



## S4: 层状周期结构的免费电磁求解器<sup>☆</sup>

刘维克多 (Victor Liu)<sup>\*</sup>, 范善辉 (Shanhui Fan)

斯坦福大学电气工程系金兹顿实验室, 斯坦福, CA 94305, 美国

### 文章信息

文章历史: 2011年11月29日收到  
2012年3月15日以修订形式  
收到 2012年4月25日接受 2012  
年5月19日在线提供

关键词: 计算电磁学 麦克斯韦求解器 傅里叶模态法 严格耦合波分析 散射矩阵法

### 抽象的

我们描述了  $S^4$ , 它是傅里叶模态方法 (FMM) 的自由实现, 通常也称为严格耦合波分析 (RCWA), 用于模拟通过具有 2D 周期性的 3D 结构的电磁传播。我们详细介绍了使  $S^4$  成为此类模拟的灵活平台的设计方面。我们特别强调了选择不同 FMM 公式、用户脚本以及本征模计算程序功能的可扩展性的能力。

### 节目概要

程序标题: S4 目录标识符: AEMO\_v1\_0。程序摘要 URL: [http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEMO\\_v1\\_0.html](http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEMO_v1_0.html)  
程序可从: 北爱尔兰贝尔法斯特女王大学 CPC 程序库获取 许可条款: GNU 通用公共许可证, 版本 2 分布式程序中的行数, 包括测试数据等: 56910 分布式程序中的字节数, 包括测试数据等: 433883 分发格式: 编程语言: C、C++。计算机: 任何具有类 Unix 环境和 C++ 编译器的计算机。在 2.3 GHz AMD Phenom 9600 上开发。操作系统: 任何类 Unix 环境; 在 Windows 7 上的 MinGW32 下开发。代码是否矢量化或并行化? : 是。使用 MPI 并行化。RAM: 与问题相关 (与层数成线性正比, 与傅立叶分量数成二次方)。具有大约 100 个傅里叶分量的单层计算大约使用 10 MB。分类: 10. 静电学和电磁学。外部例程: Lua [1], 并可选择利用其他免费软件包: FFTW [2]、CHOLMOD [3]、MPI 消息传递接口 [4]、LAPACK 和 BLAS 线性代数软件 [5] 和 Kiss FFT [6]。问题的性质: 层状双周期结构中的时谐电磁。求解方法: 傅里叶模态法 (严格耦合波分析) 和散射矩阵法。运行时间: 问题依赖且高度依赖 BLAS 实现的质量 (与层数和傅里叶分量数的立方成线性比例)。在使用参考 BLAS 的开发机器上, 具有大约 100 个傅里叶分量的单层计算需要 4 秒。

### 参考

- [1] R. Ierusalimsky, L.H. de Figueiredo, W.C. Filho, Lua — 一种可扩展的扩展语言, 软件: 实践和经验 26 (1996) 635–652. <http://www.lua.org>. [2] FFTW, <http://www.fftw.org>. [3] Y. 陈, T.A. 戴维斯, W.W. Hager 和 S. Rajamanickam, 算法 887: CHOLMOD、超节点稀疏 Cholesky 分解和更新/更新, ACM Trans. 数学. 软件, 卷. 35, 第 3 期, 2009 年. <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/cholmod>.

<sup>☆</sup> This paper and its associated computer program are available via the Computer Physics Communication homepage on ScienceDirect (<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00104655>).

<sup>\*</sup> Correspondence to: Ginzton Laboratory, Nano Building, Mail Code 4088, 348 Via Pueblo Mall, Stanford, CA 94305-4088, USA. Tel.: +1 408 482 6910.  
E-mail addresses: [vk1@stanford.edu](mailto:vk1@stanford.edu), [victorliu@alumni.stanford.edu](mailto:victorliu@alumni.stanford.edu) (V. Liu), [shanhui@stanford.edu](mailto:shanhui@stanford.edu) (S. Fan).

- [4] T.M. Forum, MPI: A Message Passing Interface, in: Supercomputing 93, Portland, OR, 878883, 1993.  
 [5] LAPACK, <http://www.netlib.org/lapack>.  
 [6] Kiss FFT, <http://kissfft.sourceforge.net>.

© 2012 Elsevier B.V. All rights reserved.

## 一、简介

由于平面制造技术，层状光子结构的研究具有重要的实际意义。层状结构的一个重要子集是具有面内周期性的结构，从工程和基础物理学的角度来看，它们代表了一类有趣的设备和系统。图 1 显示了这种结构的示例，该结构在  $xy$  平面上呈周期性，在  $z$  方向上呈分段常数。我们在此介绍斯坦福分层结构求解器 ( $S^4$ )，这是一种频域计算电磁学工具，用于模拟光与此类结构的相互作用。

有多种通用工具可用于计算电磁学 (CEM)，例如时域有限差分 (FDTD) 方法 [1]、频域有限差分 (FDFD) 方法 [2] 和有限元方法 (FEM) [3]，可用于模拟具有二维周期性的三维结构。然而，对于由在垂直于周期性的方向上不变的层组成的特定类别的周期结构，傅里叶模态方法 (FMM) [4]，也称为严格耦合波分析 (RCWA) [5-9] 或散射矩阵方法 (SMM) [10-12]，由于其傅里叶基表示而特别适合。 $S^4$  是 FMM 的一种实现，用于计算层内的模态展开，与散射矩阵 ( $S$  矩阵) 算法 [10,13] 相结合，将各层连接在一起，以求解整个三维结构中的电磁场。

FMM 背后的基本思想是将每层内的电磁场扩展为在法线方向上具有指数依赖性的本征模。在 FMM 的情况下，场和本征模使用周期性平面中的傅里叶基来表示，每个傅里叶分量通过层内的介电分布耦合。然后模态展开系数在层界面处相关，以满足傅里叶基中的场连续性条件。或者，人们可以认为通过层传播的散射矩阵在模态基础上是对角化的，因此每层中完整的本征模式集的知识允许通过组合相邻层的散射矩阵来构造总散射矩阵。我们应该注意到，RCWA 在光栅研究中的使用与另外两种方法密切相关：微分法 [14] 和 C 法 [15]。这两种方法都更适合非层状光栅或本质上不是平面的结构。

最早使用耦合波分析的工作研究全息图的光栅衍射问题，主要涉及单层中正弦变化的介电函数 [5,6,16]。Moharam 和 Gaylord 总结了这些核心原则，详细介绍了原始 RCWA 公式 [7]，随后将其重新公式化为数值稳定的方法 [9]。后来随着计算能力和数值算法的改进，交叉光栅和一般二维周期性结构得到扩展 [8,10]。

一段时间以来，人们注意到，在 TM 偏振下分析金属光栅时，RCWA 和相关模态方法的收敛速度非常慢（相对于所使用的傅里叶级数项的数量）[17]。进一步指出，介电耦合矩阵的简单重构

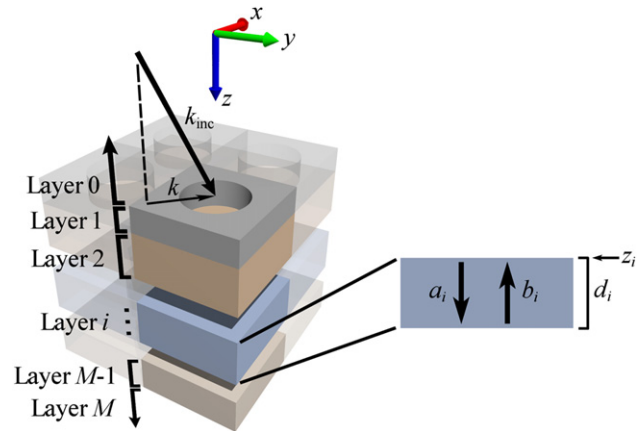


图 1. 左：层堆栈问题表述的示意图。在所示的四个单元格中，突出显示了一个方形单元格。假设入射辐射是波矢为  $k_{inc}$  的平面波，其在  $xy$  平面上的投影为  $k$ 。右：第  $i$  层的横截面示意图。箭头表示前向和后向层模式的传播方向。

可能会导致极其优越的收敛性 [18,19]。1996 年，李发表了他对收敛速度的巨大差异的开创性解释 [20]。问题的核心是界面处法向电场分量和切向电场分量的不同边界条件，需要不同的“傅里叶分解”规则。Li 使用适当的傅里叶分解规则 [4] 对 FMM 进行了重新表述，提高了阶梯离散结构的收敛性，但事实证明计算要求较高，并且不足以对具有平滑介电夹杂物的大类结构进行建模。最近关于快速傅里叶分解 (FFF) 方法的工作 [21-23] 已经能够更有效地应用正确的傅里叶分解规则，但代价是需要了解晶胞内所有点的局部偏振基础。使用 FFF 的 FMM 已使用定制的基础字段 [24-26] 以及自动生成的字段 [27] 进行应用，并且在大幅提高原始方法的准确性方面非常成功。

我们对  $S^4$  的开发包括作者已知的所有公式，但最近使用自适应空间分辨率 (ASR) 的工作除外 [28-30]。尽管 ASR 可用于不同层中图案显着不同的结构 [31]，但其实现很复杂，并且需要将场投影到层接口处的公共基础上，这可能会导致精度损失，也可能违反能量守恒。ASR 的使用超出了我们在本文中提出的统一推导的范围，因此我们选择将  $S^4$  保留为相对简单且通用的 FMM 求解器。 $S^4$  的架构支持快速实验并包含对 FMM 的新扩展，并且使用 ASR 技术对其进行扩展并不困难。

本文的结构如下：第 2 部分描述了问题的几何形状和坐标。第 3 节阐述了单层内平面波麦克斯韦方程组的本征模问题。第 4 节更详细地解释了上面提到的各种公式，并总结了  $S^4$  中的实现。第 5-7 节中的各种解决方案

描述了  $S^4$  的功能以及用户界面。在第 8 节中, 我们简要评论了各种公式的收敛特性。在第 9 节中, 我们将讨论 FMM 在金属结构中的使用。最后我们在第 10 节中总结了  $S^4$  的功能。

## 2. 几何定义

为了便于本文的讨论,坐标系的方向使得  $z$  轴垂直于结构层,并且假设该结构在  $xy$  平面上是周期性的,具有原始晶格向量  $l_1$  和  $l_2$ 。我们将  $xy$  平面中的横坐标集中到向量  $r$  中。每层由  $i$  索引,厚度为  $d_i$ ,从  $z = z_i$  延伸到  $z = z_i + d_i$ ,第 1 层从  $z = z_1 = 0$  延伸到  $z = d_1$ ,第 2 层从  $z = z_2 = d_1$  延伸到  $z = d_1 + d_2$ ,依此类推。结构前面的无限半空间  $z < 0$  表示为第 0 层,结构后面的无限半空间表示为  $M$  层。假设每层在  $z$  方向上不变;也就是说,在第  $i$  层中,空间介电分布  $\epsilon(x, y, z)$  对于固定的  $x$  和  $y$  以及  $z_i < z < z_i + d_i$  是恒定的。

为了确定傅里叶域的倒格，我们首先定义一个实空间本原格向量矩阵，其列为  $\mathbf{l}_1$  和  $\mathbf{l}_2$ ：

$$L_r = \begin{bmatrix} \mathbf{1}_1 & \mathbf{1}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{1x} & l_{2x} \\ l_{1y} & l_{2y} \end{bmatrix}. \quad (1)$$

然后倒格子由以下列定义

$$L_k = 2\pi L_r^{-\top} \quad (2)$$

其中  $^{-T}$  表示逆矩阵的转置。

典型的问题需要解决结构的透射、反射或吸收光谱。在这些情况下, 假设来自第 0 层的入射辐射是沿正  $z$  方向向第 1 层传播的平面波。入射波矢为  $\mathbf{k}_{\text{inc}}$ , 其中面内分量为  $\mathbf{k}$ 。在某些情况下, 需要在结构中嵌入源。在这些情况下, 源是在层  $i-1$  和  $i$  之间指定的空间谐波  $\mathbf{j} \cdot \mathbf{e}^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \delta(z - z_i)$  形式的电流源。

### 3. 层中的麦克斯韦方程组

### 3.1. 单位和约定

我们将采用类似于[10]中使用的推导和符号。起点是时谐形式的麦克斯韦方程组，假设  $\exp(-i\omega t)$  时间依赖性：

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\epsilon_0\epsilon\mathbf{E} \quad \nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu_0\mathbf{H}. \quad (3)$$

为简单起见，我们假设材料是线性且非磁性的。大多数纳米光子学计算都满足这些假设。从现在开始，我们将使用洛伦兹-赫维赛单位，这样光速 $c$ 和真空阻抗 $Z_0 = \sqrt{\mu_0/\epsilon_0}$ 都是统一的（使得 $c$ ， $\mu_0$ 和 $\epsilon_0$ 消失）。这些单位实际上与从 SI 单位开始并缩放  $\sqrt{\mu_0\epsilon_0}\omega_{\text{SI}} \rightarrow \omega$  和  $\sqrt{\mu_0/\epsilon_0}H_{\text{SI}} \rightarrow H$  和  $E_{\text{SI}} \rightarrow E$  相同。单位的这种变化使电场和磁场达到相同的标度，并且使时间和空间频率标度达到相同的标度，从而在实现中提供更好的数值调节并简化符号。在这些新单位中，麦克斯韦方程组变为

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\epsilon\mathbf{E} \quad \nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mathbf{H}. \quad (4)$$

### 3.2.傅立叶变换

下一步是在  $xy$  平面上进行空间傅立叶变换。由于  $z$  轴的周期性和可分离性,

字段必须采用以下形式

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, z) = \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{H}_{\mathbf{G}}(z) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} \quad (5)$$

其中  $\mathbf{k}$  是由激励 (例如, 由入射平面波的入射角) 设置的  $\mathbf{k}$  向量的面内分量,  $\mathbf{G}$  是倒晶格向量 ( $L_k^{-1} \mathbf{G} \in \mathbb{Z}^2$ )。E 也有一个类似的方程。原则上, 模拟时截断为  $\mathbf{G}$  的有限集是 FMM 所需的唯一“离散化”。关于选择一组  $\mathbf{G}$  的最佳方式已经有很多讨论[4]。对于一般晶格, 最好的选择是使用“圆截断”, 其中使用倒易空间中原点周围圆形区域内的所有  $\mathbf{G}$  向量。在  $S^4$  中, 用户仅指定  $\mathbf{G}$  数的上限, 并且自动选择圆形区域。所使用的倒晶格向量的确切数量是根据对称性考虑确定的 (例如, 如果包含  $\mathbf{G}$ , 则也应包含  $-\mathbf{G}$ )。假设已经选择了一组固定的  $\mathbf{G}$  以及排序 (所有层都相同), 用  $h(\mathbf{z})$  表示向量  $[\mathbf{H}_{\mathbf{G}}$

$\epsilon_1(z)$ ,  $H_{G_2}(z)$  和  $\epsilon_2(z)$  的傅立叶变换为

$$\epsilon_G = \frac{1}{|L_r|} \int_{\text{cell}} \epsilon(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (6)$$

其中积分是在晶格的一个晶胞上进行的。一般来说,  $\epsilon$  可以是张量 [23, 32], 但为了简单起见, 我们假设  $z$  轴是可分离的: 即它的形式是

$$\epsilon = \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & 0 \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_z \end{bmatrix}. \quad (7)$$

在这种情况下, 每个分量可以单独进行傅里叶变换, 我们得到五组系数:  $\hat{\epsilon}_{G,xx}$ ,  $\hat{\epsilon}_{G,xy}$ ,  $\hat{\epsilon}_{G,yx}$ ,  $\hat{\epsilon}_{G,yy}$  和  $\hat{\epsilon}_{G,z0}$ 。使用与  $h(z)$  相同的  $G$  排序, 我们可以形成块托普利茨矩阵  $\hat{\epsilon}_{vv}$ , 其  $(m, n)$  个元素定义为

$$\hat{\epsilon}_{xx,mn} = \epsilon_{(\mathbf{G}_m - \mathbf{G}_n),xx}. \quad (8)$$

即,  $\hat{\epsilon}_{xx}$  的  $(m, n)$  项是对应于倒晶格向量  $G_m - G_n$  的傅立叶系数。矩阵  $\hat{\epsilon}_{xy}$ ,  $\hat{\epsilon}_{yx}$ ,  $\hat{\epsilon}_{yy}$  和  $\hat{\epsilon}_z$  的定义类似。通常, 我们将使用帽子符号 ( $\hat{\phantom{x}}$ ) 来指代在  $G$  空间中起作用的方阵运算符。

使用这些定义，我们可以对每个场分量的麦克斯韦方程进行傅立叶变换：

$$i\hat{k}_y h_z(z) - h'_v(z) = -i\omega d_x(z) \quad (9)$$

$$h'_v(z) - i\hat{k}_x h_z(z) = -i\omega d_v(z) \quad (10)$$

$$i\hat{k}_x h_y(z) - i\hat{k}_y h_x(z) = -i\omega \hat{\epsilon}_z e_z(z) \quad (11)$$

$$i\hat{k}_y e_z(z) - e'_v(z) = i\omega h_x(z) \quad (12)$$

$$e'_v(z) - i\hat{k}_x e_z(z) = i\omega h_v(z) \quad (13)$$

$$i\hat{k}_ye_y(z) - i\hat{k}_ve_x(z) = i\omega h_z(z) \quad (14)$$

其中素数表示相对于  $z$  的微分,  $\hat{k}_x$  是一个对角矩阵, 其条目为  $(k_x + G_{1x}, k_x + G_{2x}, \dots)$ , 类似地对于  $\hat{k}_{y_0}$ 。最后两个方程包含  $d_x$  和  $d_y$ , 它们是位移场  $D$  的傅里叶系数。为了获得一组封闭方程, 我们需要将位移场  $d_x$  和  $d_y$  与电场  $e_x$  和  $e_y$  联系起来。事实证明, 由于需要应用适当的傅立叶分解规则, 同时考虑到  $\epsilon$  和  $E$  中的不连续性, 因此这一点很微妙。现在我们假设存在一个矩阵  $\epsilon$  使得

$$\begin{bmatrix} -d_y(z) \\ d_x(z) \end{bmatrix} = \mathcal{E} \begin{bmatrix} -e_y(z) \\ e_x(z) \end{bmatrix}. \quad (15)$$

正如我们将在第 4 节中看到的，不同的公式以不同的方式计算  $\mathcal{E}$ ，但它们都采用上述形式。

使用方程式消除  $z$  分量。(11)，等式。(12) 和 (13)

$$-\hat{k}_y \hat{\epsilon}_z^{-1} \hat{k}_x h_y(z) + \hat{k}_y \hat{\epsilon}_z^{-1} \hat{k}_y h_x(z) + i\omega e'_y(z) = \omega^2 h_x(z) \quad (16)$$

$$-i\omega e'_x(z) + \hat{k}_x \hat{\epsilon}_z^{-1} \hat{k}_x h_y(z) - \hat{k}_x \hat{\epsilon}_z^{-1} \hat{k}_y h_x(z) = \omega^2 h_y(z) \quad (17)$$

或矩阵形式

$$(\omega^2 I - \mathcal{K}) \begin{bmatrix} h_x(z) \\ h_y(z) \end{bmatrix} = -i\omega \begin{bmatrix} -e'_y(z) \\ e'_x(z) \end{bmatrix} \quad (18)$$

$$\mathcal{K} = \begin{bmatrix} \hat{k}_y \hat{\epsilon}_z^{-1} \hat{k}_y & -\hat{k}_y \hat{\epsilon}_z^{-1} \hat{k}_x \\ -\hat{k}_x \hat{\epsilon}_z^{-1} \hat{k}_y & \hat{k}_x \hat{\epsilon}_z^{-1} \hat{k}_x \end{bmatrix} \quad (19)$$

其中  $I$  是适当维度的单位矩阵。类似地，使用方程消除  $z$  分量。(14)，等式。(9) 和 (10) 变为

$$i\omega h'_x(z) + \hat{k}_x \hat{k}_x e_y(z) - \hat{k}_x \hat{k}_y e_x(z) = \omega^2 d_y(z) \quad (20)$$

$$-\hat{k}_y \hat{k}_x e_y(z) + \hat{k}_y \hat{k}_y e_x(z) - i\omega h'_y(z) = \omega^2 d_x(z) \quad (21)$$

which can be written as

$$(\omega^2 \mathcal{E} - K) \begin{bmatrix} -e_y(z) \\ e_x(z) \end{bmatrix} = -i\omega \begin{bmatrix} h'_x(z) \\ h'_y(z) \end{bmatrix} \quad (22)$$

$$K = \begin{bmatrix} \hat{k}_x \hat{k}_x & \hat{k}_x \hat{k}_y \\ \hat{k}_y \hat{k}_x & \hat{k}_y \hat{k}_y \end{bmatrix}. \quad (23)$$

因此，原始麦克斯韦方程组简化为方程组。(18) 和 (22)。

### 3.3. 层本征模

FMM 背后的基本思想是将层内的场扩展到本征模，这些本征模对某些复数  $q$  具有简单的  $\exp(iqz)$  依赖关系。我们假设磁场本征模的形式是

$$\mathbf{H}(z) = \sum_{\mathbf{G}} \left[ \phi_{\mathbf{G},x} \mathbf{x} + \phi_{\mathbf{G},y} \mathbf{y} - \frac{(k_x + G_x) \phi_{\mathbf{G},x} + (k_y + G_y) \phi_{\mathbf{G},y}}{q} \mathbf{z} \right] e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r} + iqz} \quad (24)$$

其中  $x, y$  和  $z$  是笛卡尔单位向量， $\phi_{\mathbf{G},x}$  和  $\phi_{\mathbf{G},y}$  是展开系数。这些展开系数可以写为向量  $\phi_x = [\phi_{\mathbf{G}_1,x}, \phi_{\mathbf{G}_2,x}, \dots]^T$ ，并且类似地对于  $\phi_y$ 。然后我们有

$$h(z) = [\phi_x \mathbf{x} + \phi_y \mathbf{y} - q^{-1}(\hat{k}_x \phi_x + \hat{k}_y \phi_y) \mathbf{z}] e^{iqz} \quad (25)$$

其中  $h(z)$  是列向量，其元素对应于  $\mathbf{G}$  向量。有了这个，并使用等式。(18) 和 (22)，上面的麦克斯韦方程组变为

$$(\omega^2 I - \mathcal{K}) \begin{bmatrix} \phi_x \\ \phi_y \end{bmatrix} = \omega q \begin{bmatrix} -e_y \\ e_x \end{bmatrix} \quad (26)$$

$$\omega q \begin{bmatrix} \phi_x \\ \phi_y \end{bmatrix} = (\omega^2 \mathcal{E} - K) \begin{bmatrix} -e_y \\ e_x \end{bmatrix} \quad (27)$$

其中我们放弃了  $z$  对  $e_x$  和  $e_y$  的依赖，以表示具有  $\exp(iqz)$  变化的固定模式。消除电场并利用  $\mathcal{K}K = 0$  的事实，

$$(\mathcal{E}(\omega^2 - \mathcal{K}) - K) \Phi = \Phi q^2 \quad \Phi = \begin{bmatrix} \phi_x \\ \phi_y \end{bmatrix} \quad (28)$$

其中  $q^2$  是对角矩阵，其对角元素是特征值  $q_n^2$ 。方阵  $\Phi$  的列是  $[\phi_{x,n}, \phi_{y,n}]^T$ ，即本征模态的傅立叶系数。

特征值方程的求解占据了大部分计算时间，并使用 Lapack [33] 进行求解。人们可以直接看到特征值问题的规模为  $N$ ，即  $\mathbf{G}$  的数量。因此，整个模拟的存储需求规模为  $O(MN^2)$ ，其中  $M$  是层数。如果输出计算不需要某些中间层相关矩阵，则可以减少这种情况，从而使所需的存储空间与必须计算字段的层数成正比 [13]。然而， $S^4$  并没有进行这种优化，以允许更灵活的编程接口。特征值问题的解决方案占据了计算时间，并且使用 QR 算法的标准变体需要  $O(N^3)$  次运算 [34]。因此，单个模拟的总运行时间为  $O(MN^3)$ 。

### 3.4. 现场恢复

使用通过求解方程确定的本征模基。(28) 则第  $i$  层的横向磁场可表示为

$$\begin{bmatrix} h_x(z) \\ h_y(z) \end{bmatrix} = \sum_n \begin{bmatrix} \phi_{x,n} \\ \phi_{y,n} \end{bmatrix} (a_n e^{iq_n z} + b_n e^{iq_n(d_i - z)}) \quad (29)$$

其中  $n$  表示本征模态， $a_n$  是  $z = z_i$  处向前传播波（朝向正  $z$ ）的系数， $b_n$  是  $z = z_i + d_i$  处向后传播波的系数。对于  $q = \pm \sqrt{q^2}$  有两种选择，具体取决于所选的符号。为了数值稳定性，选择符号使得  $\text{Im } q \geq 0$ ，以便系数是层内的最大幅度。现在让我们定义一个带有条目的对角矩阵运算符  $f(z)$

$$f(z)_{nm} = e^{iq_n z} \quad (30)$$

它代表模态相位累加算子。我们还定义傅立叶基中的横向场分量向量：

$$h_t(z) = [h_x(z), h_y(z)]^T \quad (31)$$

$$e_t(z) = [-e_y(z), e_x(z)]^T, \quad (32)$$

以及前向和后向波的模式幅度矢量：

$$a = [a_1, a_2, \dots]^T \quad (33)$$

$$b = [b_1, b_2, \dots]^T. \quad (34)$$

通过这些定义，我们可以将模式幅度与物理场联系起来：

$$\begin{bmatrix} e_t(z) \\ h_t(z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\omega^2 I - \mathcal{K}) \Phi q^{-1} & -(\omega^2 I - \mathcal{K}) \Phi q^{-1} \\ \Phi & \Phi \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} f(z)a \\ f(d-z)b \end{bmatrix}. \quad (35)$$

请注意方程中的模式分解。(35) 不依赖于任何正交关系；将场分解为模式幅度，即方程中矩阵的逆。必须使用 (35)。场的  $z$  分量可以使用等式恢复。(11) 和 (14)。

解决方案的下一阶段涉及形成层  $S$  矩阵，并从每层的  $S$  矩阵构造总  $S$  矩阵。这里不会重复每个步骤的细节，因为我们的实现非常严格地遵循 [10]。需要注意的一项特别优化是，许多层通常具有相同的介电剖面。 $S^4$  允许用户复制层以避免冗余模态计算。

#### 4. FMM 公式

上一节通过矩阵  $\mathcal{E}$  将位移场  $d_x$  和  $d_y$  的傅里叶分量与电场  $e_x$  和  $e_y$  的傅里叶分量联系起来，但没有描述它是如何计算的。事实上，引言中提到的 RCWA 和 FMM 的所有各种重新表述都只是简化为  $\mathcal{E}$  的不同定义。

在单个软件包中实施多种 FMM 公式有多种原因。拥有多种公式是有益的，因为某些公式可能更适用或对某些类型的问题产生更好的结果。在这里，我们提供了  $S^4$  中实现的 FMM 各种公式的概述和最终总结。

##### 4.1. 闭式傅立叶变换

对于许多感兴趣的问题，可以使用简单的几何形状以非离散方式指定每层中的介电常数分布，其中介电常数被假定为常数。几乎所有工程结构都属于此类分段常数介电函数，并且其他结构可以使用分段常数函数很好地近似。这里的重要思想是，形状是精确指定的，而不是最初离散化为像素（它们是由“矢量”路径而不是“位图”指定的）。为了以后使用，我们将形状的指示函数定义为形状内部值为 1，否则为 0。每个允许的形状都允许其各自指示函数的闭合形式傅里叶变换：矩形、圆形、椭圆形和任何简单的闭合（不一定是凸）多边形[35]。

尽管只有少数形状可以使用有效的封闭形式方程进行傅立叶变换，但它们在指定大多数感兴趣的结构方面具有很大的灵活性，并且包含多边形允许将任意结构近似到任何所需的精度。请注意，在指定介电常数的模型中，形状不能彼此相交。形状必须完全包含在另一个形状内，或者它们的内部必须是不相交的。考虑到这些因素，我们将介电常数正式表示为

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon_b + \sum_j (\epsilon_j - \epsilon_{\supset j}) I_j(\mathbf{r}) \quad (36)$$

其中总和是所有形状的总和， $\epsilon_b$  是背景介电常数（在没有任何图案的情况下）， $\epsilon_j$  是第  $j$  个形状内的介电常数， $I_j$  是第  $j$  个形状的指示函数。如图 2 所示， $\epsilon_{\supset j}$  是直接包含形状  $j$  的形状的介电常数。方程的傅立叶变换然后，(36) 就变成了指示函数的缩放傅立叶变换的简单求和。

$S^4$  中最基本的 FMM 公式使用

$$\mathcal{E} = \begin{bmatrix} \hat{\epsilon}_{xx} & \hat{\epsilon}_{xy} \\ \hat{\epsilon}_{yx} & \hat{\epsilon}_{yy} \end{bmatrix} \quad (37)$$

其中  $\hat{\epsilon}$  使用等式计算。(8)使用封闭形式变换。该公式与标量情况下的经典公式[7,10]相同，并且扩展了[11]中的双折射模型。请注意，该公式没有使用正确的傅立叶分解规则，如第 4.4 节中讨论的那样，如果解电场具有垂直于面内材料界面的显著分量，则可能会出现收敛不良（相对于使用的  $G$  数量）。

##### 4.2. 快速傅立叶变换

使用上一节中描述的封闭式傅里叶变换的一个简单替代方法是离散化介电常数

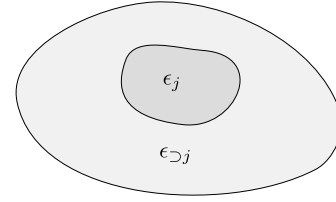


图 2. 指定层内介电常数时形状包含约束的图示。形状必须完全包含在另一个形状内并且不能相交。

将常数放到网格上并应用快速傅里叶变换 (FFT) 来近似  $\epsilon$  的傅里叶级数系数。随着封闭式傅里叶变换的可用性，这种方法通常没有优势，因为如果在材料边界上使用简单的阶梯，它的精度和速度都会较差。然而，这种方法对于结构优化很有用，因为在网格上参数化介电函数通常比将一组形状轮廓的组合更简单。当使用形状指定几何形状时， $S^4$  中的离散化方法会计算与每个形状的精确像素重叠区域，以避免阶梯效应。

##### 4.3. 子像素各向异性平均

与 FFT 离散化密切相关的是使用每个离散化像素内介电函数的子像素平均来计算各向异性介电常数张量的方法。该技术最初源自介电界面的微扰理论，并已成功应用于离散电磁模拟[36]。子像素平均广泛应用于时代代码 Meep [37] 以及模式求解器代码 MPB [38]。我们为每一层实现了 2D 子像素各向异性平均。然后使用快速傅里叶变换获得每层面内介电函数的傅里叶级数系数。据我们所知，亚像素平均在 FMM 中的应用尚未在文献中报道，我们将在第 8 节中讨论该方法的收敛行为。

##### 4.4. 基于矢量场的公式

Li 在[20]中提出的傅里叶分解规则规定，平行于材料界面的位移和电场分量的傅里叶系数应与洛朗规则相关：

$$d_{\parallel} = \hat{\epsilon} e_{\parallel} \quad (38)$$

其中  $\hat{\epsilon}$  是方程 1 给出的  $\epsilon$  的傅立叶分量矩阵。(8)并在下面的等式中重复。(41)。相反，正常于接口的组件应该通过相反的规则相关：

$$e_{\perp} = \hat{\eta} d_{\perp} \quad (39)$$

其中  $\hat{\eta}$  的定义与  $\hat{\epsilon}$  类似，不同之处在于等式 1 中的情况除外。(6)对  $\eta = \epsilon^{-1}$  的空间分布进行傅立叶变换。

在 Li [4] 对 FMM 的重构中，使用适当的傅里叶分解规则获得的  $\mathcal{E}$  表达式涉及 Toeplitz 矩阵逆的多个一维傅里叶变换，这使得其实现既困难又耗时。他的公式固有的是一种有效的阶梯效应，这种效应是通过在主晶格方向上进行一维变换而产生的。很快就开发出了通过使用在整个晶胞上定义的法向量场来缓解这些困难的方法，称为快速傅里叶分解 (FFF) [23]。我们简单概述一下细节

由于 $S^4$ 实现了三种不同的FFF方法，因此在这些方法下计算 $\mathcal{E}$ 的次数。

为了简单起见，我们将在本节中假设标量 $\epsilon$ （对于张量 $\epsilon$ ， $S^4$ 目前不执行正确的傅立叶分解）。FMM的原始公式在计算 $d_x$ 和 $d_y$ 时未执行正确的傅立叶分解。大多数公式[7,10]直接使用洛朗法则：

$$\begin{bmatrix} -d_y \\ d_x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\epsilon} & \\ & \hat{\epsilon} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -e_y \\ e_x \end{bmatrix}. \quad (40)$$

回想一下， $\hat{\epsilon}$ 被定义为傅立叶卷积矩阵，其矩阵元素定义为

$$\hat{\epsilon}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = \frac{1}{|L_r|} \int_{\text{cell}} \epsilon(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{G}-\mathbf{G}') \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}. \quad (41)$$

在本节的其余部分中，我们将采用帽子 $\hat{\cdot}$ 符号的这个含义。

为了有效地模拟TM偏振中的一维金属光栅，参考文献。[18,19]使用逆规则：

$$e_x = \widehat{\epsilon^{-1}} d_x \quad (42)$$

其中 $\widehat{\epsilon^{-1}}$ 表示 $\epsilon^{-1}$ （的傅里叶变换，即先在实空间中进行逐点逆，然后再进行傅里叶变换）。将这些规则正确应用到沿 $x$ 方向具有一维周期性的结构需要

$$\begin{bmatrix} -d_y \\ d_x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\epsilon} & \\ & (\widehat{\epsilon^{-1}})^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -e_y \\ e_x \end{bmatrix}. \quad (43)$$

对于仅具有一维周期性的结构实施适当的规则是很简单的，但是对于一般的二维周期性而言，这会失败，因为两个空间维度不再可分离。

正确的傅立叶分解需要将 $E$ 场分解为垂直于材料界面和与材料界面相切的分量。假设我们有一个平滑（可能是复数）矢量场 $\mathbf{t} = [t_x, t_y]^T$ ，它是周期性的并且与晶胞内的所有材料界面相切。如参考文献中所示。[23]，然后我们可以执行从场的 $x$ 和 $y$ 分量到由 $\mathbf{t}$ 向量局部定义的坐标系的坐标转换。在材料界面处，切向和法向分量由下式给出

$$\begin{bmatrix} E_t \\ E_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_x & -t_y^* \\ t_y & t_x^* \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} \quad (44)$$

其中 $*$ 表示复共轭（因此这适用于一般复 $\mathbf{t}$ 场）。因此，为了关联实空间中的 $D$ 场和 $E$ 场，

$$\begin{bmatrix} -D_y \\ D_x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_y & t_x^* \\ -t_x & t_y^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon & \\ & \eta^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_y & t_x^* \\ -t_x & t_y^* \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} -E_y \\ E_x \end{bmatrix} \quad (45)$$

$$= T \begin{bmatrix} \epsilon & \\ & \eta^{-1} \end{bmatrix} T^{-1} \begin{bmatrix} -E_y \\ E_x \end{bmatrix} \quad (46)$$

在真实空间中的哪个地方 $\epsilon = \eta^{-1}$ 。当对这些方程进行傅里叶变换时应用逆规则时，这种区别很重要。

有很多方法可以实现等式。(46)在傅里叶空间中，我们在下面概述两个。作为第一个例子，我们可以定义

$$\mathcal{E}_1 = \widehat{T} \begin{bmatrix} \hat{\epsilon} & \\ & \hat{\eta}^{-1} \end{bmatrix} \widehat{T}^{-1} \quad (47)$$

其中 $\widehat{T}^{-1}$ 表示应在空间域中取逆，然后进行傅里叶变换（可以理解， $\widehat{T}$ 和 $\widehat{T}^{-1}$ 的傅里叶变换分别应用于每个

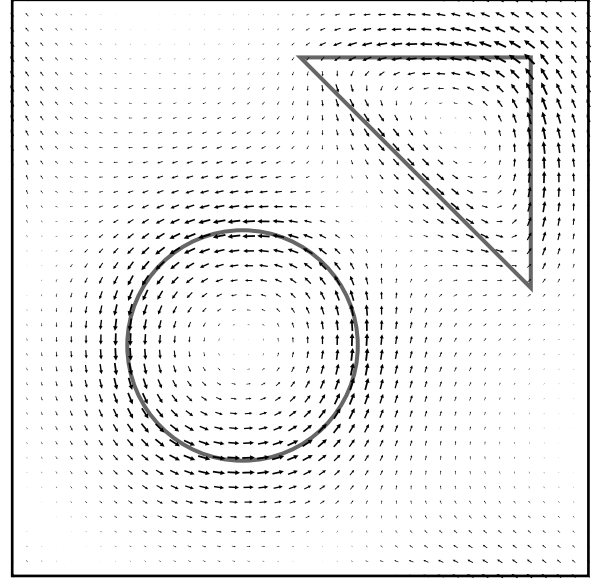


图3. 针对包含两个包含物（一个圆形和一个三角形）的方形晶胞自动生成的 $\mathbf{t}$ 矢量场示例。请注意与内含物边界的良好场对准。

这些矩阵的四个块）。注意，这里 $\hat{\eta}^{-1}$ 是指 $\epsilon^{-1}$ 分布的傅里叶系数矩阵的逆，而 $\hat{\epsilon}$ 是由 $\epsilon$ 分布的傅里叶系数组成。

或者，我们可以等待进行傅立叶变换并简化方程。(45)到

$$\begin{bmatrix} -D_y \\ D_x \end{bmatrix} = \frac{1}{|t_x|^2 + |t_y|^2} \begin{bmatrix} |t_x|^2 \epsilon + |t_y|^2 \eta^{-1} & t_x^* t_y (\eta^{-1} - \epsilon) \\ t_x t_y^* (\eta^{-1} - \epsilon) & |t_x|^2 \eta^{-1} + |t_y|^2 \epsilon \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} -E_y \\ E_x \end{bmatrix}. \quad (48)$$

表示 $\Delta = \epsilon - \eta^{-1}$ ,

$$\begin{bmatrix} -D_y \\ D_x \end{bmatrix} = \left\{ \begin{bmatrix} \epsilon & \\ & \epsilon \end{bmatrix} - \frac{1}{|t_x|^2 + |t_y|^2} \begin{bmatrix} \Delta & \\ & \Delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |t_y|^2 & t_x^* t_y \\ t_x t_y^* & |t_x|^2 \end{bmatrix} \right\} \times \begin{bmatrix} -E_y \\ E_x \end{bmatrix} \quad (49)$$

$$= \left\{ \begin{bmatrix} \epsilon & \\ & \epsilon \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \Delta & \\ & \Delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{yy} & p_{yx} \\ p_{xy} & p_{xx} \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} -E_y \\ E_x \end{bmatrix}. \quad (50)$$

傅里叶变换，我们得到

$$\mathcal{E}_2 = \begin{bmatrix} \hat{\epsilon} & \\ & \hat{\epsilon} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \hat{\Delta} & \\ & \hat{\Delta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{p}_{yy} & \hat{p}_{yx} \\ \hat{p}_{xy} & \hat{p}_{xx} \end{bmatrix}, \quad (51)$$

这可以被视为对洛朗规则的天真的应用的修正。

$\mathcal{E}_1$ 和 $\mathcal{E}_2$ 都已在文献中使用。在实现任一方法时，都需要生成一个 $\mathbf{t}$ 字段。一个光滑且局部与闭合曲线边缘相切的真实 $\mathbf{t}$ 场必须在内部某处具有零值。从图3中我们可以看出，例如，对于圆形夹杂物，场在圆中心附近消失。因此，选择 $\mathbf{t}$ 场会更加复杂，因为方程的分母为：

(48)消失。下面我们总结了我们在 $S^4$ 中实现的各种方法。

#### 4.4.1. 矢量场生成

$S^4$  中的  $t$  字段生成是全自动的。先前的研究采用静电势或共形映射 [25] 和数值梯度插值 [27] 自动矢量场生成。共形映射和梯度插值技术可能会产生不连续性，并且往往会生成低质量的矢量场。相比之下， $S^4$  使用一种非常简单而严格的方法，通过最小化能量泛函，同时在全局最小二乘意义上强制切向量约束 [39]。这种方法能够为非常复杂的图案生成高质量的一致字段。图 3 显示了使用该方法完全自动生成的矢量场的示例。请注意，这些场是在单位单元上的网格上生成的，并且离散采样的场使用 FFT 进行傅里叶变换。 $S^4$  中不同公式所需的所有向量场都是通过此方法生成的。

#### 4.5. 实现算法总结

$S^4$  实现了六种不同的 FMM 公式，下面列出了这些公式以及稍后部分将使用的缩写名称。

1. 闭合：等式。(37) 直接应用于层形状图案的闭合形式傅里叶变换。这对应于最早的 FMM 公式。2. FFT：层形状图案的傅里叶变换是通过 FFT 和方程计算的。(37) 用于计算  $\mathcal{E}$  矩阵。3. 子像素：首先在离散晶胞上计算介电函数的各向异性平均值，然后使用 FFT 来应用方程：(37)。

4. 法线：使用参考文献中的方法在离散晶胞上生成矢量场  $t$ 。[39]，并在每个离散点归一化为单位长度。等式。(51) 应用于在同一离散网格上采样的层形状图案的 FFT。该公式对应于参考文献。[25]。在  $t$  场消失的位置，归一化是未定义的，导致场不连续，因此等式中  $\hat{p}$  的分量不连续。(51) 收敛缓慢。

5. 琼斯：在离散晶胞上生成切向量场  $t$ ，并使用以下公式计算琼斯向量场  $J$ ：

$$J = \frac{e^{i\theta}}{|t|} \begin{bmatrix} t & t^\perp \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \varphi & i \sin \varphi \end{bmatrix} \quad (52)$$

其中  $t$  被统一缩放为具有单位最大长度， $t^\perp = [-t_y, t_x]^T$ ， $\theta = \angle$ （向量相对于  $x$  轴的角度），而  $\varphi = \frac{\pi}{8} (1 + \cos \pi |t|)$  是在整个晶胞上定义的标量场。等式。然后使用  $J$  而不是  $t$  将等式 (47) 应用于层形状图案的 FFT。这是参考文献中描述的方法的概括。[26]。

6. Pol：矢量场  $t$  在离散晶胞上生成并统一缩放，因此最大长度为 1。等式。(51) 应用于在同一离散网格上采样的层形状图案的 FFT。该方法是  $S^4$  原创的。

#### 5. 输出计算

$S$  矩阵算法允许计算层内任何  $z$  偏移处任何层内的模式幅度。为了获得物理上有意义的场，方程。(35) 用于恢复四个横向场分量。这相当于对横向场分量执行傅里叶逆变换。等式。然后可以使用 (11) 和 (14) 来恢复正常分量。

原则上，空间中任意点的场都可以通过这种方式计算，并且诸如功率之类的量

通量可以逐点进行数值积分，对于某些常见的计算，在傅里叶空间中执行计算效率要高得多。

#### 5.1. 功率通量

到目前为止，最常用的程序输出是通过与各层平行的平面的功率通量。这用于透射、反射和吸收计算，以及衍射（如果针对每个  $G$  分量单独计算的话）。时间平均坡印廷向量定义为

$$S = \frac{1}{2} \text{Re} (E \times H^*) . \quad (53)$$

将右侧转换为傅立叶基，通过晶胞的时间平均功率通量的  $z$  分量为

$$2S_z = \begin{bmatrix} e_t(z) \\ h_t(z) \end{bmatrix}^\dagger \begin{bmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_t(z) \\ h_t(z) \end{bmatrix} \quad (54)$$

其中  $e_t$  和  $h_t$  在等式中定义。(31)和(32)以及上标( $\dagger$ )表示共轭转置。我们知道这些场是横向场并且位于相同的  $z$  坐标，并且我们在符号中抑制它。我们现在将其分解为前向和后向组件：

$$2S_z^{\text{forw}} = \begin{bmatrix} e \\ h \end{bmatrix}_{\text{total}}^\dagger \begin{bmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e \\ h \end{bmatrix}_{\text{forw}} \quad (55)$$

$$2S_z^{\text{back}} = \begin{bmatrix} e \\ h \end{bmatrix}_{\text{total}}^\dagger \begin{bmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e \\ h \end{bmatrix}_{\text{back}} \quad (56)$$

其中  $e$  和  $h$  的前向和后向分量分别通过仅使用式 (1) 中的  $a$  或  $b$  来获得。(35) 并将另一个设置为零，而总下标意味着  $a$  和  $b$  通常都非零。扩大，

$$2S_z^{\text{forw}} = e_{\text{total}}^\dagger h_{\text{forw}} + h_{\text{total}}^\dagger e_{\text{forw}} \quad (57)$$

$$2S_z^{\text{back}} = e_{\text{total}}^\dagger h_{\text{back}} + h_{\text{total}}^\dagger e_{\text{back}} . \quad (58)$$

使用方程中矩阵的块元素。(35)，

$$2S_z^{\text{forw}} = \begin{bmatrix} B\Phi(\omega q)^{-1}(a-b) \end{bmatrix}^\dagger \begin{bmatrix} \Phi a \\ \Phi(a+b) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi a \\ B\Phi(\omega q)^{-1}a \end{bmatrix} \quad (59)$$

$$2S_z^{\text{back}} = \begin{bmatrix} B\Phi(\omega q)^{-1}(a-b) \end{bmatrix}^\dagger \begin{bmatrix} \Phi b \\ \Phi(a+b) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi b \\ -B\Phi(\omega q)^{-1}b \end{bmatrix} \quad (60)$$

where  $B = \omega^2 I - \mathcal{K}$ . Letting  $A = B\Phi(\omega q)^{-1}$  and simplifying,

$$2S_z^{\text{forw}} = (a^\dagger A^\dagger \Phi a + a^\dagger \Phi^\dagger A a) + (b^\dagger \Phi^\dagger A a - b^\dagger A^\dagger \Phi a) \quad (61)$$

$$2S_z^{\text{back}} = -(b^\dagger A^\dagger \Phi b + b^\dagger \Phi^\dagger A b) - (a^\dagger \Phi^\dagger A b - a^\dagger A^\dagger \Phi b) . \quad (62)$$

在计算上，我们预先计算中间体  $\alpha = \Phi^\dagger A a$  和  $\beta = \Phi^\dagger A b$ ,

$$2S_z^{\text{forw}} = (\alpha^\dagger a + a^\dagger \alpha) + (b^\dagger \alpha - \beta^\dagger a) \quad (63)$$

$$2S_z^{\text{back}} = -(\beta^\dagger b + b^\dagger \beta) + (b^\dagger \alpha - \beta^\dagger a)^* . \quad (64)$$

我们类似地将单个衍射级（由  $i$  索引）的功率通量定义为

$$2S_i^{\text{forw}} = \begin{bmatrix} (Aa)_i^* (\Phi a)_i + (\Phi a)_i^* (Aa)_i \\ (\Phi b)_i^* (Aa)_i - (Ab)_i^* (\Phi a)_i \end{bmatrix} \quad (65)$$

$$2S_i^{\text{back}} = -\begin{bmatrix} (Ab)_i^* (\Phi b)_i + (\Phi b)_i^* (Ab)_i \\ (\Phi b)_i^* (Aa)_i - (Ab)_i^* (\Phi a)_i \end{bmatrix}^* . \quad (66)$$

然后我们可以预先计算  $\alpha_h = \Phi a$ ,  $\beta_h = \Phi b$ ,  $\alpha_e = Aa$  和  $\beta_e = Ab$ , 结果是

$$2S_i^{\text{forw}} = [(\alpha_e)_i^* (\alpha_h)_i + (\alpha_h)_i^* (\alpha_e)_i] + [(\beta_h)_i^* (\alpha_e)_i - (\beta_e)_i^* (\alpha_h)_i] \quad (67)$$

$$2S_i^{\text{back}} = -[(\beta_e)_i^* (\beta_h)_i + (\beta_h)_i^* (\beta_e)_i] + [(\beta_h)_i^* (\alpha_e)_i - (\beta_e)_i^* (\alpha_h)_i]^* \quad (68)$$

## 5.2. 应力张量

光子晶体板之间的光学力的计算最近引起了人们的兴趣。可以在傅里叶基础上有效地计算与晶胞上的层表面平行的表面上的应力张量的积分。时间平均应力张量的分量定义为

$$\langle T_{ab} \rangle = \frac{1}{2} \text{Re} \left[ E_a D_b^* + H_a B_b^* - \frac{1}{2} \delta_{ab} \sum_c (E_c D_c^* + H_c B_c^*) \right] \quad (69)$$

其中下标 a, b 和 c 可以分别是 x, y 和 z。使用场的傅里叶表示, 如方程式所示。(5) 晶胞上的积分变为

$$\int_{\text{cell}} \langle T_{ab} \rangle dS_z = \frac{A}{2} \text{Re} \sum_{\mathbf{G}} \left[ e_{\mathbf{G},a} d_{\mathbf{G},z}^* + h_{\mathbf{G},a} b_{\mathbf{G},z}^* - \frac{1}{2} \delta_{az} \sum_c (e_{\mathbf{G},c} d_{\mathbf{G},c}^* + h_{\mathbf{G},c} b_{\mathbf{G},c}^*) \right] \quad (70)$$

其中 A 是晶胞面积,  $dS_z$  是垂直于 z 轴的微分面积。

## 5.3. 能量密度

层内的能量密度也可以以封闭形式计算。对于第 i 层, 能量密度为

$$U = \int_{z_i}^{z_i+d_i} \int_{\text{cell}} (\mathbf{E}^* \cdot \mathbf{D} + \mathbf{H}^* \cdot \mathbf{B}) d^2 \mathbf{r} dz. \quad (71)$$

假设我们有一个傅立叶基场向量:  $\mathbf{F}(z) = [-e_y, e_x, h_x, h_y, e_z, -h_z]^T$ 。使用方程式。(11)、(14)、(35), 则可写为

$$\mathbf{F}(z) = \mathbf{C} \begin{bmatrix} f(z) \\ f(d-z) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \quad (72)$$

其中 C 是矩阵,  $f(z)$  在等式中定义。(30), a 和 b 是式 (30) 中定义的模式幅度向量。(33) 和 (34)。所有模态的横向相关性均采用  $\exp[i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}]$  的形式, 因此根据正交性,

$$U = A \int_{z_i}^{z_i+d_i} \mathbf{F}^\dagger \Lambda \mathbf{F} dz \quad (73)$$

其中 A 是晶胞面积,  $\Lambda$  是块对角矩阵  $\Lambda = \text{diag}(\epsilon, \mathbf{I}, \mathbf{I}, \hat{\epsilon}, \mathbf{I})$ 。让

$$\mathbf{Q}(z) = \begin{bmatrix} f^\dagger(z) \\ f^\dagger(d-z) \end{bmatrix} \mathbf{C}^\dagger \Lambda \mathbf{C} \begin{bmatrix} f(z) \\ f(d-z) \end{bmatrix}. \quad (74)$$

那么问题就是评估

$$U = A \int_{z_i}^{z_i+d_i} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}^\dagger \mathbf{Q}(z) \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} dz. \quad (75)$$

被积函数中二次形式的每个矩阵元素都可以以闭式形式单独积分。类似地, 也可以得到电能或磁能密度的表达式

与  $\Lambda$  的修改形式。以封闭形式评估这些密度的能力可以快速评估有效模式体积等数量, 这对于光学腔设计和优化非常有用[40]。

## 6. 模式求解

除了求解响应源的场之外,  $S^4$  还可以求解结构的模式 (齐次问题)。这种能力对于 LED 发射工程 [41] 和探索周期性结构中的自发发射具有重要意义 [42]。模式求解计算不假设任何来源。S 矩阵算法可以针对常数  $\omega$  和  $\mathbf{k}$  有效确定整个结构的 S 矩阵。利用这一基本功能, 可以使用寻根算法来寻找 S 矩阵行列式的奇异性, 从而获得导模和泄漏模的色散关系 [41]。

## 7. 用户脚本和编程接口

与许多其他流行的 CEM 工具一样,  $S^4$  嵌入在脚本语言环境中, 使用户可以轻松地将求解器用作频率扫描或设计循环中的基本单元。选择脚本语言 Lua [43] 是因为它对用户和程序员来说都易于使用, 具有直观的语法并且可以轻松适应客观和函数式编程范例。Lua 的使用还意味着所有用户公开的功能都可以在低级编程接口中使用。事实上, 每个用户可调用的 Lua 函数都是 C++ API 函数的薄包装。这使得  $S^4$  可以非常直接地集成到更高级别的包中。

$S^4$  的用户手册和脚本接口在 <http://fan.group.stanford.edu/S4> 中有详细描述。该软件附带了出版物中出现的大量计算示例, 几乎涵盖了所有可用功能。我们将描述一个简单的脚本, 如图 4 所示, 以说明基本的模拟流程。我们将重点计算光子晶体板的透射谱 (实际上是[44]的图12, 最初是通过 FDTD 方法计算的), 其结构如图5所示。该结构由厚度为 0.5a 的硅板 ( $\epsilon = 12$ ) 组成, 周围被空气包围, 空气孔的方晶格半径为 0.2a, 其中 a 是晶格常数。

首先, 我们获得一个新的 **Simulation** 对象, 它构成了所有用户与  $S^4$  交互的基础。通过对象进行交互而不是全局设置模拟参数的原因是为了实现高效的多线程并行化, 这是中小型模拟的常见用例。我们首先设置定义 xy 平面周期性的晶格向量、要使用的傅里叶分量的数量 ( $N = |\mathbf{G}|$ ) 以及选择特定 FMM 公式的设置。

接下来, 我们定义模拟和结构层中使用的材料。将名称应用于材料常数而不是直接提供数字的原因是为了简化涉及频率相关材料的计算。通过名称引用材料, 仅需要在不同频率下改变材料定义, 而不必修改结构描述。结构的各层在 z 坐标增加的方向上依次指定。除非指定图案, 否则所有图层默认为无图案的统一图层。

定义模拟的最后一步是指定激励条件。在该示例中, 平面波通常朝正 z 方向入射到结构上。到目前为止, 还没有进行任何计算; 任何昂贵的计算都是由用户对需要它们的输出的请求触发的。



```

-- Bottom pane of Fig. 12 in: S. Fan and J. D. Joannopoulos,
-- "Analysis of guided resonances in photonic crystal slabs",
-- Phys. Rev. B, Vol. 65, 235112.

S = S4.NewSimulation()
S:SetLattice({1,0}, {0,1})          -- lattice vectors (1,0) and (0,1)
S:SetNumG(100)
S:UsePolarizationDecomposition()

----- Add materials -----
S:AddMaterial("Silicon", {12,0})    -- real and imaginary parts
S:AddMaterial("Air", {1,0})

----- Add Layers -----
S:AddLayer('AirAbove',              -- layer name
           0,                       -- thickness
           'Air')                   -- material

S:AddLayer('Slab', 0.5, 'Silicon')
S:SetLayerPatternCircle('Slab',     -- layer to modify
                        'Air',       -- material inside hole
                        {0,0},       -- center of circle
                        0.2)         -- radius

S:AddLayerCopy('AirBelow',          -- layer name
               0,                   -- thickness
               'AirAbove')          -- layer to copy

----- Set Excitation -----
S:SetExcitationPlanewave(
    {0,0}, -- incidence angles (phi in [0, 180], theta in [0, 360])
    {1,0}, -- s-polarization amplitude and phase [0, 360] deg
    {0,0}) -- p-polarization amplitude and phase

-- Compute spectrum from f = 0.25 to 0.6 in steps of 0.001 (2*pi*c/a)
for freq = 0.25, 0.6, 0.001 do
    S:SetFrequency(freq)
    -- Get incident and reflected powers in the first layer at 0 offset
    forward, backward = S:GetPoyntingFlux('AirAbove', 0)
    -- Get transmitted powers in the last layer at 0 offset
    forward = S:GetPoyntingFlux('AirBelow', 0)
    -- Output a table of: freq, transmitted, reflected powers
    print(freq, forward, backward)
end

```

图 4. 用于再现 [44] 的图 12 的示例 S<sup>4</sup> 输入脚本。结构如图 5 所示。

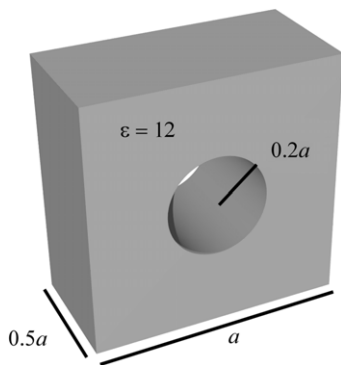


图 5. 硅光子晶体板 ( $\epsilon = 12$ ) 的一个晶胞，由气孔方格组成，晶格常数为  $a$ ，孔半径为  $0.2a$ ，厚度为  $0.5a$ 。图 4 列出了涉及该结构的示例仿真脚本，图 7 显示了一小部分传输频谱。

为了获得示例结构的透射谱，我们必须在一个时间间隔内的多个频率上进行模拟。

我们在感兴趣的频率范围内循环设置模拟频率并检索传输和反射功率。在特定层中计算输出的函数将解决方案缓存在层中以避免重复工作。例如，如果在环体末端需要空气层内的场振幅，则不需要重新求解系统。

在所示的示例中，结构从来不存在任何隐式空间离散化。在整个 S<sup>4</sup> 中，除非用户明确请求离散形状（例如多边形）或离散公式（例如使用 FFT），否则始终避免离散化。因此，平滑的参数变化通常总是产生平滑变化的结果。这在结构优化中尤其重要，其中非常小的几何变化必须对光谱特征产生相应的小变化。

## 7.1. 并行化

S<sup>4</sup> 中的并行化是使用提供的少数并行化原语显式指定的。在单一频率下对单一结构执行的任何计算本质上都不是

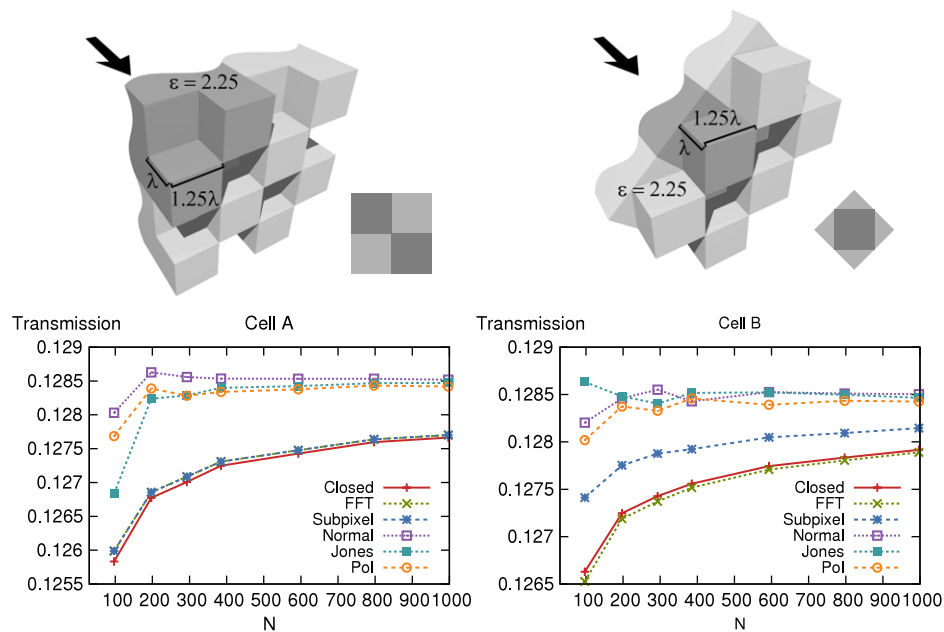


图 6. 对于两个不同晶胞的棋盘光栅（如上所示）， $(0, -1)$  衍射级中的发射功率相对于傅立叶截断级的收敛。3D 结构中晶胞的阴影颜色较深，插图中显示了每个晶胞的平面示意图。入射辐射的方向用箭头表示，并且该结构在页面中无限延伸（如波浪状后边界所示）。

并行化。然而，对于几乎所有的应用，通常都需要频谱，并且不同频率下的计算是完全相互独立的。因此，在分布式内存机器上，每个节点可以仅使用节点索引的知识来独立计算频谱的不相交部分。 $S^4$  支持消息传递接口 (MPI)，并且 MPI 世界通信器的等级和大小可作为脚本的全局变量。

通过显式请求在不同执行线程中同时执行多个 **Simulation** 对象的解决方案，在共享内存机器上也可以实现并行性。 $S^4$  提供了克隆 **Simulation** 对象以及为一组 **Simulation** 对象计算层解决方案的基本功能，以实现线程级并行性。

## 8. 介电结构的收敛性和计算成本

FMM 的精度与  $N$ （模拟中使用的  $G$  数）和层介电函数的傅里叶级数表示的收敛性直接相关。随着使用的傅里叶分量数量 ( $N$ ) 的增加，层内介电分布的表示精度更高。然而，第 3.3 节中描述的特征值问题的空间和时间要求使得涉及大  $N$  的模拟成本过高（例如，对于  $N = 1000$ ，仅存储  $S$  矩阵就需要 256 MB 内存）。如第 4 节所示，许多工作都集中在改进 FMM 相对于  $N$  的收敛性，以便可以使用更少的傅里叶分量。正如收敛图所示，通常使用的  $N$  值在数百到数百之间。

我们首先分析[4]中描述的介电结构，该结构由用于两种不同选择的晶胞的棋盘光栅组成。光栅由入射半空间 ( $z < 0$ ) 中的  $\epsilon = 2.25$  材料制成，另一侧由真空制成。光栅方块的宽度和深度分别为  $1.25\lambda$  和  $1\lambda$ ，其中  $\lambda$  是光的自由空间波长。平面波通常入射到光栅上并平行于偏振

正方形的边缘。图 6 显示了其名称在第 4 节中给出的公式的结构细节以及在  $(0, -1)$  衍射级中发射功率的收敛。很明显，基于矢量场的公式比其他方法实现了明显更快的收敛。Pol 方法显示出比 Jones 和 Normal 公式稍快且更稳定的收敛行为。有趣的是，对于单元 A，其中材料界面平行于坐标方向，子像素平均方法的性能几乎与 FFT 方法相同，因为像素不跨越任何界面。然而，对于单元 B，界面不与像素边界对齐，并且子像素公式显示出比仅使用 FFT 明显的优势。

在  $N = 1000$  处，缓慢收敛的公式仍远未收敛，同时产生约 1% 的相对误差。快速收敛对于 FMM 极其重要，因为使用更大的  $N$  可能不切实际或不可能。

为了研究与纳米光子学更相关的收敛特性，我们分析了[44]中描述的光子晶体板的谐振频率的收敛性，如图 5 所示。部分透射谱如图 7 所示，其中显示了三个总透射峰。图 8 显示了在截断阶数增加时观察到这些特征的频率的收敛。同样，基于矢量场的方法通常比其他方法收敛得更快。其中，4.4 节中描述的 Pol 方法似乎具有最快速和稳定的收敛性。令人惊讶的是，子像素公式对于两个共振频率的表现非常差。这可能是由于子像素平均改变了单元上的平均介电常数，这将导致谐振频率的整体偏移。对于这些数值实验，网格分辨率设置为最大倒数晶格范围的八倍（以整数阶计）。

## 9. 对金属使用 FMM

最近对纳米等离子体激元的兴趣导致了 FMM 在研究含金属结构方面的许多应用。这

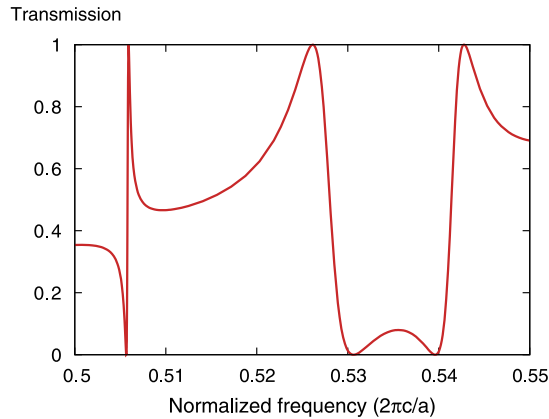


图 7. 图 5 所示光子晶体板的透射光谱，显示出三个总透射峰。这些峰值出现频率的收敛行为如图 8 所示。

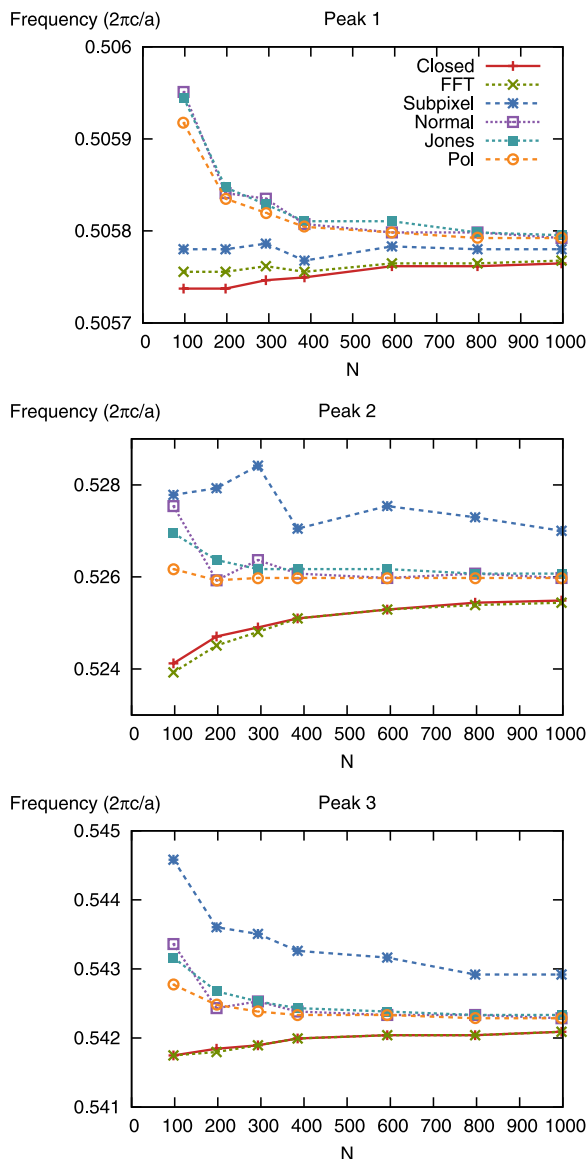


图 8. 对于图 5 所示的光子晶体板结构，图 7 中的三个总传输峰值频率的收敛。

与典型的 1-10 量级的正介电常数相比，等离子体状态下金属的介电常数可能非常负 ( $\epsilon = -100$  并不罕见)。金属的存在导致 FMM 性能不佳，许多工作已经探讨了这些问题的根本原因并提出了可能的解决方案[45-47]。我们将概述在 FMM 中使用金属时遇到的几个困难。

第一个也是最明显的困难是，在金属存在的情况下，界面处的介电对比度要大得多。由于吉布斯现象，介电函数的不连续性导致傅里叶级数表示的收敛速度非常慢[48]。不连续函数的傅立叶级数系数衰减为  $1/f$ ，其中  $f$  是空间频率。由于系数通常与介电对比度成正比，为了实现与 2D 周期性大致相同的精度水平， $\sqrt{N}$  必须与结构中的最大介电对比度成比例。

其次，由于傅立叶级数的有限截断，吉布斯现象在函数的实空间重构中引入了振铃。在 FMM 的背景下，这意味着在金属-介电界面处，有可能引入介电函数过零的额外虚拟界面，从而导致杂散模式 [49]。请注意，吉布斯振铃的幅度不会因增加傅立叶分量的数量而减小，因此该问题与  $N$  [50] 无关。

最后，在金属-电介质角落和边缘，电场可能由于电荷积聚而变得奇异[51]。场的傅立叶表示根本无法捕获这种奇异行为，导致  $N$  的收敛性较差。事实上，已经表明，对于某些几何形状，FMM 永远不会收敛 [52]。

然而，金属结构的 FMM 的适用性和正确的公式来解决上述问题仍然是一个悬而未决的问题。 $S^4$  的设计促进了 FMM 新配方的实验和开发，并且可以作为新应用领域进一步工作的平台。

## 10. 结束语

开放 FMM 代码的可用性对于不断发展的纳米光子学和超材料领域至关重要。我们描述了  $S^4$ ，一个灵活的开源框架，用于使用 FMM 执行模拟。常见的计算，例如计算光栅结构的透射和反射系数，可以使用简单的编程接口直接指定。通过灵活的脚本接口可以实现更复杂的计算，例如模式求解。该界面的设计目的是在不牺牲效率的情况下隐藏几乎所有的数字细节，同时允许访问所有算法的灵活性。我们实施的一个独特之处是易于集成和比较 FMM 的新变体。 $S^4$  已经包含六种不同的 FMM 公式，其中最先进的技术使用适当的傅立叶分解规则来实现比经典公式更优越的收敛性。

我们已根据现有已发布的 FMM 结果（如收敛分析所示）以及其他仿真方法（例如 FDTD 和 FDFD）生成的已发布结果（如图 4 中所示的示例）验证了  $S^4$ 。该代码与许多此类验证测试用例以及教学示例捆绑在一起。此外， $S^4$  已被用于研究多种现象，包括光学力 [53]、生物传感 [54]、光学隔离 [55] 和太阳能电池中的光捕获 [56]。

## 致谢

这项工作部分得到美国空军科学研究办公室 (USAFOSR) 拨款 FA9550-09-1-0704 和美国国家科学基金会 (NSF) 拨款 DMS-0968809 的支持。维克多·刘 (Victor Liu) 获得斯坦福大学研究生奖学金的支持。我们感谢 Wonseok Shin 和审稿人对稿件进行了非常彻底和仔细的校对。

## 参考

- [1] A. Taflove, S. Hagness, 计算电动力学: 时域有限差分法, 见: Artech House 天线和传播库, Artech House, 2005.
- [2] G. Veronis, R.W. Dutton, S. Fan, 光子晶体器件灵敏度分析方法, 选项. 莱特. 29 (2004) 2288–2290.
- [3] J. Jin, 电磁学有限元方法, Wiley-Interscience Publication, Wiley, 2002.
- [4] L. Li, 交叉表面浮雕光栅的傅里叶模态方法的新公式, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 14 (1997) 2758–2767.
- [5] H. Kogelnik, 全息光栅的耦合波理论, 贝尔系统. 技术. J.48 (1969) 2909–2947.
- [6] F.G. Kaspar, 具有复介电常数的厚周期性分层光栅的衍射, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 63 (1973) 37–45.
- [7] M.G. 莫哈拉姆, T.K. Gaylord, 平面光栅衍射的严格耦合波分析, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 71 (1981) 811–818.
- [8] R. Bräuer, O. Bryngdahl, 二维光栅的电磁衍射分析, 选项. 交流. 100 (1993) 1–5.
- [9] M.G. 莫哈拉姆, D.A. 波梅特, E.B. 格兰, T.K. Gaylord, 表面浮雕光栅严格耦合波分析的稳定实现: 增强的透射率矩阵方法, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 12 (1995) 1077–1086.
- [10] D.M. 惠特克, I.S. Culshaw, 图案化多层光子结构的散射矩阵处理, 物理学. 修订版 B 60 (1999) 2610–2618.
- [11] M. Liscidini, D. Gerace, L.C. Andreani, J.E. Sipe, 具有不对称晶胞和双折射介质的周期性图案多层的散射矩阵分析, Phys. Rev. B 77 (2008) 035324.
- [12] S.G. Tikhodeev, A.L. Yablonskii, E.A. Muljarov, N.A. Gippius, T. Ishihara, 光子晶体板的准引导模式和光学特性, 物理学. Rev. B 66 (2002) 045102.
- [13] L. Li, 用于建模分层衍射光栅的两种递归矩阵算法的公式和比较, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 13 (1996) 1024–1035.
- [14] F. Montiel, M. Nevière, 光栅微分理论: 通过 R 矩阵传播算法扩展到任意轮廓和介电常数的深光栅, J. Opt. 苏克. 阿米尔. A 11 (1994) 3241–3250.
- [15] J. Chandezon, M.T. Dupuis, G. Cornet, D. Maystre, 多层光栅: 适用于整个光学区域的微分形式, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 72 (1982) 839–846.
- [16] K. Knop, 具有深矩形凹槽的透射相位光栅的严格衍射理论, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 68 (1978) 1206–1210.
- [17] L. Li, C.W. Haggans, 金属层状衍射光栅耦合波方法的收敛性, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 10 (1993) 1184–1189.
- [18] P. Lalanne, 总经理 Morris, TM 偏振耦合波方法的高度改进收敛性, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 13 (1996) 779–784.
- [19] G. Granet, B. Guizal, TM 偏振中金属层状光栅耦合波方法的高效实现, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 13 (1996) 1019–1023.
- [20] L. Li, 傅里叶级数在不连续周期结构分析中的应用, J. Opt. 苏克. 阿米尔. A 13 (1996) 1870–1876.
- [21] E. Popov, M. Nevière, 光栅理论: 傅里叶空间中的新方程导致 TM 偏振的快速收敛结果, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 17 (2000) 1773–1784.
- [22] B. Chernov, M. Nevière, E. Popov, 快速傅里叶分解方法应用于锥形安装中倾斜层状衍射光栅的模式分析, Opt. 交流. 194 (2001) 289–297.
- [23] E. Popov, M. Nevière, 傅立叶空间中的麦克斯韦方程: 任意形状、周期性、各向异性介质衍射的快速收敛公式, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 18 (2001) 2886–2894.
- [24] P. Boyer, E. Popov, M. Nevière, G. Tayeb, TM 偏振中的衍射理论: 快速傅立叶分解方法在任意横截面的圆柱形器件中的应用, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 21 (2004) 2146–2153.
- [25] T. Schuster, J. Ruoff, N. Kerwien, S. Rafler, W. Osten, 使用 RCWA 进行交叉光栅收敛改进的法向矢量方法, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 24 (2007) 2880–2890.

- [26] R. Antos, 在不连续双周期结构光学建模中使用复杂偏振基的傅立叶分解, Opt. 快报 17 (2009) 7269–7274.
- [27] P. Götz, T. Schuster, K. Frenner, S. Rafler, W. Osten, 具有自动矢量场生成功能的 RCWA 法向矢量方法, 选项. 快报 16 (2008) 17295–17301.
- [28] G. Granet, 通过自适应空间分辨率的概念重新表述层状光栅问题, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 16 (1999) 2510–2516.
- [29] T. Weiss, G. Granet, N.A. Gippius, S.G. Tikhodeev, H. Giessen, 傅里叶模态方法中的匹配坐标和自适应空间分辨率, 选项. 快报 17 (2009) 8051–8061.
- [30] S. Essig, K. Busch, 自适应坐标的生成及其在傅立叶模态方法中的使用, Opt. 快报 18 (2010) 23258–23274.
- [31] T. Vallius, M. Honkanen, 具有自适应空间分辨率的傅里叶模态方法的重构: 在多级剖面中的应用, 选项. 快报 10 (2002) 24–34.
- [32] L. Li, 具有任意介电常数和磁导率张量的交叉各向异性光栅的傅里叶模态方法, J. Opt. 答: 纯应用. 选择. 5 (2003) 345.
- [33] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, D. Sorensen, LAPACK 用户指南, 第三版, 工业与应用数学学会, 费城, 宾夕法尼亚州, 1999 年.
- [34] G. 戈卢布, C.F. Van Loan, 矩阵计算, 第三版, 约翰霍普金斯大学出版社, 巴尔的摩, 1996 年.
- [35] K. McInturff, P. Simon, 具有多边形支持的线性变化函数的傅里叶变换, IEEE Trans. 天线传播. 39 (1991) 1441–1443.
- [36] C. Kottke, A. Farjadpour, S.G. Johnson, 各向异性介电界面的微扰理论以及离散数值方法在亚像素平滑中的应用, Phys. Rev. E 77 (2008) 036611.
- [37] A.F. Oskooi, D. Roundy, M. Ibanescu, P. Bermel, J.D. Joannopoulos, S.G. Johnson, MEEP: 用于通过 FDTD 方法进行电磁仿真的灵活免费软件包, Comput. 物理. 通讯. 181 (2010) 687–702.
- [38] S.G. Johnson, J.D. Joannopoulos, 平面波基础上麦克斯韦方程组的块迭代频域方法, 选项. 快报 8 (2001) 173–190.
- [39] M. Fisher, P. Schröder, M. Desbrun, H. Hoppe, 切向量场设计, ACM Trans. 图形. 26 (2007) .
- [40] K. Vahala, 光学微腔, 世界科学, 新加坡, 2004 年.
- [41] H. Taniyama, M. Notomi, 二维光子晶体板偶极振荡辐射特性的 S 矩阵计算, J. Appl. 物理. 103 (2008) 083115.
- [42] S. Fan, P. R. Villeneuve, J.D. Joannopoulos, E.F. Schubert, 光子晶体板自发发射的高提取效率, Phys. 莱特. 78 (1997) 3294–3297.
- [43] R. Ierusalimsky, L.H. de Figueiredo, W. C. Filho, Lua——一种可扩展的扩展语言, Softw.-Pract. 过期. 26 (1996) 635–652.
- [44] S. Fan, J.D. Joannopoulos, 光子晶体板中引导共振的分析, 物理学. Rev. B 65 (2002) 235112.
- [45] E. Popov, B. Chernov, M. Nevière, N. Bonod, 微分理论: 在高导光栅中的应用, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 21 (2004) 199–206.
- [46] K.M. Gundu, A. Mafi, 使用基于傅立叶的模态方法可靠计算金属二元光栅的散射, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 27 (2010) 1694–1700.
- [47] K.M. Gundu, A. Mafi, 用于计算金属二元光栅散射的约束最小二乘傅里叶模态方法, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 27 (2010) 2375–2380.
- [48] H.S. Carslaw, 傅里叶级数和积分理论简介, 第三版, Dover Publications Inc., 纽约, 1930 年.
- [49] N.M. Lyndin, O. Parriaux, A.V. Tishchenko, 高导光栅中傅里叶模态方法不稳定性的模态分析和抑制, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 24 (2007) 3781–3788.
- [50] D. 戈特利布, C.-W. Shu, 论吉布斯现象及其解决方案, SIAM Rev. 39 (1997) 644–668.
- [51] J. Meixner, 边缘电磁场的行为, IEEE Trans. 天线传播. 20 (1972) 442–446.
- [52] L. Li, G. Granet, 无损金属电介质直角边缘处的场奇点及其对光栅数值建模的影响, J. Opt. 苏克. 阿米尔. 28 (2011) 738–746.
- [53] V. Liu, M. Povinelli, S. Fan, 耦合光子晶体板之间的共振增强光学力, 选项. 快报 17 (2009) 21897–21909.
- [54] M.E. Beheiry, V. Liu, S. Fan, O. Levi, 光子晶体板生物传感器的灵敏度增强, Opt. 快报 18 (2010) 22702–22714.
- [55] K. Fang, Z. Yu, V. Liu, S. Fan, 基于磁光子晶体板中引导谐振的超紧凑非互易光学隔离器, Opt. 莱特. 36 (2011) 4254–4256.
- [56] Z. Yu, A. Raman, S. Fan, 太阳能电池中纳米光子光捕获的基本极限, Proc. 国家. 阿卡特. 科学. (2010) .