 这种结构会使纳米柱与衬底产生 Mie 共振<sup>[13]</sup>, 在紫外光到近红外光范围内极大地增强光的透射.

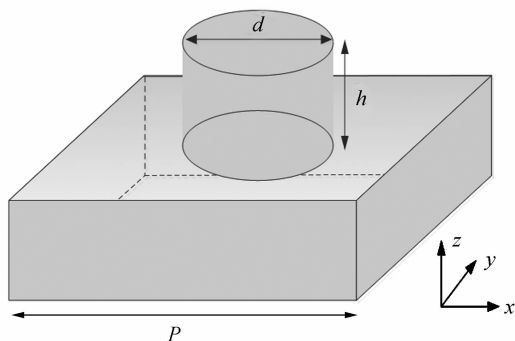
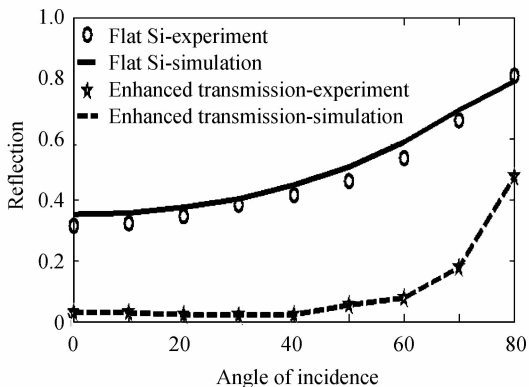


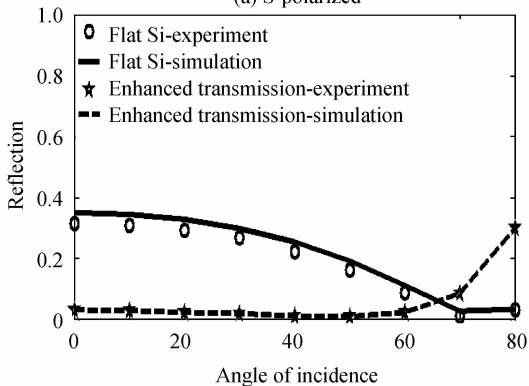
图 9 增强透射的结构模型

Fig. 9 Enhanced transmission structure

图 10 和图 11 分别给出了波长在 632 nm 和 514 nm 时反射系数随入射角度的变化曲线<sup>[14]</sup>. 由本文方法计算得到的结果与实验数据有着较好的吻合. 算例结果表明, 当入射角小于 60° 时, 无论是 S 极化还是 P 极化的入射光, 这种结构相对于普通的硅平板都具有超强的透射特性.



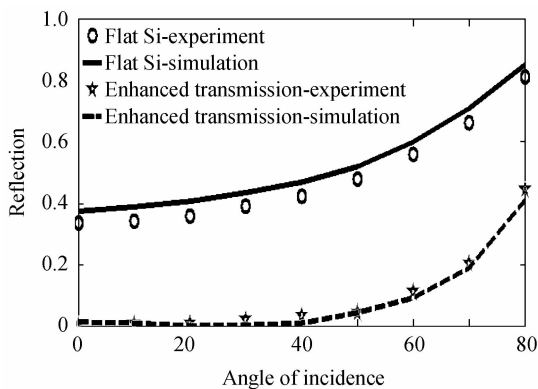
(a) S-polarized



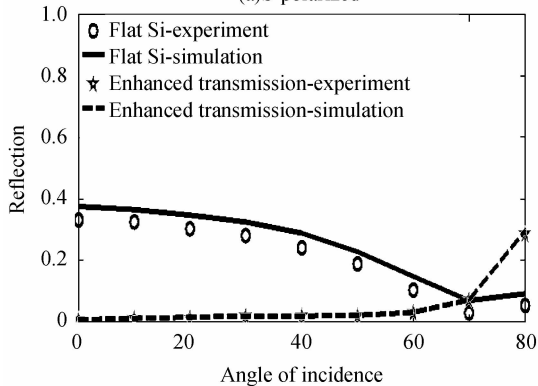
(b) P-polarized

图 10 增强透射模型在波长为 632 nm 时反射系数随入射角度的变化曲线

Fig. 10 Reflection coefficient of transmission enhancement structure with the change of incident angle at a fixed wavelength of 632 nm



(a) S-polarized



(b) P-polarized

图 11 增强透射模型在波长为 514 nm 时反射系数随入射角度的变化曲线

Fig. 11 Reflection coefficient of transmission enhancement structure with the change of incident angle at a fixed wavelength of 514 nm

图 12 是当入射角度为 45° 时反射系数随波长的变化曲线. 从图中可以看出, 当波长在 400 nm 到 1 000 nm 时, 两种极化方式的入射光均表现出了极弱的反射特性. 这种增强透射的模型可为实际太阳能电池的设计提供参考依据.

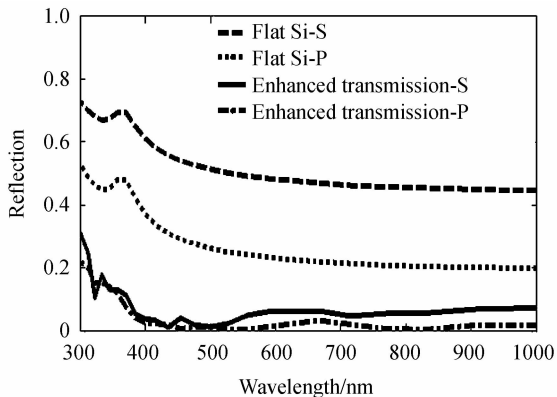


图 12 增强透射模型在入射角度为 45° 时反射系数随波长的变化曲线

Fig. 12 Reflection coefficient of transmission enhancement structure with the change of wavelength at a fixed incident angle of 45°

## 5 结论

介绍了一种在斜入射条件下分析周期结构传输特性的 FDTD 迭代算法. 在每次迭代过程中,本方法利用先前迭代产生的已知场通过时间步进的方式近似代替当前迭代所需的未知场,克服了传统 FDTD 方法在计算周期结构斜入射问题时未来时刻场值无法获取的难题. 此外,和其它处理斜入射的方法相比,这种迭代算法还具有其它许多优势:1)不受入射角度限制,在掠入射条件下具有较高的稳定性;2)能分析色散和各向异性材料的周期结构在斜入射条件下的传输特性,且可获得宽频信息;3)能得到直接的时域场值,观察电磁波在结构内部的演化过程. 当 FDTD 算法与其它时域模型相结合应用时,如等离子体模拟方法(Particle In Cell, PIC)<sup>[15]</sup>,这项优势就显得特别重要. 本文采用的方法编程相对简单,可以方便地嵌入到已有的 FDTD 程序中,为周期结构在斜入射条件下的传输特性研究提供了新的技术支持.

### 参考文献

- [1] WEI Yuan, XIAO Feng, HUANG Zhi-xiang, *et al.* Thin-film solar cell's characteristic with periodic structure based on FDFD method[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2014, **43**(1): 0131001.  
魏源,肖峰,黄志祥,等. 基于 FDFD 方法周期结构的薄膜太阳能电磁特性[J]. *光子学报*, 2014, **43**(1): 0131001.
- [2] TAFLOVE A, HAGNESS S H. Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method [M]. London: Artech House, 2000: 1-10.
- [3] YANG Guang-jie, KONG Fan-min, MEI Liang-mo. Band gaps of photonic crystal composed of metallic cylinders[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2007, **36**(10): 1821-1823.  
杨光杰,孔凡敏,梅良模. 金属光子晶体禁带研究[J]. *光子学报*, 2007, **36**(10): 1821-1823.
- [4] HARMS P, MITTRA R, KO W. Implementation of the periodic boundary condition in the finite-difference time-domain algorithm for FSS structures [J]. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 1994, **42**(9): 1317-1324.
- [5] AMINIAN A, SAMII Y R. Spectral FDTD: A novel technique for the analysis of oblique incident plane wave on periodic structures[J]. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 2006, **54**(6): 1818-1825.
- [6] LU Si-long, WU Xian-liang, HUANG Zhi-xiang, *et al.* Study of periodic dispersive structures using split-field FDTD method [J]. *Acta Physica Sinica*, 2012, **61**(19): 194701.  
鲁思龙,吴先良,黄志祥,等. 色散周期结构的辅助场时域有限差分法[J]. *物理学报*, 2012, **61**(19): 194701.
- [7] VALUEV I, DEINEGA A, BELOUSOV S. Iterative technique for analysis of periodic structures at oblique incidence in the finite-difference time-domain method[J]. *Optics Letters*, 2008, **33**(13): 1491-1493.
- [8] VALUEV I, DEINEGA A, BELOUSOV S. Implementation of the iterative finite-difference time-domain technique for simulation of periodic structures at oblique incidence [J]. *Computer Physics Communications*, 2014, **185**: 1273-1281.
- [9] HUANG Li-fang, CHEN Ming-yang, YU Rong-jin. The auxiliary differential equation method in multiple lorentzian media[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2001, **30**(8): 961-965.  
黄丽芳,陈明阳,于荣金. 多色散媒质中辅助差分方程的分析与研究[J]. *光子学报*. 2001, **30**(8): 961-965.
- [10] FARAHAT N, MITTRA R. Analysis of frequency selective surfaces using the finite difference time domain method[J]. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 2002, **2**(8): 568-571.
- [11] DEINEGA A, VALUEV I. Subpixel smoothing for conductive and dispersive media in the FDTD method[J]. *Optics Letters*, 2007, **32**(23): 3429-3431.
- [12] DEINEGA A, JOHN S. Effective optical response of silicon to sunlight in the finite-difference time-domain method[J]. *Optics Letters*, 2012, **37**(1): 112-114.
- [13] ZHAO Qian, ZHOU Ji, ZHANG Fu-li, *et al.* Mie resonance-based dielectric metamaterials[J]. *Materialstoday*, 2009, **12**(9): 60-69.
- [14] SPINELLI P, VERSCHUUREN M A, POLMAN A. Broadband omnidirectional antireflection coating based on subwavelength surface Mie resonators [J]. *Nature Communications*, 2012, **3**: 1-5.
- [15] TSKHAKAYA D, MATYASH K, SCHNEIDER R, *et al.* The particle-in-cell method [J]. *Contribution to Plasma Physics*, 2007, **47**: 563-594.