

國立臺灣大學工學院工程科學及海洋工程學系

碩士論文

Department of Engineering Science and Ocean Engineering

College of Engineering

National Taiwan University

Master Thesis

利用平行處理之時域有限差分法
探討銀奈米結構菲涅耳波帶片之聚焦性質

The Study of Focusing Properties of the
Silver-Nanostructure Fresnel Zone Plate by Using the
Parallel-Computing Finite-Difference Time-Domain Method

朱育成

Yu-Cheng Chue

指導教授：李 佳 翰博士

Advisor: Jia-Han Li, Ph. D.

中華民國九十七年六月

June, 2008

誌謝

這兩年來的研究生活，讓我從中收穫不少，很慶幸能在舟山路這個環境清幽的地方做研究，每當煩悶，只要往外看看一望總圖後面的大草原，就能使身心更加的舒展，頭腦也變的清晰許多。

非常感謝我的指導教授，李佳翰博士，在這兩年來給予我細心的照顧與教誨，使我在求學及做研究獲益良多，更感謝許文翰博士每次 meeting 給我許多研究上的建議，讓我體會到科學計算的奧秘，這些是書本上學不到的瑰寶，使我對研究所後的生涯，有更充分的準備。

感謝瑞國 (rk)、金龍、柏雄 (wenni)、景皓 (gygy911) 等學長們，帶我熟悉實驗室及 fortran 程式撰寫，也感謝耿正 (阿正)、辰帷 (morris)、勝修 (郭博)、逸偉 (阿偉) 等同學們在研究上與生活的上的幫助，也感謝皓煒 (跛腳皓)、毅瑋 (洪師傅)、明宏 (馬屁捲)、昱勝、志鴻、孝邦、偉豪、耀仁等學弟們的幫忙及分擔實驗室雜務，此外也感謝心理系陳聖馨老師給我在 AnnaLab 維護 Linux server 工讀機會，讓我可以賺錢兼學習增加社會經驗，感謝你們在學業、生活各方面從旁協助，讓我擁有充實且愉快的人生。

最後感謝陪伴我度過人生低潮期的好朋友及家人們，感謝你們在背後默默的給予我支持與協助，讓我無後顧之憂的完成學業，僅將本篇論文獻給我最愛的父母。

中文摘要

本論文分析並模擬具有銀奈米薄膜的菲涅耳波帶片，藉由表面電漿效應及光學繞射行為對光場在聚焦平面上做重建。銀奈米結構的菲涅耳波帶片，其特殊的幾何外型，證實在特定的聚焦平面有光場聚焦特性，並可以應用在奈米微影上。

基於時域有限差分法我們在銀奈米結構的菲涅耳波帶片中研究其聚焦行為，並使用叢集式電腦及訊息溝通介面 (message passing interface, MPI) 函式庫將序列程式平行化，目的在解決大範圍或複雜結構之電磁場的問題，藉由多處理器的運算，將大幅增加可使用之記憶體，並能降低運算的時間。

關鍵字：時域有限差分法、菲涅耳波帶片、繞射極限、平行計算、奈米微影



Abstract

The light intensity rebuilt in the focal plane by Fresnel zone plates in silver films can be described by the plasmonic effects and optical diffraction. We find that the silver Fresnel zone plates with specific geometry can reconstruct the light distribution, and they have the great potential for nanolithography application.

Based on the finite-difference time-domain method, the focus properties of silver-nanostructure Fresnel zone plates are studied. The simulation results show that the light enhancement varies with structures. The message passing interface library are used to parallelize our in-house developed finite-difference time-domain software package, which can access more processors and memories by clusters.

Keywords : finite-difference time-domain method 、Fresnel zone plate 、diffraction limit 、parallel computing 、nanolithography



研究貢獻

一、一般貢獻

1. 建立三維時域有限差分法模型，求解空間中散射體之電磁問題。
2. 使用平行處理增進運算效能，以解決大範圍電磁模擬的問題。
3. 應用等位函數法描述散射體外型，使之平滑化。

二、原始貢獻

1. 模擬菲涅耳波帶片不同的圈數與厚度變化，結構類似傳統光學的雙凸或雙凹透鏡，並分析其光場。



目錄

誌謝	I
中文摘要	II
Abstract	III
研究貢獻	IV
圖示目錄	VII
表格目錄	XI
符號說明	XIII
第一章 序論	1
1.1 前言	1
1.2 研究動機	2
1.3 文獻回顧	2
1.4 本文內容	2
第二章 時域有限差分法	4
2.1 馬克斯威爾方程式	4
2.2 三維時域有限差分法	6
2.3 離散式與 Yee 的解析方法	8
2.4 入射波源處理	10
2.5 損耗性介質	13
2.6 色散性介質	14

2.7	近似散射體等位函數法	19
2.8	吸收邊界條件 (Absorbing Boundary Condition)	20
2.9	數值分析之穩定準則	21
2.10	完美匹配層 (Perfectly Matched Layer)	22
2.10.1	Anisotropic Perfectly Matched Layer 基本原理	22
2.10.2	離散化處理	25
第三章 平行計算		28
3.1	Message Passing Interface 簡介	28
3.2	時域有限差分法的平行化	30
3.2.1	計算機資源	30
3.2.2	序列程式簡介	31
3.2.3	平行化設計方式與計算流程	31
3.3	平行化的效率	35
第四章 程式之驗證		40
4.1	全場與散射場	40
4.2	完美匹配層之討論	40
4.3	三維空間具有解析解的圓球散射	41
第五章 數值模擬結果		48
5.1	傳統光學繞射性質與完美電導體結構之計算結果	48
5.2	銀奈米結構菲涅耳波帶片之設計與結果	51
5.3	不同圈數的菲涅耳波帶片之對解析度與半強度深的影響	52
5.4	雙曲型的菲涅耳波帶片	53
5.4.1	雙凹型的菲涅耳波帶片	53
5.4.2	雙凸型的菲涅耳波帶片	54

第六章 結論	66
6.1 研究成果與討論	66
6.2 未來工作與展望	66
參考文獻	68
附錄 A 三維球體散射解析解	71
A.1 向量波方程的解	71
A.2 平面波展開	74
A.3 散射場與內部場	75
附錄 B 程式使用說明	76



圖示目錄

2.1	電磁場之時間空間配置示意圖 (▲ 表示電場，● 表示磁場)。	6
2.2	Yee 單胞上電磁場的位置分佈示意圖，單胞中心座標為 (i, j, k) 。	7
2.3	散射體、全場、散射場及吸收邊界在空間上的分佈情形。	11
2.4	全場 / 散射場在一維 FDTD 網格的分佈。	11
2.5	(a) 圓柱散射體未使用等位函數法平滑化；(b) 圓柱散射體使用等位函數法平滑化。	20
2.6	平面波的入射示意圖。	23
3.1	分散式記憶體架構之示意圖。	29
3.2	共享式記憶體架構之示意圖。	30
3.3	序列程式之計算流程。	32
3.4	二維時域有限差分方法所需之計算格點。	33
3.5	二維時域有限差分法之資料與計算切割示意圖 (a) 單一程序，(b) 分割成 16 顆處理器。	34
3.6	平行計算之二維資料與計算切割資料交換示意圖。	34
3.7	二維區域資料與計算切割分類 (a) 二維切割，(b) 一維欄切割，(c) 一維列切割。	34
3.8	三維時域有限差分方法所需之計算格點。	35
3.9	平行計算之三維區域資料一維切割 (使用 8 顆 CPU 之示意圖)。	36
3.10	平行計算之三維區域以資料一維切割資料交換示意圖。	36
3.11	三維區域資料與計算切割分類 (a) 三維切割，(b) 二維切割，(c) 一維切割。	36

3.12 平行化程式之計算流程。	37
3.13 使用 1 ~ 64 顆處理器之平行加速比。	39
3.14 使用 1 ~ 64 顆處理器之平行效率 (%)。	39
4.1 沒有散射體的電磁波在全場 / 散射場之分佈 (a) time step = 1 ; (b) time step = 50 ; (c) time step = 100 ; (d) time step = 150 ; (e) time step = 200 ; (f) time step = 250 。	42
4.2 有散射體的電磁波在全場 / 散射場之分佈 (a) time step = 50 ; (b) time step = 100 ; (c) time step = 150 ; (d) time step = 200 ; (e) time step = 250 ; (f) time step = 300 。	43
4.3 在 time step = 1 時電場 E_z 的等高線圖。	44
4.4 在 time step = 100 時電場 E_z 的等高線圖。	44
4.5 在 time step = 350 時電場 E_z 的等高線圖。	45
4.6 在 time step = 700 時電場 E_z 的等高線圖。	45
4.7 半徑 $a = 1/10\lambda$, x-y 平面 ($z = 0$) , x 分量電場的全場解析解。	46
4.8 半徑 $a = 1/10\lambda$, x-y 平面 ($z = 0$) , x 分量電場的 FDTD 數值解。	46
4.9 半徑 $a = 1/10\lambda$, x-line ($y = 0$ 、 $z = 0$) , x 分量電場的 FDTD 數值 解與解析解之比較。	47
5.1 模擬厚度為 $T = 300 \text{ nm}$, $n = 16$ 的菲涅耳波帶片 , 中心位置位於 ($0, -\frac{T}{2}, 0$) 。	49
5.2 (a) 使用光學公式求得 1 到 10 個空氣環的解析解 , (b) 局部放大 圖。	56
5.3 (a) 使用 PEC 模擬 1 到 10 個空氣環的 x 方向場的分佈 , (b) 局部 放大圖。	56
5.4 介質銀 (Ag) 于波長介於 $0.18 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 1.94 \mu\text{m}$ 範圍之 (a) 實部介 電常數 , (b) 虛部介電常數。	57

5.5	銀菲涅耳波帶片 (a) $z = 0.0 \mu\text{m}$ ， x - y 平面上的 $ S_y $ 的分佈情況， (b) $z = 0.0 \mu\text{m}$ 、 $y = 1.0 \mu\text{m}$ ， $ S_y $ 沿 x 軸的變化情形，(c) $x = 0.0 \mu\text{m}$ ， y - z 平面上的 $ S_y $ 的分佈情況，(d) $x = 0.0 \mu\text{m}$ 、 $y = 1.0 \mu\text{m}$ ， $ S_y $ 沿 z 軸的變化情形，(e) $y = 1.0 \mu\text{m}$ ， x - z 平面上的 $ S_y $ 的分佈情況，(f) $z = 0.0 \mu\text{m}$ 、 $x = 0.0 \mu\text{m}$ ， $ S_y $ 沿 y 軸的變化情形。	58
5.6	銀菲涅耳波帶片，其聚焦平面在 (a) $y = 0.6 \mu\text{m}$; (b) $y = 0.8 \mu\text{m}$; (c) $y = 1.0 \mu\text{m}$; (d) $y = 1.2 \mu\text{m}$; (e) $y = 1.4 \mu\text{m}$ ， x - z 的 y 方向波因 亭向量強度 ($ S_y $) 的分佈情況。	59
5.7	銀菲涅耳波帶片，(a) 厚度 $T = 20 \text{ nm} \sim 300 \text{ nm}$ 的解析度與半強 度深；(b) 厚度 $T = 20 \text{ nm} \sim 300 \text{ nm}$ 的 y 方向最大波因亭向量強 度 ($\text{Max} S_y $)。	60
5.8	聚焦平面 $y = 1.0 \mu\text{m}$ 位置處，(a) 對 $\text{Max} S_y $ normalized， x -FWHM 隨圈數的變化，(b) 局部放大圖。	60
5.9	聚焦平面 $y = 1.0 \mu\text{m}$ 位置處，(a) 對 $\text{Max} S_y $ normalized， z -FWHM 隨圈數的變化，(b) 局部放大圖。	61
5.10	厚度 $T = 300 \text{ nm}$ 的菲涅耳波帶片， $1 \sim 10$ 圈空氣環，(a) 解 析度與半強度深，(b) 聚焦平面最大的 y 方向波因亭向量強度 ($\text{Max} S_y $) 與孔徑面積的變化。	61
5.11	每個環依續向外遞增 100 nm 的雙凹型菲涅耳波帶片。	62
5.12	雙凹型的菲涅耳波帶片在 $z = 0.0 \mu\text{m}$ 、 $x = 0.0 \mu\text{m}$ ， y 方向波因亭 向量強度 ($ S_y $) 沿 y 軸的變化情形。	62
5.13	雙凹型的菲涅耳波帶片，中心厚度向內遞增 (a) 20 nm ，聚焦平面 $y = 1.24 \mu\text{m}$; (b) 40 nm ，聚焦平面 $y = 0.68 \mu\text{m}$; (c) 60 nm ，聚焦平 面 $y = 0.64 \mu\text{m}$; (d) 80 nm ，聚焦平面 $y = 1.12 \mu\text{m}$; (e) 100 nm ，聚 焦平面 $y = 1.16 \mu\text{m}$ ， x - z 平面上的 y 方向波因亭向量強度 ($ S_y $) 的 分佈情況。	63
5.14	每個環依續向內遞增 100 nm 的雙凸型菲涅耳波帶片。	64
5.15	雙凸型的菲涅耳波帶片在 $z = 0.0 \mu\text{m}$ 、 $x = 0.0 \mu\text{m}$ ， y 方向波因亭 向量強度 ($ S_y $) 沿 y 軸的變化情形。	64

- 5.16 雙凸型的菲涅耳波帶片，最外圍平板厚度向內遞增 (a) 20 nm，
聚焦平面 $y = 0.98 \mu\text{m}$; (b) 40 nm，聚焦平面 $y = 1.92 \mu\text{m}$; (c)
60 nm，聚焦平面 $y = 0.92 \mu\text{m}$; (d) 80 nm，聚焦平面 $y = 0.94 \mu\text{m}$;
(e) 100 nm，聚焦平面 $y = 1.92 \mu\text{m}$ ，x-z 平面上的 y 方向波因亭向
量強度 ($|S_y|$) 的分佈情況。 65



表格目錄

3.1	平行化 FDTD 時間、增速比與效率。	38
4.1	Legendre function 階數與誤差比較。	41
5.1	波長 632.8 nm，聚焦平面為 1.0 μm 的菲涅耳波帶片半徑的值與前 一個環半徑差值。	49
5.2	近場光學公式、PEC 及介質為銀菲涅耳波帶片的 FWHM 比較。 . .	50
5.3	雙凹型的菲涅耳波帶片，x-FWHM 與 z-FWHM。	54
5.4	雙凸型的菲涅耳波帶片，x-FWHM 與 z-FWHM。	55

符號說明

符號對照表		
E	電場強度 (Electric field intensity)	V/m
D	電位移 (Electric displacement)	C/m ²
H	磁場強度 (Magnetic field intensity)	A/m
B	磁位移 (Magnetic displacement)	T
J	電流密度 (Current density)	A/m ²
J_{source}	電流源項 (Current source, volume)	A/m ²
M_{source}	磁流源項 (Magnetic source, volume)	V/m ²
S	波因亭向量 (Poynting vector)	W/m ²
σ	電導率 (Conductivity)	S/m
ϵ_0	自由空間中的介電常數 (Permittivity of free space)	F/m
ϵ_r	相對介電常數 (Relative permittivity)	—
μ_0	自由空間中的磁導係數 (Permeability of free space)	H/m
μ_r	相對磁導係數 (Relative permeability)	—
λ	波長 (Wavelength)	m
$\epsilon_D(\infty)$	高頻時的介電常數 (Relative high-frequency permittivity)	—
ω_D	電子碰撞頻率 (Electron collision frequency)	Hz
Γ_D	電漿共振頻率 (Plasma resonance frequency)	Hz
c	光速 (Velocity of light in free space)	m/s
FWHM	全波半高寬 (Full width half maximum)	m
DOF	景深 (Depth of focus)	m

第一章

序論

1.1 前言

在奈米尺度之下，許多化學與物理特性與巨觀觀察下有著明顯的不同，因此對於奈米結構的研究將有機會可以創造新的功能性元件。以光（電磁波）為例子，經由電磁理論可以得知現行的光學微影技術受限於繞射極限，目前已知在近場範圍下，可以突破繞射極限之限制，因為奈米結構小於可見光使用於光學微影之深紫外光波長，因此產生的現象與巨觀下會有所不同。然而，對於奈米結構下之光學行為有賴於精準的電磁計算分析，並且對於多數奈米結構需要大量運算方可解決。因此，本論文利用時域有限差分法 (finite-difference time-domain method, FDTD) 結合平行運算處理 (parallel computing) 作為功能性奈米光學元件之有效計算工具，並用以分析銀奈米菲涅耳波帶片 (Fresnel zone plates) 之聚焦性質。

時域有限差分法為將馬克斯威爾方程式的時間、空間領域差分化，利用跳步 (leapfrog) 的方式以時間迭代來更新電場與磁場的值。FDTD 可以很容易觀察到電磁波在時間和空間中的變化，雖然 Kane S. Yee 在 1966 年即提出 FDTD [1]，但因為需要較大之運算資源，當時未立即廣泛應用於計算電磁領域，隨著電腦運算能力的進步，FDTD 所能解決的問題愈來愈廣，高頻電路、天線模擬、光子晶體及光波導等。使用分散式平行系統架構能有效地縮短模擬的時間，並解決大範圍電磁場模擬之問題。因此，利用 FDTD 及平行處理技術，可以深入瞭解奈米結構之光學性質，是發展功能性奈米光學元件之有效計算工具。

1.2 研究動機

1965 年，莫爾 (Gordon Moore) 預測矽晶片電晶體數目每十八個月都會以兩倍數成長，從 70 年代以來莫爾的預言成了事實，這現象正是著名的莫爾定律 (Moore's law) [2]。隨著電晶體尺寸愈小，矽晶片上的電晶體數目隨之提高，而縮小元件尺寸意味著製程裡的微影技術必須能曝出更小的線寬 (line-width)。現行的光學微影技術是將設計好的圖案利用光罩或倍縮光罩轉印到晶圓表面之光阻上 [31]，進而顯影呈現圖案。光波會因為繞射極限效應而無法縮小到比 $1/2$ 波長還小的尺度。本文研究銀奈米結構菲涅耳波帶片之聚焦性質，以期突破繞射極限，改善解析度或降低線寬，以做為未來設計奈米微影之基礎。

1.3 文獻回顧

1678 年 Huygens 提出惠更斯原理 (Huygens principle) 來解釋光波動性質及其傳遞 [3]。Fresnel 提出了菲涅耳波帶片 (Fresnel zone plate)，此圓形環狀光柵可用來做為聚焦之透鏡 [3]。1873 年 Ernst K. Abbe 提出在遠場到觀察範圍下，光具有波動性質，將會有繞射極限，Lord Rayleigh 提出 Rayleigh 準則用以描述 Abbe 之發現 [4]。1998 年 Thomas W. Ebbesen [5] 等人發現當金屬薄膜中有週期性的孔洞時，某些特定波長的光會有異常的穿透現象，後續研究發現此現象與表面電漿 (surface plasmon) 相關。2003 年 S. Maier 等人的實驗結果指出，銀奈米球所排列成之波導在某些波長的光波激發下，可以將光場強度有效率的傳遞到數個波長的距離之外 [6]。2003 年 S. K. Gray 及 T. Kupka 透過 FDTD 來模擬奈米銀柱陣列在可見光波段下的現象 [7]。2005 年 A. Ono 等人利用奈米銀柱陣列來達成次波長 (sub-wavelength) 之成像 [8]。2007-8 年 Y. Fu 等人分析菲涅耳波帶片銀奈米結構的光場分佈 [9] [10] [11]。

1.4 本文內容

在本論文中，我們採用時域有限差分法 (FDTD) 來模擬電磁波在銀奈米結構菲涅耳波帶片的傳播性質。第一章為序論包含前言、研究動機、文獻回顧及本文內容。第二章為介紹時域有限差分法原理及如何設定入射波源，使用全場 / 散射場 (total-fields / scattered-fields, TF / SF) 以避免散射波與入射波源之交互影響，完美匹配層 (perfectly matched layer, PML) 使得在有限的計算資源內能

夠模擬無窮大的區域。第三章為利用平行處理來減少三維時域有限差分法的運算時間並可以模擬大範圍電磁場的問題。第四章為程式之驗證。第五章為數值模擬結果與討論。第六章為結論與未來可研究之方向。



第二章

時域有限差分法

時域有限差分法 (finite-difference time-domain method, FDTD) [1] 是由 Kane S. Yee 在 1966 年所提出的一種計算方法，它用來分析電磁場分佈的問題，經由 40 多年的發展，許多關於 FDTD 的改善方法不斷被提出，近年來電腦計算機的運算速度不斷進步，因此利用 FDTD 法來求解已相當普遍，FDTD 結合平行處理可用以求解複雜結構之電磁問題，其主要的觀念係將電磁場離散，電場與磁場交叉分佈於空間中，藉由時間迭代更新，可完整地描述電磁波在空間和空間中的行為。

2.1 馬克斯威爾方程式

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J}, \quad (2.1.1)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (2.1.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho, \quad (2.1.3)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0. \quad (2.1.4)$$

其中 $\vec{D} = \epsilon \vec{E}$, $\vec{B} = \mu \vec{H}$, ρ 為電荷密度, $\vec{J}$ 為電流密度。時域有限差分法主要以安培定律 (2.1.1) 和法拉第定律 (2.1.2) 的微分型式為基礎，而高斯定律 (2.1.3)、(2.1.4) 則不予使用。

一、將安培定律與法拉第定律微分差分化：

差分可分為前端差分，後端差分及中間差分 [12]

1. 前端差分 (forward difference)：

$$f'(x_0) \simeq \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}. \quad (2.1.5)$$

2. 後端差分 (backward difference)：

$$f'(x_0) \simeq \frac{f(x_0) - f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x}. \quad (2.1.6)$$

3. 中間差分 (central difference)：

$$f'(x_0) \simeq \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0 - \Delta x)}{2\Delta x}. \quad (2.1.7)$$

由泰勒級數展開式 (Taylor series expansion) 可知前、後端差分的誤差為 Δx 等級，視為一階準確，而中間差分的誤差為 $(\Delta x)^2$ 等級，視為二階準確，故 FDTD 通常只用誤差較小的中間差分為主，如果要使 FDTD 計算誤差更小時，可以使用高次差分方程式來近似，但會提高程式實行的複雜度。以 F 表示電磁場的某一分量為例子，然後將其空間或時間坐標以差分型式表示時：

$$\frac{\partial F(x, y, z)}{\partial t} \simeq \frac{F(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2}) - F(x, y, z, t - \frac{\Delta t}{2})}{\Delta t}, \quad (2.1.8)$$

$$\frac{\partial F(x, y, z)}{\partial x} \simeq \frac{F(x + \frac{\Delta x}{2}, y, z, t) - F(x - \frac{\Delta x}{2}, y, z, t)}{\Delta x}. \quad (2.1.9)$$

這裡 Δx 、 Δy 、 Δz 為 x 、 y 、 z 三個分量的網格大小， Δt 則為時間間隔。

因此電磁場某一分量之差分型式簡單表示：

$$\frac{\partial F(i, j, k)}{\partial t} \simeq \frac{F^{n+1/2}(i, j, k) - F^{n-1/2}(i, j, k)}{\Delta t}, \quad (2.1.10)$$

$$\frac{\partial F(i, j, k)}{\partial x} \simeq \frac{F^n(i + 1/2, j, k) - F^n(i - 1/2, j, k)}{\Delta x}. \quad (2.1.11)$$

二、電磁場的時間配置：

電磁波的傳遞是由於電場、磁場交互產生，因此電磁場時間座標離散後，電場僅存在整數格子的時間座標 $t = (n - 1)\Delta t$ 、 $n\Delta t$ 、 $(n + 1)\Delta t$ 等，磁場僅存在奇數格子的時間座標 $t = (n - \frac{1}{2})\Delta t$ 、 $(n + \frac{1}{2})\Delta t$ 、 $(n + \frac{3}{2})\Delta t$ 等。電場和磁場之計算可藉由如圖 2.1 所示而求得。

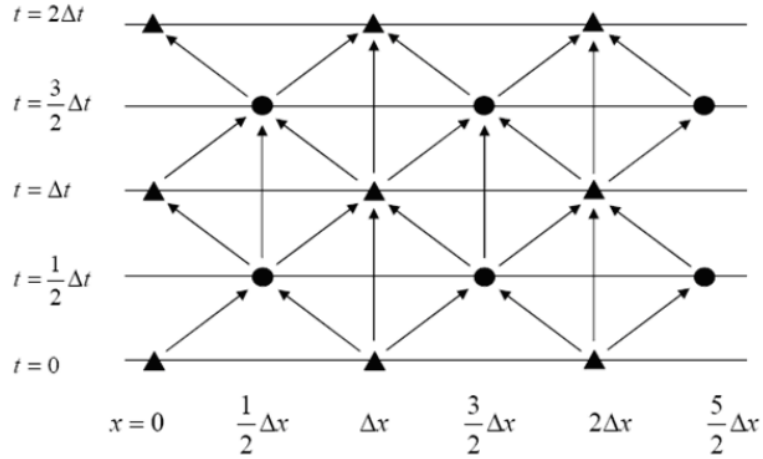


圖 2.1: 電磁場之時間空間配置示意圖 (▲表示電場, ●表示磁場)。

三、電磁場的空間配置：

電磁波是由電場與磁場交互產生的，兩個旋度項經由微分差分化之後每個單胞上的電磁場分佈，如圖 2.2 所示。在每個單胞上電場是沿著單胞的邊線方向，而磁場則是位於每個面的垂直中心。

2.2 三維時域有限差分法

考慮無色散 (non-dispersive)、線性 (linear)、等向性 (isotropic)、無電流源 ($\vec{J} = 0$)、無損耗 ($\sigma = 0$)。式 (2.1.1) 與 (2.1.2) 可改寫成：

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \quad (2.2.1)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (2.2.2)$$

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \cdot \vec{E}. \quad (2.2.3)$$

其中式 (2.2.3) 為電位移 ($\vec{D}$) 與電場 ($\vec{E}$) 的關係式，使用變數變換 [13]

$$\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} \vec{D} \rightarrow \tilde{D}, \quad (2.2.4)$$

$$\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \vec{E} \rightarrow \tilde{E}. \quad (2.2.5)$$

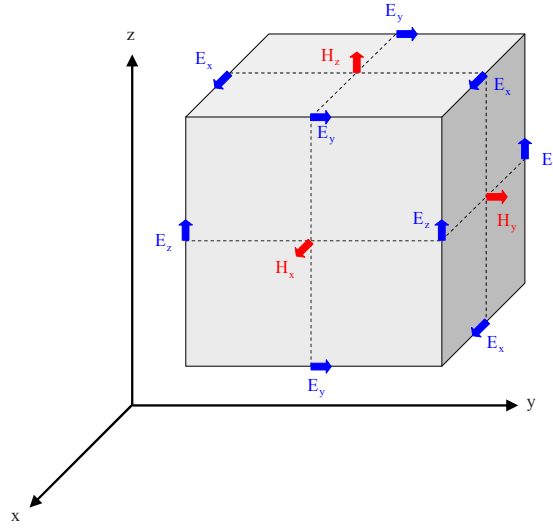


圖 2.2: Yee 單胞上電磁場的位置分佈示意圖，單胞中心座標為 (i, j, k) 。

而使原本的馬克斯威爾方程式 (2.2.1)、(2.2.2)、(2.2.3) 改寫成

$$\frac{\partial \tilde{D}}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \nabla \times \vec{H}, \quad (2.2.6)$$

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \nabla \times \tilde{E}, \quad (2.2.7)$$

$$\tilde{D} = \epsilon_r \cdot \tilde{E}. \quad (2.2.8)$$

上述諸式可寫成六個分量的偏微方程式表示，此為三維時域有限差分法描述馬克斯威爾方程式有關電磁波交互耦合的最基本數學式子

$$\frac{\partial \tilde{D}_x}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right), \quad (2.2.9a)$$

$$\frac{\partial \tilde{D}_y}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right), \quad (2.2.9b)$$

$$\frac{\partial \tilde{D}_z}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right), \quad (2.2.9c)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}} \left(\frac{\partial \tilde{E}_z}{\partial y} - \frac{\partial \tilde{E}_y}{\partial z} \right), \quad (2.2.10a)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = -\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}} \left(\frac{\partial \tilde{E}_x}{\partial z} - \frac{\partial \tilde{E}_z}{\partial x} \right), \quad (2.2.10b)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}} \left(\frac{\partial \tilde{E}_y}{\partial x} - \frac{\partial \tilde{E}_x}{\partial y} \right). \quad (2.2.10c)$$

2.3 離散式與 Yee 的解析方法

Yee 演算法提出，在有限區域中電場與磁場必須要以半個時間空間交互穿插在計算空間中，電場僅存在於整數格子時間空間，而磁場存在於奇數格子時間空間，採用跳步 (leapfrog) 方式依序對電場磁場完成運算。以一個最簡單的單胞 (cell) 計算為例，電場與磁場在空間網格配置情形如圖 2.2 所示 [14]，

時間與空間使用二階中央差分離散馬克斯威爾旋度方程式如下：

$$\begin{aligned} & \frac{\tilde{D}_x|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1} - \tilde{D}_x|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta t} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}} \left(\frac{H_z|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} - \frac{H_y|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^{n+\frac{1}{2}} - H_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta z} \right), \end{aligned} \quad (2.3.1)$$

或

$$\begin{aligned} & \tilde{D}_x|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1} = \tilde{D}_x|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^n \\ &+ \frac{\Delta t}{\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}} \left(\frac{H_z|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} - \frac{H_y|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^{n+\frac{1}{2}} - H_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta z} \right), \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

同理

$$\begin{aligned} \tilde{D}_y \Big|_{i-\frac{1}{2},j+1,k+\frac{1}{2}}^{n+1} &= \tilde{D}_y \Big|_{i-\frac{1}{2},j+1,k+\frac{1}{2}}^n \\ &+ \frac{\Delta t}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} \left(\frac{H_x \Big|_{i-\frac{1}{2},j+1,k+1}^{n+\frac{1}{2}} - H_x \Big|_{i-\frac{1}{2},j+1,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta z} - \frac{H_z \Big|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_z \Big|_{i-1,j+1,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \right), \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

$$\begin{aligned} \tilde{D}_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+1}^{n+1} &= \tilde{D}_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+1}^n \\ &+ \frac{\Delta t}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} \left(\frac{H_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^{n+\frac{1}{2}} - H_y \Big|_{i-1,j+\frac{1}{2},k+1}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \frac{H_x \Big|_{i-\frac{1}{2},j+1,k+1}^{n+\frac{1}{2}} - H_x \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+1}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} \right), \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

$$\begin{aligned} H_x \Big|_{i-\frac{1}{2},j+1,k+1}^{n+\frac{3}{2}} &= H_x \Big|_{i-\frac{1}{2},j+1,k+1}^{n+\frac{1}{2}} \\ &- \frac{\Delta t}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} \left(\frac{\tilde{E}_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{3}{2},k+1}^{n+1} - \tilde{E}_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+1}^{n+1}}{\Delta y} - \frac{\tilde{E}_y \Big|_{i-\frac{1}{2},j+1,k+\frac{3}{2}}^{n+1} - \tilde{E}_y \Big|_{i-\frac{1}{2},j+1,k+\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta z} \right), \end{aligned} \quad (2.3.5)$$

$$\begin{aligned} H_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^{n+\frac{3}{2}} &= H_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^{n+\frac{1}{2}} \\ &- \frac{\Delta t}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} \left(\frac{\tilde{E}_x \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{3}{2}}^{n+1} - \tilde{E}_x \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta z} - \frac{\tilde{E}_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+1}^{n+1} - \tilde{E}_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+1}^{n+1}}{\Delta x} \right), \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

$$\begin{aligned} H_z \Big|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{3}{2}} &= H_z \Big|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \\ &- \frac{\Delta t}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} \left(\frac{\tilde{E}_y \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1,k+\frac{1}{2}}^{n+1} - \tilde{E}_y \Big|_{i-\frac{1}{2},j+1,k+\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta x} - \frac{\tilde{E}_x \Big|_{i,j+\frac{3}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1} - \tilde{E}_x \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta y} \right). \end{aligned} \quad (2.3.7)$$

2.4 入射波源處理

由前上節的 FDTD 公式推導中得知，若要求得下一步的電場或磁場，必定是以上一步的電場及磁場來計算得到的。假若沒有源項，FDTD 運算出的任何時刻電場或磁場必定為零，因此源項在 FDTD 裡構成主要運算程序完成與否重要的一項因素，這裡分別以常見的硬波源、軟波源及全場與散射場介紹。

一、硬波源 (hard-sourced)：

硬波源屬於最簡易的源項處理方式，只需於 FDTD 計算流程中插入離散化的波函數即可，以單調正弦波 (sinusoidal wave) 為例：

$$E_z = E_0 \sin(\omega_0 t). \quad (2.4.1)$$

將時間離散化可得

$$E_z|_{i_s}^n = E_0 \sin(2\pi f_0 n \cdot \Delta t). \quad (2.4.2)$$

其中 i_s 為波源的源點， ω_0 、 f_0 為正弦波的角頻率與頻率， n 為時間迭代步數， Δt 為時間間隔。硬波源雖然在程式撰寫上相當簡單，但是由於波源是在固定的空間上隨時間變化，如果遇到散射體將會導致二次反射，使得求解答案不正確。解決辦法為反射波到達波源前關閉源項更新，以確保不會造成二次反射。

二、軟波源 (soft-sourced)：

軟波源又稱附加源，在安培定律或法拉第定律加入電流源 (J_{source}) 或磁流源 (M_{source}) 當做電磁或磁場能量。當反射波傳遞到此波源區域時會直接與電流源或磁流源做疊加，不會造成計算時的反射。

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} [\nabla \times H - J_{source}], \quad (2.4.3)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} [\nabla \times E - M_{source}]. \quad (2.4.4)$$

三、全場與散射場 (total-fields / scattered-fields)：

全場與散射場的推導可以避免平面波使用硬波源造成的反射，在求解散射場是一個相當好用工具，通常把計算區域分成三個區塊：全場 (total-fields)，散射場 (scattered-fields)，及最外層的完美匹配層 (PML)，如圖

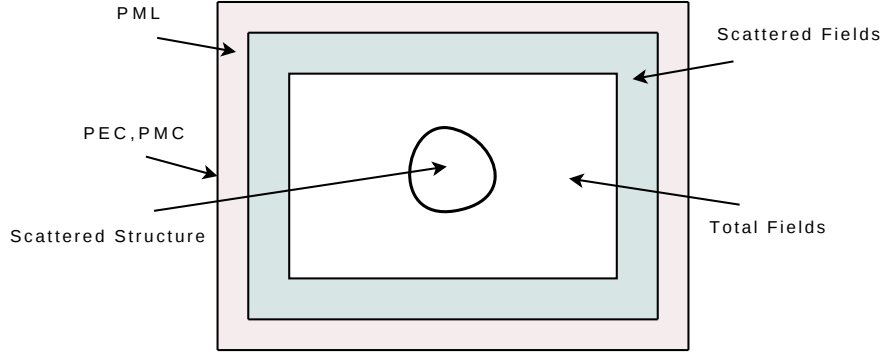


圖 2.3: 散射體、全場、散射場及吸收邊界在空間上的分佈情形。

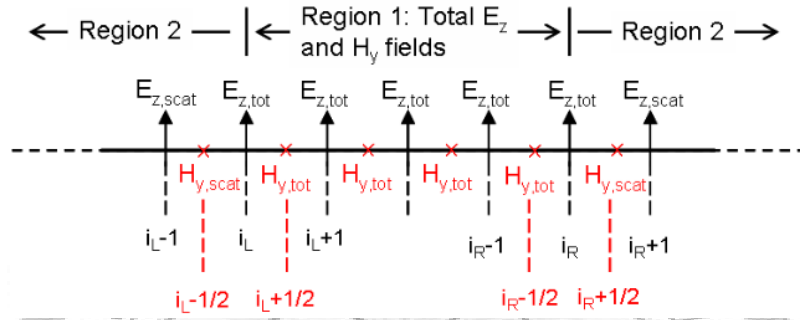


圖 2.4: 全場 / 散射場在一維 FDTD 網格的分佈。

2.3所示。當平面波在全場要進入散射場前必須減掉入射場值，所以能減少吸收邊界與入射場的所產生的誤差，僅有散射場得需使用吸收邊界吸收，今日之 FDTD 軟體多半使用此技術來解決散射場問題。

由物理的觀點視之，線性的馬克斯威爾方程之全場 (total-fields) 與散射場 (scattered-fields) 的關係可以表示如下：

$$E_{total} = E_{inc} + E_{scat}, \quad (2.4.5)$$

$$H_{total} = H_{inc} + H_{scat}. \quad (2.4.6)$$

E_{inc} 、 H_{inc} 分別表示入射場的值並且在任何時間、空間皆是可以決定的，這裡可用一維時域有限差分運算當成入射場，在全場與散射場邊界做轉換成二維或三維平面波。以一維空間的全場散射場為例，假設在自由空間中往 x 的方向傳遞，依照 Yee 演算法，電場分量 E_z 可表示成

$$E_z|_i^{n+1} = E_z|_i^n + \frac{\Delta t}{\epsilon_0 \Delta x} \left(H_y|_{i+1/2}^{n+1/2} - H_y|_{i-1/2}^{n+1/2} \right). \quad (2.4.7)$$

假使計算的格子 $i - 1/2$ 、 i 、 $i + 1/2$ 點都在全場區域，則無須對入射波

源做修正，其表示式為

$$E_{z,total}|_i^{n+1} = E_{z,total}|_i^n + \frac{\Delta t}{\varepsilon_0 \Delta x} \left(H_{y,total}|_{i+1/2}^{n+1/2} - H_{y,total}|_{i-1/2}^{n+1/2} \right), \quad (2.4.8)$$

同樣地，若計算的格子 $i - 1/2$ 、 i 、 $i + 1/2$ 點都在散射場區域時，則無須對入射波源做修正，表示為

$$E_{z,scat}|_i^{n+1} = E_{z,scat}|_i^n + \frac{\Delta t}{\varepsilon_0 \Delta x} \left(H_{y,scat}|_{i+1/2}^{n+1/2} - H_{y,scat}|_{i-1/2}^{n+1/2} \right). \quad (2.4.9)$$

在全場區域與散射場區域的左邊界，即 $i = i_L$ ， E_z 分量可表示成

$$E_{z,total}|_{i_L}^{n+1} = E_{z,total}|_{i_L}^n + \frac{\Delta t}{\varepsilon_0 \Delta x} \left(H_{y,total}|_{i_L+1/2}^{n+1/2} - H_{y,total}|_{i_L-1/2}^{n+1/2} \right), \quad (2.4.10)$$

由於 $H_{y,total}$ 不存在於 $i_L - 1/2$ 的格子，必須以下面的公式取代之

$$H_{y,total}|_{i_L-1/2}^{n+1/2} = H_{y,scat}|_{i_L-1/2}^{n+1/2} + H_{y,inc}|_{i_L-1/2}^{n+1/2}, \quad (2.4.11)$$

故

$$E_{z,total}|_{i_L}^{n+1} = E_{z,total}|_{i_L}^n + \frac{\Delta t}{\varepsilon_0 \Delta x} \left(H_{y,total}|_{i_L+1/2}^{n+1/2} - H_{y,scat}|_{i_L-1/2}^{n+1/2} \right) - \frac{\Delta t}{\varepsilon_0 \Delta x} H_{y,inc}|_{i_L-1/2}^{n+1/2}. \quad (2.4.12)$$

假如散射場區域之矩陣以全場來取代之，可簡寫成

$$E_z|_{i_L}^{n+1} = \{E_z|_{i_L}^{n+1}\} - \frac{\Delta t}{\varepsilon_0 \Delta x} H_{y,inc}|_{i_L-1/2}^{n+1/2}, \quad (2.4.13)$$

相同地，在全場區域與散射場區域的右邊界即 $i = i_R$ ， E_z 分量可表示成

$$E_z|_{i_R}^{n+1} = \{E_z|_{i_R}^{n+1}\} + \frac{\Delta t}{\varepsilon_0 \Delta x} H_{y,inc}|_{i_R+1/2}^{n+1/2}. \quad (2.4.14)$$

在自由空間中往 x 的方向傳遞，依照 Yee 演算法磁場分量 H_y 可表示成

$$H_y|_{i-1/2}^{n+1/2} = H_y|_{i-1/2}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta x} (E_z|_i^n - E_z|_{i-1}^n), \quad (2.4.15)$$

假使計算的格子 $i - 1$ 、 $i - 1/2$ 、 i 點都在全場區域時，則無須對入射波源做修正，表示為

$$H_{y,total}|_{i-1/2}^{n+1/2} = H_{y,total}|_{i-1/2}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta x} (E_{z,total}|_i^n - E_{z,total}|_{i-1}^n), \quad (2.4.16)$$

同樣地，若計算的格子 $i-1$ 、 $i-1/2$ 、 i 點都在散射場區域，則無須對入射波源做修正，表示為

$$H_{y,scat}|_{i-1/2}^{n+1/2} = H_{y,scat}|_{i-1/2}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta x} (E_{z,scat}|_i^n - E_{z,scat}|_{i-1}^n). \quad (2.4.17)$$

在全場區域與散射場區域的左邊界，即 $i_L - 1/2$ ， H_y 分量可表示成

$$H_{y,scat}|_{i_L-1/2}^{n+1/2} = H_{y,scat}|_{i_L-1/2}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta x} (E_{z,scat}|_{i_L}^n - E_{z,scat}|_{i_L-1}^n), \quad (2.4.18)$$

由於 $E_{z,scat}$ 不存在於 i_L 的格子均必須以下面的公式取代之

$$E_{z,scat}|_{i_L}^n = E_{z,total}|_{i_L}^n - E_{z,inc}|_{i_L}^n, \quad (2.4.19)$$

如此可得

$$H_{y,scat}|_{i_L-1/2}^{n+1/2} = H_{y,scat}|_{i_L-1/2}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta x} (E_{z,total}|_{i_L}^n - E_{z,scat}|_{i_L-1}^n) - \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta x} E_{z,inc}|_{i_L}^n. \quad (2.4.20)$$

假如散射場區域之矩陣以全場來取代之，可簡寫成

$$H_y|_{i_L-1/2}^{n+1/2} = \left\{ H_y|_{i_L-1/2}^{n+1/2} \right\} - \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta x} E_{z,inc}|_{i_L}^n, \quad (2.4.21)$$

相同地，當在更新格子點為 $i_R + 1/2$ 散射場區域矩陣用全場來取代之， H_y 分量可簡寫成

$$H_y|_{i_R-1/2}^{n+1/2} = \left\{ H_y|_{i_R-1/2}^{n+1/2} \right\} + \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta x} E_{z,inc}|_{i_R}^n. \quad (2.4.22)$$

以上的修正雖然在一維的架構下為之，此做法可以套用到二維及三維的 FDTD。

2.5 損耗性介質

考慮一維 FDTD 分量 E_x 、 H_y 在有損耗性介電物質，相對介電常數 ϵ_r ，導電率 σ ，向 z 方向傳遞則馬克斯威爾方程式必須加上耗散項作修正。電場的計算

只與導電率 σ 和介電係數 ε_r 兩個參數有關而與導磁率 μ 無關，相反地磁場計算只與導磁率有關而與其他參數無關，所以改寫式 (2.1.1) 與式 (2.1.2)

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = -\frac{1}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \left(\frac{\partial H_y}{\partial z} + \sigma E_x \right), \quad (2.5.1)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial E_x}{\partial z}. \quad (2.5.2)$$

對時間與空間作差分離散

$$\frac{E_x|_{k+1/2}^{n+1} - E_x|_{k+1/2}^n}{\Delta t} = -\frac{1}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \frac{H_y|_{k+1}^{n+1/2} - H_y|_k^{n+1/2}}{\Delta z} - \frac{\sigma}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \frac{E_x|_{k+1/2}^{n+1} + E_x|_{k+1/2}^n}{2}, \quad (2.5.3)$$

$$\frac{H_y|_{k+1}^{n+3/2} - H_y|_{k+1}^{n+1/2}}{\Delta t} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{E_x|_{k+3/2}^{n+1} - E_x|_{k+1/2}^{n+1}}{\Delta z}. \quad (2.5.4)$$

使用變數變換 [13] $\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} E \rightarrow \tilde{E}$ ，經整理可得電磁場的更新方程式

$$\tilde{E}_x|_{k+1/2}^{n+1} = \frac{\left(1 - \frac{\Delta t \cdot \sigma}{2\varepsilon_r \varepsilon_0}\right)}{\left(1 + \frac{\Delta t \cdot \sigma}{2\varepsilon_r \varepsilon_0}\right)} \tilde{E}_x|_{k+1/2}^n - \frac{\frac{\Delta t}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}}}{\varepsilon_r \left(1 + \frac{\Delta t \cdot \sigma}{2\varepsilon_r \varepsilon_0}\right)} \cdot \frac{H_y|_{k+1}^{n+1/2} - H_y|_k^{n+1/2}}{\Delta z}, \quad (2.5.5)$$

$$H_y|_{k+1}^{n+3/2} = H_y|_{k+1}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \cdot \frac{\tilde{E}_x|_{k+3/2}^{n+1} - \tilde{E}_x|_{k+1/2}^{n+1}}{\Delta z}. \quad (2.5.6)$$

2.6 色散性介質

介質之介電常數會隨電磁波之頻率的改變而有所不同，介電常數為複數之型式，對於金屬之介電常數，我們可以採用 Drude model 近似

$$\varepsilon = \varepsilon_0 [\varepsilon_r(\omega) + i\varepsilon_i(\omega)]. \quad (2.6.1)$$

虛數部 $\varepsilon_i > 0$ 表示電磁波在此介質將會被吸收，實數部 $\varepsilon_r < 0$ 表示電磁波在此介質將會反射。一個務實的問題是當 $\varepsilon_r < 0$ 時，在 FDTD 計算上將會造成時間迭代的不穩定 [7]。解決辦法有兩種，一種為輔助差分方程法 (auxiliary differential equation, ADE) [14] 另一種為片段線性遞迴旋積法 (piecewise linear recursive convolution, PLRC) [14]。ADE 法是將原本的 Drude model 轉換為微分方程式，離散後為一新的差分方程組，加入 FDTD 時間步迭代。而 PLRC 法是將原本頻域上位移電流密度 ($\vec{D}$) 與電場 ($\vec{E}$) 的相乘轉為時域後成為旋積 (convolution) 的關係。

(1) 輔助差分方程法 (Auxiliary Differential Equation method)

改寫原本的馬克斯威爾方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} E(x, y, z, t) = \frac{1}{\varepsilon_{eff}} [\nabla \times H(x, y, z, t) - J(x, y, z, t)], \quad (2.6.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H(x, y, z, t) = -\frac{1}{\mu_0} \nabla \times E(x, y, z, t), \quad (2.6.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} J(x, y, z, t) = \alpha(x, y, z) J(x, y, z, t) + \beta(x, y, z) E(x, y, z, t). \quad (2.6.4)$$

在自由空間中 (即 $\alpha = \beta = 0$ 、 $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_0$)， J 為一初始值為零的電流密度向量，與原本馬克斯威爾方程式相同。在金屬的材料裡可以用 α 、 β 、 ε_{eff} 等效描述 Drude model 參數，電磁波在金屬的行為，其中 $\varepsilon_r(\infty)$ 、 Γ_D 、 ω_D 為 Drude model 的三個重要參數。 $\varepsilon_D(\infty)$ 為高頻率時的相對介電常數 (relatively high-frequency dielectric constant)； ω_D 為電漿共振頻率 (plasma resonance frequency)； Γ_D 為電子碰撞頻率 (electron collision frequency)。其中

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon_0 \varepsilon_r(\infty), \quad (2.6.5)$$

$$\alpha = -\Gamma_D, \quad (2.6.6)$$

$$\beta = \varepsilon_0 \omega_D^2. \quad (2.6.7)$$

以二維 TE 波為例，只須處理 E_x ， E_y ，和 H_z ($E_z = H_x = H_y = 0$)，若以 $E_x^{n+1}(x, y) \equiv E_x[x, y, t = (n+1)\Delta t]$ 表示，則 FDTD 的離散可寫成

$$E_x^{n+1}(x, y) = E_x^n(x, y) + \frac{\Delta t}{\varepsilon_{eff}(x, y)} \left[\frac{\partial H_z^{n+1/2}}{\partial y} - J_x^{n+1/2} \right], \quad (2.6.8)$$

$$E_y^{n+1}(x, y) = E_y^n(x, y) - \frac{\Delta t}{\varepsilon_{eff}(x, y)} \left[\frac{\partial H_z^{n+1/2}}{\partial x} + J_y^{n+1/2} \right], \quad (2.6.9)$$

$$H_z^{n+3/2}(x, y) = H_z^{n+1/2}(x, y) + \frac{\Delta t}{\mu_0} \left[\frac{\partial E_y^{n+1}}{\partial x} - \frac{\partial E_x^{n+1}}{\partial y} \right]. \quad (2.6.10)$$

電流密度更新方程式

$$J_x^{n+1/2} = \left[\frac{1 + \alpha \cdot \Delta t/2}{1 - \alpha \cdot \Delta t/2} \right] J_x^{n-1/2} + \left[\frac{\beta \cdot \Delta t}{1 - \alpha \cdot \Delta t/2} \right] \cdot E_x^n, \quad (2.6.11)$$

$$J_y^{n+1/2} = \left[\frac{1 + \alpha \cdot \Delta t/2}{1 - \alpha \cdot \Delta t/2} \right] J_y^{n-1/2} + \left[\frac{\beta \cdot \Delta t}{1 - \alpha \cdot \Delta t/2} \right] \cdot E_y^n. \quad (2.6.12)$$

推導如下：考慮具有單極點之 Drude model 的金屬，其介電常數可表示為

$$\varepsilon_D(\omega) = \varepsilon_D(\infty) - \frac{\omega_D^2}{\omega^2 + i\Gamma_D \omega}. \quad (2.6.13)$$

時域的馬克斯威爾方程式可表示為

$$\varepsilon \frac{\partial E(t)}{\partial t} = \nabla \times H(t), \quad (2.6.14)$$

定義傅立葉轉換

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t) \rightarrow -i\omega f(\omega), \quad (2.6.15)$$

頻域的馬克斯威爾方程式可表示為

$$-i\omega \varepsilon(\omega) \tilde{E}(\omega) = \nabla \times \tilde{H}(\omega), \quad (2.6.16)$$

定義

$$\varepsilon(\omega) \tilde{E}(\omega) \equiv \varepsilon(x, y, z, \omega) \tilde{E}(x, y, z, \omega), \quad (2.6.17)$$

$$\nabla \times \tilde{H}(\omega) \equiv \nabla \times \tilde{H}(x, y, z, \omega), \quad (2.6.18)$$

假設

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_D(\omega), \quad (2.6.19)$$

可寫成

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 \{ \varepsilon_D(\infty) + [\varepsilon_D(\omega) - \varepsilon_D(\infty)] \}. \quad (2.6.20)$$

重寫式 (2.6.16)

$$-i\omega \varepsilon_0 [\varepsilon_D(\omega) - \varepsilon_D(\infty)] \tilde{E}(\omega) - i\omega \varepsilon_0 \varepsilon_D(\infty) \tilde{E}(\omega) = \nabla \times \tilde{H}(\omega), \quad (2.6.21)$$

其中

$$\tilde{J}(\omega) = -i\omega \varepsilon_0 [\varepsilon_D(\omega) - \varepsilon_D(\infty)] \tilde{E}(\omega), \quad (2.6.22)$$

式 (2.6.21) 可寫成

$$\tilde{J}(\omega) - i\omega \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_D(\infty) \tilde{E}(\omega) = \nabla \times \tilde{H}(\omega), \quad (2.6.23)$$

傅立葉時域可寫成

$$J(t) + \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_D(\infty) \frac{\partial E(t)}{\partial t} = \nabla \times H(t), \quad (2.6.24)$$

用式 (2.6.13) 取代式 (2.6.22)

$$\tilde{J}(\omega) = i\omega\varepsilon_0 \left[\frac{\omega_D^2}{\omega^2 + i\Gamma_D\omega} \right] \tilde{E}(\omega), \quad (2.6.25)$$

式 (2.6.25) 可轉成如下之時域

$$\frac{\partial^2 J(t)}{\partial t^2} + \Gamma_D \frac{\partial J(t)}{\partial t} = \varepsilon_0 \omega_D^2 \frac{\partial E(t)}{\partial t}, \quad (2.6.26)$$

同時對 ∂t 降階可得

$$\frac{\partial J(t)}{\partial t} + \Gamma_D J(t) = \varepsilon_0 \omega_D^2 E(t). \quad (2.6.27)$$

(2) 片段線性遞迴旋積法 (Piecewise Linear Recursive Convolution method)

若將 Drude 公式 (2.6.13) 以因式分解表示之

$$\varepsilon_D(\omega) = \varepsilon_D(\infty) - \frac{\omega_D^2/\Gamma_D}{i\omega} - \frac{\omega_D^2/\Gamma_D}{\Gamma_D - i\omega}, \quad (2.6.28)$$

位移電流密度 (D) 與電場 (E) 的關係

$$\tilde{D}(\omega) = \varepsilon_r^* \cdot \tilde{E}(\omega), \quad (2.6.29)$$

且

$$\varepsilon_r^*(\omega) = \varepsilon_D(\omega), \quad (2.6.30)$$

如此可寫成

$$\tilde{D}(\omega) = \varepsilon(\infty) \cdot \tilde{E}(\omega) - \frac{\omega_D^2/\Gamma_D}{i\omega} \tilde{E}(\omega) - \frac{\omega_D^2/\Gamma_D}{\Gamma_D - i\omega} \tilde{E}(\omega). \quad (2.6.31)$$

但 FDTD 是在時域內做計算，故利用傅立葉轉換將上式由頻域轉成時域函數

$$D(t) = \varepsilon_D(\infty) \cdot E(t) - \frac{\omega_D^2}{\Gamma_D} \int_0^t E(t') \cdot dt' + \frac{\omega_D^2}{\Gamma_D} \int_0^t e^{\Gamma_D \cdot (t-t')} E(t') \cdot dt', \quad (2.6.32)$$

因此，時域下的第 n 個時間步之離散電場與位移電流密度之關係為

$$D^n = \varepsilon_D(\infty) \cdot E^n - \frac{\omega_D^2 \Delta t}{\Gamma_D} \sum_{i=0}^n E^i + \frac{\omega_D^2 \Delta t}{\Gamma_D} \sum_{i=0}^n e^{\Gamma_D(n-i)\Delta t} \cdot E^i, \quad (2.6.33)$$

令

$$D^n = E^n + I^n + S^n, \quad (2.6.34)$$

$$\text{其中 } E^n = \varepsilon_D(\infty) \cdot E^n, \quad I^n = -\frac{\omega_D^2 \Delta t}{\Gamma_D} \sum_{i=0}^n E^i, \quad S^n = \frac{\omega_D^2 \Delta t}{\Gamma_D} \sum_{i=0}^n e^{\Gamma_D(n-i)\Delta t} \cdot E^i$$

處理 I_n 項

$$I^n = -\frac{\omega_D^2 \Delta t}{\Gamma_D} E^n - \frac{\omega_D^2 \Delta t}{\Gamma_D} \sum_{i=0}^{n-1} E^i, \quad (2.6.35)$$

而

$$I^{n-1} = -\frac{\omega_D^2 \Delta t}{\Gamma_D} \sum_{i=0}^{n-1} E^i, \quad (2.6.36)$$

I_n 可寫成

$$I^n = -\frac{\omega_D^2 \Delta t}{\Gamma_D} E^n + I^{n-1}, \quad (2.6.37)$$

處理 S_n 項

$$S^n = \frac{\omega_D^2 \Delta t}{\Gamma_D} E^n + \frac{\omega_D^2 \Delta t}{\Gamma_D} \sum_{i=0}^{n-1} e^{\Gamma_D(n-i)\Delta t} \cdot E^i, \quad (2.6.38)$$

而

$$S^{n-1} = \frac{\omega_D^2 \Delta t}{\Gamma_D} \sum_{i=0}^{n-1} e^{\Gamma_D(n-1-i)\Delta t} \cdot E^i = \frac{\omega_D^2 \Delta t}{\Gamma_D} e^{-\Gamma_D \cdot \Delta t} \sum_{i=0}^{n-1} e^{\Gamma_D(n-i)\Delta t} \cdot E^i, \quad (2.6.39)$$

S_n 可寫成

$$S^n = \frac{\omega_D^2 \Delta t}{\Gamma_D} E^n + e^{\Gamma_D \cdot \Delta t} S^{n-1}. \quad (2.6.40)$$

綜合式 (2.6.37)、(2.6.40)，代入式 (2.6.34) 可得

$$D^n = \varepsilon_D(\infty) \cdot E^n + \left[-\frac{\omega_D^2 \Delta t}{\Gamma_D} E^n + I^{n-1} \right] + \left[\frac{\omega_D^2 \Delta t}{\Gamma_D} E^n + e^{\Gamma_D \cdot \Delta t} S^{n-1} \right], \quad (2.6.41)$$

其中 E^n 離散式之關係可表示成如下式，而 I_n 、 S_n 則可由式 (2.6.37) 及式 (2.6.40) 求得

$$E^n = \frac{D^n - I^{n-1} - e^{\Gamma_D \cdot \Delta t} S^{n-1}}{\varepsilon_D(\infty) - \frac{\omega_D^2 \Delta t}{\Gamma_D} + \frac{\omega_D^2 \Delta t}{\Gamma_D}}. \quad (2.6.42)$$

2.7 近似散射體等位函數法

等位函數法由 S. J. Osher 和 J. A. Sethian 於 1988 年所提出 [16]，為研究曲線以曲率相關的速度演化時提出來之方法。本論文是以此方法來描述散射體使邊界的曲面平滑化。在等位函數方法中，給定平面上的一條封閉曲線，以曲線為邊界，把整個平面區分為兩個區域（外部區域與內部區域），用於描述不同之介質。定義一距離函數（distance function） $\phi(x, y)$ 之大小表示為空間中任意點到曲線的最短距離，定義在曲線內部點的距離為負值，外部點的距離正值。曲線上的點就是距離函數值為 0 的點，距離函數的 zero level set [17]，如式 (2.7.1)。在一個二維的區域中，定義空氣與介電材料交界面為 $\phi(x, y)$ ，在介電材料中時 $\phi > 0$ ，而在空氣中時 $\phi < 0$ 。使用有限差分法做近似散射體的動作時，如果封閉曲線（或稱介質交界面）的梯度變化很大時，誤差累積會加大，所以需要在適度的網格內，做平滑化（smoothing）的步驟，使得等位函數 ϕ 始終保持著正負號距離函數的性質，以達到散射體的曲面平滑化。以矽（silicon）圓柱散射體為例，圖 2.5(a) 未使用等位函數法平滑化，可以發現在邊界介電常數梯度變化極劇，圖 2.5(b) 則使用等位函數法平滑化，在邊界上介電常數梯度的變化較為平滑，符合散射體邊界曲面的平滑化，可大幅降低因數值計算結果不合物理震盪解的行為。

$$\Phi = [1 + e^{\phi(x, y)/(\xi \cdot \delta)}]^{-1}. \quad (2.7.1)$$

其中 δ 為網格大小， $\phi(x, y)$ 為距離函數， $\xi = 0.3/\sqrt{8}$ ， ξ 愈大所描述的散射體愈趨於平緩。

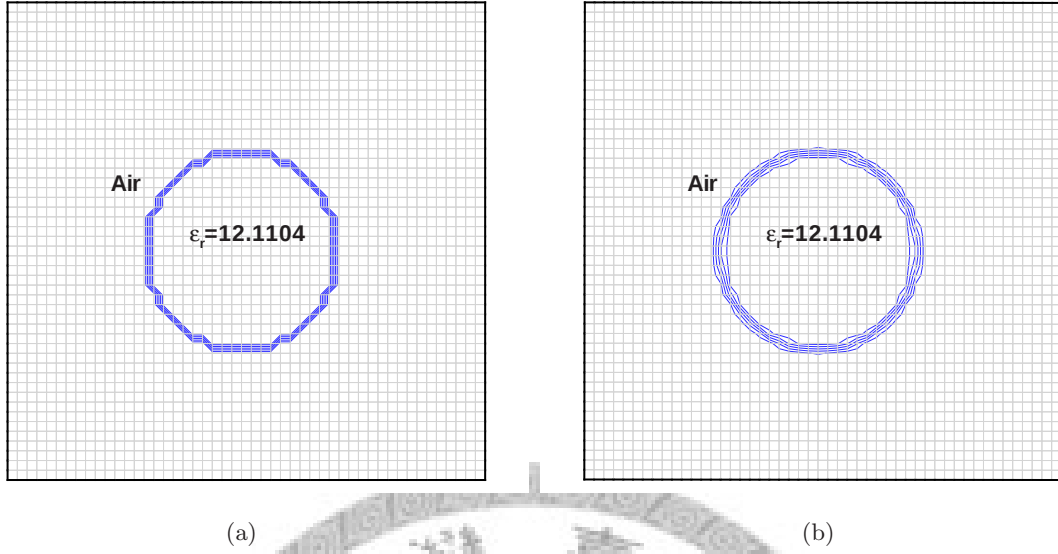


圖 2.5: (a) 圓柱散射體未使用等位函數法平滑化；(b) 圓柱散射體使用等位函數法平滑化。

2.8 吸收邊界條件 (Absorbing Boundary Condition)

受限於電腦記憶體容量，我們只能取一適當的計算空間來模擬電磁行為，對於非計算區域將不用計算。模擬的結構通常定義在無窮大的空間內，為了使模擬結果過更符合真實物理的行為，邊界條件必須符合電磁波無限制向外傳遞的特性，即在邊界沒有反射，可以被看做是散射波離開此邊界時被吸收掉，這種邊界的處理方法稱為吸收邊界條件 (absorbing boundary condition, ABC) [18]。

一維齊次的向量波方程式 (homogeneous vector wave equation)

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} - \epsilon\mu \frac{\partial^2 E_x}{\partial t^2} = 0 \quad (2.8.1)$$

可寫成

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \epsilon\mu \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] E_x = 0, \quad (2.8.2)$$

因式分解成

$$\left[\frac{\partial}{\partial z} - \sqrt{\epsilon\mu} \frac{\partial}{\partial t} \right] E_x = 0, \quad (2.8.3)$$

及

$$\left[\frac{\partial}{\partial z} + \sqrt{\epsilon\mu} \frac{\partial}{\partial t} \right] E_x = 0. \quad (2.8.4)$$

滿足上式之型式爲

$$E_x(t + \sqrt{\varepsilon\mu}z), \quad (2.8.5)$$

$$E_x(t - \sqrt{\varepsilon\mu}z), \quad (2.8.6)$$

式 (2.8.5) 所表示前進波往負 z 方向，式 (2.8.6) 所表示前進波往正 z 方向，都滿足 (2.8.1) 解的型式 [19]，在此以考慮負方向的吸收條件爲例子，在時間 $t = (n+1)\Delta t$ 及空間 $z = 1/2$ 差分，式 (2.8.4) 可近似爲

$$\sqrt{\varepsilon\mu} \frac{\partial E_x^{n+1}(\frac{1}{2})}{\partial t} \simeq \sqrt{\varepsilon\mu} \frac{\frac{E_x^{n+2}(0) + E_x^{n+2}(1)}{2} - \frac{E_x^n(0) + E_x^n(1)}{2}}{2 \cdot \Delta t}, \quad (2.8.7)$$

$$\frac{\partial E_x^{n+1}(\frac{1}{2})}{\partial z} \simeq \frac{\frac{E_x^{n+2}(1) + E_x^n(1)}{2} - \frac{E_x^{n+2}(0) + E_x^n(0)}{2}}{\Delta z}, \quad (2.8.8)$$

結合 (2.8.7)(2.8.8) 兩式

$$\frac{\frac{E_x^{n+2}(1) + E_x^n(1)}{2} - \frac{E_x^{n+2}(0) + E_x^n(0)}{2}}{\Delta z} - \sqrt{\varepsilon\mu} \frac{\frac{E_x^{n+2}(0) + E_x^{n+2}(1)}{2} - \frac{E_x^n(0) + E_x^n(1)}{2}}{2 \cdot \Delta t} = 0, \quad (2.8.9)$$

整理可得

$$E_x^{n+2}(0) = E_x^n(1) + \frac{(2 \cdot \frac{c\Delta t}{\Delta z} - 1)}{(2 \cdot \frac{c\Delta t}{\Delta z} + 1)} [E_x^{n+2}(1) - E_x^n(0)], \quad (2.8.10)$$

式 (2.8.10) 爲一階吸收邊界條件，在一維問題上滿足穩定準則的條件下 $\frac{c\Delta t}{\Delta z} = \frac{1}{2}$ 則左邊界吸收條件可簡化

$$E_x^{n+2}(0) = E_x^n(1). \quad (2.8.11)$$

2.9 數值分析之穩定準則

FDTD 法是以中央差分爲基礎，根據泰勒展開式可以知道，當取的 Δx 愈小則誤差愈小，愈能逼近馬克斯威爾的解，但相對的同樣的解析空間範圍時所使用的記憶體愈大與計算時間變長。如果是真空與介電材料混合一起時，只在介電材料中使用較小的網格來計算，在使用記憶體上會變得比較有效率，不過在邊界網格轉換更爲複雜，因此這裡我們只考慮使用同一種網格尺寸，且必須小於 $\frac{1}{10}$ 最短入射波長，假使結構物細微所需的網格數目會非常多，所以在取捨減少計算時間與答案精準度之間適當地選擇空間隔距 Δx ，及時間隔距 Δt 將變得很重要。

一般來說使用 FDTD 法求解時，空間隔距選取必須符合以下要求：

- (1) 空間隔距必須小於入射波長，正常來講描述自由空間的波，至少小於模擬的最短波長的 $\Delta \leq \frac{\lambda_{min}}{10}$ ，而在色散性介質必須遠小於 $\Delta \ll \frac{\lambda_{min}}{10}$ 。
- (2) 散射體的解析度，格點的場值不宜有劇烈之變化，本論文使用等位函數法描述散射體，更趨近於物理現象。

而時間隔距 Δt 和空間格距 Δx 、 Δy 、 Δz 必須符合數值穩定準則 (stability criterion) [14]，必須符合：

$$c\Delta t \leq \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2}}}. \quad (2.9.1)$$

c 為真空中光速，若是使用單一網格 (即 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \delta$)，可簡化為

$$\Delta t \leq \frac{\delta}{\sqrt{d} \cdot c}. \quad (2.9.2)$$

d 為模擬的維度，這裡隱含的物理意義是在時間增量的選取必須小於或等於波在網格最短的傳遞時間，如此計算之結果才不至於發散，否則迭代時間之增長必然發散。

2.10 完美匹配層 (Perfectly Matched Layer)

完美匹配層 (perfectly matched layer, PML) 的概念是在 1994 年由 Berenger 所提出 [20]，雖然需要較多的記憶體，是為目前最有效的吸收邊界。由 Berenger 所提出的 PML 需要相每一個方向的電場和磁場分成兩個分量處理，因此將會使用更多的記憶體，且必須修正 FDTD 更新程式；在 1995 年由 Z. S. Sacks 提出 [21]，將 PML 設計成各向異性 (anisotropic) 的特性，可以改善上述缺點，藉由控制 PML 層的導電或導磁率的變化，能將散射波快速的衰減掉；1996 年 S. D. Gendeny 推導了比較完整 anisotropic perfectly matched layer (APML) 的方程 [22]。

2.10.1 Anisotropic Perfectly Matched Layer 基本原理

現有一時間諧和的均勻平面波在同方性介質 (Region 1, $x < 0$) 以任意入射角 θ_i 入射於一個單軸異性介質 (Region 2, $x > 0$) 內，介面位置在 $x = 0$ 的平面，在 Region 1，與 Region 2 介質內電磁波傳遞符合馬克斯威爾方程式如圖 2.6 所示：

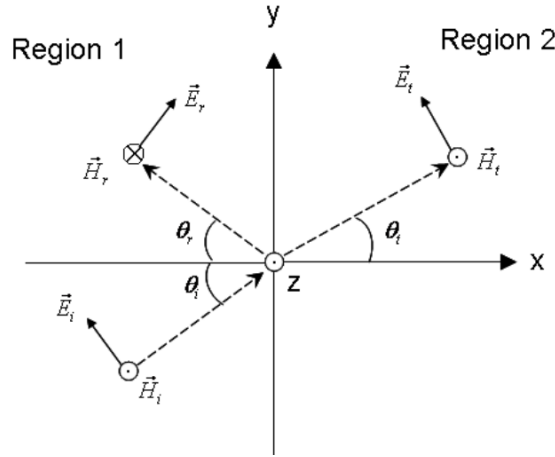


圖 2.6: 平面波的入射示意圖。

Region 1 內的入射波表示成：

$$\tilde{H}_i = \hat{z} H_0 e^{i\beta_{1x}x + i\beta_{1y}y}, \quad (2.10.1)$$

Region 2 內的馬克斯威爾的旋度方程式滿足表示成：

$$\beta_2 \times \tilde{E} = \omega \bar{\bar{\mu}}_2 \tilde{H}, \quad (2.10.2)$$

$$\beta_2 \times \tilde{H} = -\omega \bar{\bar{\epsilon}}_2 \tilde{E}. \quad (2.10.3)$$

假設 Region 2 的單軸異性介質的介電係數與導磁係數的張量 (tensors) 表示為：

$$\bar{\bar{\epsilon}}_2 = \epsilon_2 \begin{bmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & b \end{bmatrix}; \quad \bar{\bar{\mu}}_2 = \mu_2 \begin{bmatrix} c & 0 & 0 \\ 0 & d & 0 \\ 0 & 0 & d \end{bmatrix}. \quad (2.10.4)$$

因為介質材料對稱於 x 軸，所以 $\epsilon_{yy} = \epsilon_{zz}$ ， $\mu_{yy} = \mu_{zz}$ 且 $\beta_2 = \hat{x}\beta_{2x} + \hat{y}\beta_{2y}$ ，齊次向量赫姆霍茲波方程式 (homogeneous vector Helmholtz's wave equation) 可寫成：

$$\beta_2 \times (\bar{\bar{\epsilon}}_2^{-1} \beta_2) \times \tilde{H} + \omega^2 \bar{\bar{\mu}}_2 \tilde{H} = 0, \quad (2.10.5)$$

寫成矩陣型式

$$\begin{bmatrix} k_2^2 c - (\beta_{2y})^2 b^{-1} & \beta_{2x} \beta_{2y} b^{-1} & 0 \\ \beta_{2x} \beta_{2y} b^{-1} & k_2^2 d - (\beta_{2x})^2 b^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & k_2^2 d - (\beta_{2x})^2 b^{-1} - (\beta_{2y})^2 a^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{H}_x \\ \tilde{H}_y \\ \tilde{H}_z \end{bmatrix} = 0, \quad (2.10.6)$$

其中 $k_2^2 = \omega^2 \mu_2 \varepsilon_2$ 。由式 (2.10.6) 可以求得 β_{2_x} 的四個特徵解，這些解可以分解成 TE_z 與 TM_z 模態，其符合色散關係如下：

$$k_2^2 - (\beta_{2_x})^2 b^{-1} d^{-1} - (\beta_{2_y})^2 a^{-1} d^{-1} = 0 : TE_z \left(\tilde{H}_x, \tilde{H}_y = 0 \right), \quad (2.10.7)$$

$$k_2^2 - (\beta_{2_x})^2 b^{-1} d^{-1} - (\beta_{2_y})^2 b^{-1} c^{-1} = 0 : TM_z \left(\tilde{H}_z = 0 \right). \quad (2.10.8)$$

計算兩平面間的反射係數，假設在 Region 1 有一個 TE_z 模態的入射波，其入射波與反射波合成的全場可以表示成：

$$\tilde{H}_1 = \hat{z} H_0 (1 + \Gamma e^{-2i\beta_{1_x}x}) e^{i\beta_{1_x}x + i\beta_{1_y}y}, \quad (2.10.9)$$

$$\tilde{E}_1 = \left[-\hat{x} \frac{\beta_{1_y}}{\omega \varepsilon_1} (1 + \Gamma e^{-2i\beta_{1_x}x}) + \hat{y} \frac{\beta_{1_x}}{\omega \varepsilon_1} (1 - \Gamma e^{-2i\beta_{1_x}x}) \right] H_0 e^{i\beta_{1_x}x + i\beta_{1_y}y}, \quad (2.10.10)$$

其中 Γ 為反射係數，透射到 Region 2 的電磁波也是 TE_z 模態，透射的電磁場可表示成：

$$\tilde{H}_2 = \hat{z} H_0 \tau e^{i\beta_{2_x}x + i\beta_{2_y}y}, \quad (2.10.11)$$

$$\tilde{E}_2 = \left(-\hat{x} \frac{\beta_{2_y}}{\omega \varepsilon_2 a} + \hat{y} \frac{\beta_{2_x}}{\omega \varepsilon_2 b} \right) H_0 \tau e^{i\beta_{2_x}x + i\beta_{2_y}y}, \quad (2.10.12)$$

其中 τ 為透射係數。由於在邊界 $x = 0$ 處之切線方向電場及磁場是連續的分佈，可以求得反射係數 Γ 與透射係數 τ 分別為：

$$\Gamma = \frac{\beta_{1_x} - \beta_{2_x} b^{-1} \varepsilon_1 \varepsilon_2^{-1}}{\beta_{1_x} + \beta_{2_x} b^{-1} \varepsilon_1 \varepsilon_2^{-1}} ; \quad \tau = 1 + \Gamma = \frac{2\beta_{1_x}}{\beta_{1_x} + \beta_{2_x} b^{-1} \varepsilon_1 \varepsilon_2^{-1}}, \quad (2.10.13)$$

根據相位匹配 (phase-matching) 條件

$$\beta_{2_y} = \beta_{1_y}, \quad (2.10.14)$$

將式 (2.10.14) 代入式 (2.10.7) 滿足 TE_z ，可求得

$$\beta_{2_x} = \sqrt{k_2^2 b d - (\beta_{1_y})^2 a^{-1} b}. \quad (2.10.15)$$

令 $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ ， $\mu_1 = \mu_2$ ， $d = b$ 與 $a^{-1} = b$ ， $k_2 = k_1$ ，因此可得

$$\beta_{2_x} = \sqrt{k_1^2 b^2 - (\beta_{1_y})^2 b^2} = b \sqrt{k_1^2 - (\beta_{1_y})^2} \equiv b \beta_{1_x}, \quad (2.10.16)$$

將 (2.10.16) 代入式 (2.10.13) 滿足所有的入射角度的反射係數 $\Gamma = 0$ ，最後可以得到 $b = d$ 與 $a^{-1} = b$ 。同上述處理過程，並代入 TM_z 模態中，依舊可得 $b = d$ 與 $c^{-1} = d$ 。

由以上之推導可知，如果 $b = d = a^{-1} = c^{-1}$ ，平面波將會完全的透射而進入 Region 2 內，而不會反射，與入射波的角度，極化方向和頻率沒有關係，我們稱此為單軸各項異性完美匹配層。因此

$$\bar{\bar{\epsilon}}_2 = \epsilon_1 \bar{\bar{s}} \quad ; \quad \bar{\bar{\mu}}_2 = \mu_1 \bar{\bar{s}}, \quad (2.10.17)$$

$$\bar{\bar{s}} = \begin{bmatrix} s_x^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & s_x & 0 \\ 0 & 0 & s_x \end{bmatrix}. \quad (2.10.18)$$

選擇具有損耗性的單軸性介質 $s_x = 1 - \frac{\sigma_x}{i\omega\epsilon_1}$ ，可得

$$\beta_{2x} = s_x \beta_{1x} = \left(1 + i \frac{\sigma_x}{\omega\epsilon_1}\right) \beta_{1x}, \quad (2.10.19)$$

從式可以看出 β_{2x} 的實部與入射波的 β_{1x} 相同，表示兩個區域的相速度與波特性阻抗皆相同，既是達到完全的匹配，且當波進入單軸各項異性的介質時，會沿著 x 方向逐漸衰減。

TE_z 模態的入射波其場強在單軸各項異性高損耗的介質內可以表示成：

$$\tilde{H}_2 = \hat{z} H_0 e^{i\beta_{1x}x + i\beta_{1y}y} e^{-\sigma_x x \eta_1 \cos \theta}, \quad (2.10.20)$$

$$\tilde{E}_2 = (-\hat{x} s_x \eta_1 \sin \theta + \hat{y} \eta_1 \cos \theta) H_0 e^{i\beta_{1x}x + i\beta_{1y}y} e^{-\sigma_x x \eta_1 \cos \theta}, \quad (2.10.21)$$

其中 $\eta_1 = \sqrt{\frac{\mu_1}{\epsilon_1}}$ ， θ 為入射方向與 x 軸的夾角，因此電磁波進入單軸性介質後，相速度仍與入射波相同，並將延著 x 的方向逐漸地衰減，其衰減常數與頻率無關，而只與入射角度 θ 以及介質的導電係數 σ_x 有關。

2.10.2 離散化處理

上一節推導已經將 APML 的基本原理推導出來了，但在計算上必須要將其微分型式改成差分型式才能實行在程式裡，亦即將上一節推出來的結果離散化。在三維空間中必須含角落部分的電磁波吸收，因此改寫 (2.10.18) 的介電張量為

$$\begin{aligned} \bar{\bar{s}} &= \begin{bmatrix} s_x^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & s_x & 0 \\ 0 & 0 & s_x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_y & 0 & 0 \\ 0 & s_y^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & s_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_z & 0 & 0 \\ 0 & s_z & 0 \\ 0 & 0 & s_z^{-1} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{s_y s_z}{s_x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{s_x s_z}{s_y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{s_x s_y}{s_z} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2.10.22)$$

其中 $S_x = 1 - \frac{\sigma_x(x)}{i\omega\epsilon_0}$ 、 $S_y = 1 - \frac{\sigma_y(y)}{i\omega\epsilon_0}$ 、 $S_z = 1 - \frac{\sigma_z(z)}{i\omega\epsilon_0}$ 分別代表 x、y、z 三個方向的變數配合 (2.2.9) 與 (2.2.10) 則可改寫成

$$-i\omega \cdot \left(\frac{S_y S_z}{S_x} \right) \tilde{D}_x = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \cdot \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right), \quad (2.10.23a)$$

$$-i\omega \cdot \left(\frac{S_x S_z}{S_y} \right) \tilde{D}_y = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \cdot \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right), \quad (2.10.23b)$$

$$-i\omega \cdot \left(\frac{S_x S_y}{S_z} \right) \tilde{D}_z = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \cdot \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right). \quad (2.10.23c)$$

$$-i\omega \cdot \left(\frac{S_y S_z}{S_x} \right) H_x = -\frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \cdot \left(\frac{\partial \tilde{E}_z}{\partial y} - \frac{\partial \tilde{E}_y}{\partial z} \right), \quad (2.10.24a)$$

$$-i\omega \cdot \left(\frac{S_x S_z}{S_y} \right) H_y = -\frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \cdot \left(\frac{\partial \tilde{E}_x}{\partial z} - \frac{\partial \tilde{E}_z}{\partial x} \right), \quad (2.10.24b)$$

$$-i\omega \cdot \left(\frac{S_x S_y}{S_z} \right) H_z = -\frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \cdot \left(\frac{\partial \tilde{E}_y}{\partial x} - \frac{\partial \tilde{E}_x}{\partial y} \right). \quad (2.10.24c)$$

以前進波往 x 方向的 PML 吸收為例，因為單軸異性介質與 y、z 無關，所以可以令

$$S_x = 1 - \frac{\sigma_x(x)}{i\omega\epsilon_0}; \quad s_y = 1; \quad s_z = 1, \quad (2.10.25)$$

將式 (2.10.25) 代入式 (2.10.23a) 處理 $\tilde{D}_x$ 分量可寫成

$$-i\omega \tilde{D}_x \left(1 - \frac{\sigma_x(x)}{i\omega\epsilon_0} \right)^{-1} = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right), \quad (2.10.26)$$

$$-i\omega \tilde{D}_x = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \left(1 - \frac{\sigma_x(x)}{i\omega\epsilon_0} \right) \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right), \quad (2.10.27)$$

$$-i\omega \tilde{D}_x = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) - \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \frac{\sigma_x(x)}{i\omega\epsilon_0} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right). \quad (2.10.28)$$

在時域下離散 (2.10.28)

$$\tilde{D}_x^n = \tilde{D}_x^{n-1} + \Delta t \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} (\text{curl}_{yz}) + I_{D_x}^n \Delta t, \quad (2.10.29)$$

其中

$$I_{D_x}^n = I_{D_x}^{n-1} + \frac{\sigma_x(x) \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \Delta t}{\varepsilon_0} (\text{curl}_{zy}) \quad (2.10.30)$$

$$\text{curl}_{zy} = \frac{\partial H_z^{n-1/2}}{\partial y} - \frac{\partial H_y^{n-1/2}}{\partial z}. \quad (2.10.31)$$

將式 (2.10.25) 代入式 (2.10.23b) 處理 $\tilde{D}_y$ 分量可寫成

$$-i\omega \tilde{D}_y + \frac{\sigma_x(x)}{\varepsilon_0} \tilde{D}_y = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right), \quad (2.10.32)$$

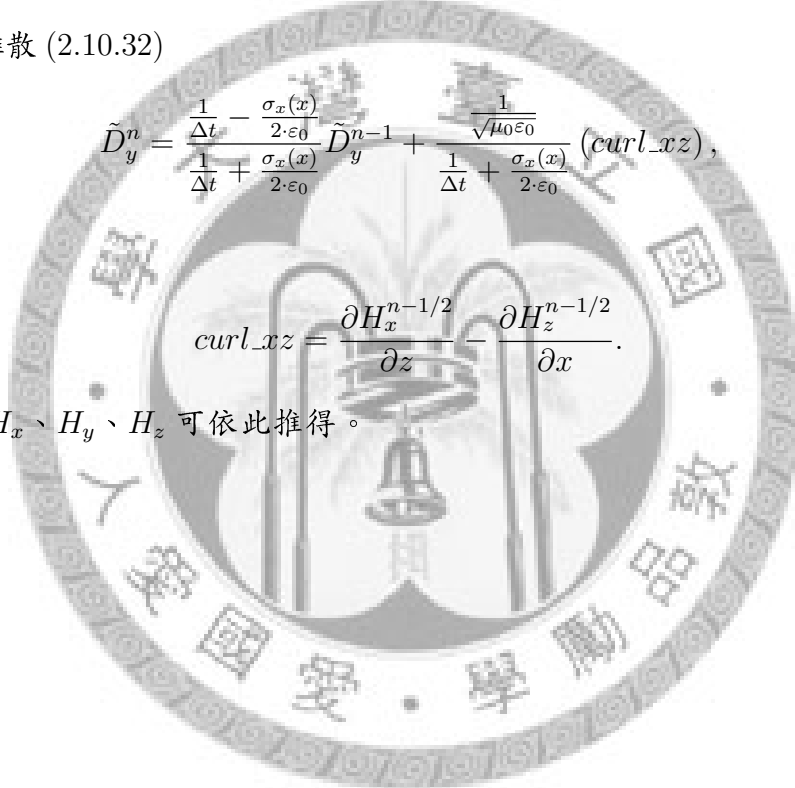
在時域下離散 (2.10.32)

$$\tilde{D}_y^n = \frac{\frac{1}{\Delta t} - \frac{\sigma_x(x)}{2 \cdot \varepsilon_0}}{\frac{1}{\Delta t} + \frac{\sigma_x(x)}{2 \cdot \varepsilon_0}} \tilde{D}_y^{n-1} + \frac{\frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}}}{\frac{1}{\Delta t} + \frac{\sigma_x(x)}{2 \cdot \varepsilon_0}} (\text{curl}_{xz}), \quad (2.10.33)$$

其中

$$\text{curl}_{xz} = \frac{\partial H_x^{n-1/2}}{\partial z} - \frac{\partial H_z^{n-1/2}}{\partial x}. \quad (2.10.34)$$

同理 $\tilde{D}_z$, H_x 、 H_y 、 H_z 可依此推得。



第三章

平行計算

3.1 Message Passing Interface 簡介

MPI(message passing interface) 是第一個標準化的資料傳遞 (message passing) 平行語言。可以使用在以 Fortran、C、C++ 等語言撰寫的程式上及各種平行電腦間。MPI 平行程式可以在分散式記憶體平行系統 (distributed memory parallel system) 上執行，也可以在共用記憶體叢集式平行系統上 (shared memory parallel system) 執行。主要的優點在於可攜帶性與容易使用。1994 年發表的 MPI 1.0 版本包含了 129 個函數，讓程式人員來選用。MPI 協會在 1998 年公布了 MPI 2.0 版的規格，已超過 200 函數 [23]。MPI 能使數台電腦能同時的工作達成共同的工作目標，各電腦間使用 "message" 來傳遞溝通訊息。各電腦各自使用自己的處理器計算，使用者可以不需知道其 MPI 核心語言函式庫，僅需撰寫出符合平行處理的程序。目前最通用的 MPI 軟體是美國的 Argonne National Lab 與密西西比州立大學發展出來的免費軟體 MPICH，在各種平台上都可以找到其衍生版本。而本論文所使用為國家高速網路與計算中心所安裝的 MPI 1.2 函式庫。

平行系統依照架構的不同，可以分為共享記憶體架構與分散式記憶體架構，共享記憶體架構是每個處理器可以存取同一記憶體模組，稱為共享式記憶體組態 (share memory configuration)，處理器和記憶體之間是以系統匯流排 (system bus) 來連接，如圖 3.2 所示。共享記憶體架構的處理器與記憶體的擴充將受限於主機板製造廠商，目前的市面大多只支援至雙處理器、四核心主機板的情況，擴充並不容易達成，解決問題的能力有限。分散式記憶體架構與

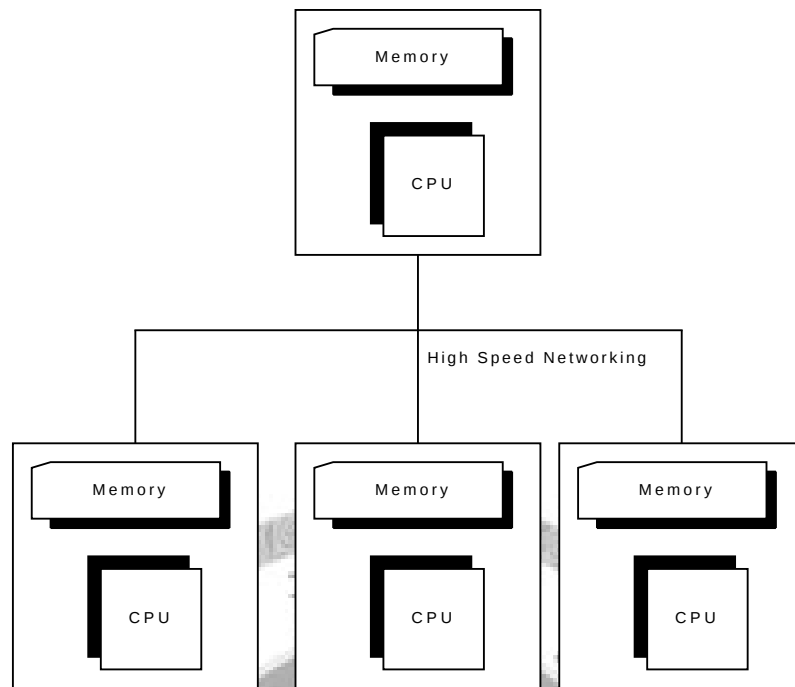


圖 3.1: 分散式記憶體架構之示意圖。

共享記憶體架構完全不同，每一個處理器都是各自獨立而擁有各自的記憶體及作業系統，通常稱之為節點，系統中之處理器之間的訊息傳遞經由特殊高速網路連結，組成一個平行電腦系統，如圖 3.1 所示。叢集式電腦系統的擴充性是非常高的，一般高速計算中心的工作站多此用此種架構。根據國際超級電腦大會 (International Supercomputer Conference, ISC) 目前公布的五百大超級電腦由 IBM 為美國能源部 (Department of Energy, DOE) 所屬的國家核能安全管理部 (National Nuclear Security Administration, NNSA) 建立的超級電腦 Roadrunner 為全球最強電腦，位於美國新墨西哥州的洛斯阿拉莫斯國家實驗室 (Los Alamos National Laboratory, LANL) 擁有 122400 個 CPUs，採 PowerXCell 8i 3200 MHz (12.8 GFlops) 處理器總計算效能 (Rmax) 為 1026.00 TFlop/s，理論值 (Rpeak) 為 1375.78 TFlop/s [24]。

MPI 平行計算主要有三個觀念，訊息資料型態 (message datatype)、通訊者 (communicator)、通訊作業 (communication operation) [25]。訊息稱為封包 (envelope)，訊息封包的內容稱為訊息緩衝 (message buffer) 包含了訊息位址 (address)、訊息長度。在傳送訊息的通訊作業上定義訊息緩衝的資料型態，可以支援異質性計算 (heterogeneous computing)，而達到跨越平臺的效果。

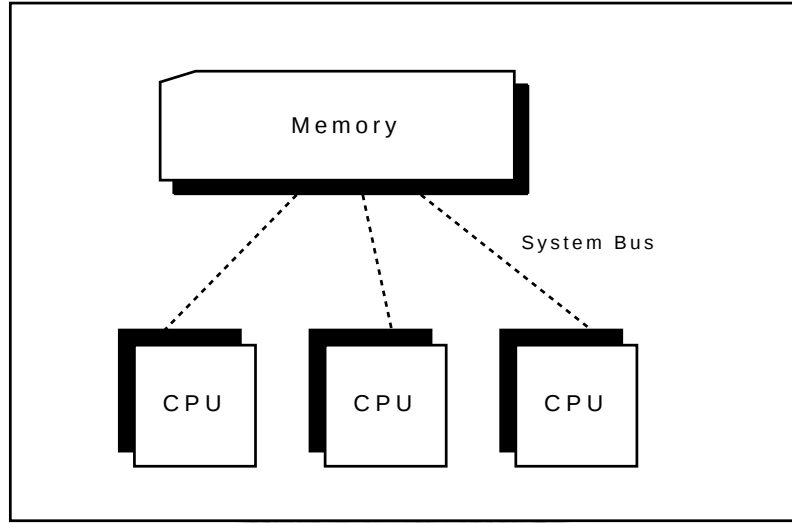


圖 3.2: 共享式記憶體架構之示意圖。

3.2 時域有限差分法的平行化

3.2.1 計算機資源

使用時域有限差分方法求解馬克斯威爾方程式，雖然能由時間迭代快速求得空間中所有的電場與磁場的分佈，根據差分的性質，當網格分割的愈小則精確度提高，所需的計算機資源相對許多，但受限制於計算機的速度，以及記憶體大小，往往僅能模擬小空間或粗網格。假使模擬大範圍的電磁場問題時，如果沒有使用平行計算的技巧，必然所耗費的時間更多，甚至由於記憶體的不足，而無法運算 [26]。

今考慮三維的時域有限差分方法，假設單胞數目為 $N = NX \times NY \times NZ$ 。以本程式為例子，使用雙精確度 (double precision) 來儲存，電場 (E)、磁場 (H) 所需六個分量，位移電流密度 (D) 三個分量，還需要存放散射體參數共四個變數 (σ 、 $\epsilon(\infty)$ 、 ω_D 和 Γ_D)，及前置運算 (因程式撰寫方便非必要，如 `geo_a`，`geo_b`，`geo_c` 及 `tmp_exp`) 由於 x 、 y 、 z 方向各自獨立共 24 個分量，如此一來單單要完成一最基本 FDTD 運算所需的記憶體容量為

$$N \times \left(\frac{(6 + 3 + 24) \text{個分量}}{\text{單胞數}} \times \frac{8 \text{bytes}}{\text{分量}} \right) \quad (3.2.1)$$

假設 $NX = NY = NZ = 100$ ，則所需的記憶體容量為 257.8 Mbytes。因此當網格大小 (Δ) 每減半一次所需的記憶體將是以 8 倍成長，這裡尚不包括吸收邊界條件所需的記憶體，故實際上所需的記憶體容量會更多。

至於計算時間，假設總步數為 $Nstep$ ，在我們的程式中，每更新一個方程式所需的運算次數 (operator) 為 35 次

$$N \times \left(\frac{6\text{個分量}}{\text{單胞數}} \times \frac{35\text{次運算}}{\text{分量}} \times Nstep \right) \quad (3.2.2)$$

根據數值穩定準則 (stability criterion) (式 2.9.2)， $Nstep$ 與 N 的關係式如下

$$Nstep \cong 35 \times \sqrt{3} N^{\frac{1}{3}} \quad (3.2.3)$$

這表示當空間網格的大小 (Δ) 減半時，要得到相同的結果則時間步數必須多 $\sqrt{3}$ 倍，總計算量則增加 $8\sqrt{3} \cong 13.8564$ 倍。這裡尚不包括散射體，波源及 PML 初始參數之設定，實際上運算量會多很多。由上述的記憶體容量與計算時間分析，不難發現程式的平行化在 FDTD 法上是急迫且必要的。

3.2.2 序列程式簡介

程式執行時會先對散射體，吸收邊界做初始化，此時為 $T = 0$ 。要求得下一步的電場，必定是以上一步的磁場來計算得到的。同理，若要求得下一步的磁場，必定是以上一步的電場來計算得到的，每更新一次電場或磁場則時間加入 $\Delta T/2$ ，給下一步計算。若有源項，可以在更新電場或磁場時加入電流源或磁流源，最後將結果輸出。序列程式可以用簡單的流程圖表示，如圖 3.3 所示。

3.2.3 平行化設計方式與計算流程

平行計算目的為有效縮減計算時間，與分散記憶體，根據序列程式的流程圖，FDTD 大部分計算時間在電場與磁場分量的更新，而記憶體容量則由於網格數的多寡決定，所以根據這兩項原則來對平行化作設計。

以二維有限差分做二維資料切割為例，更新某點時需要前、後、上、下及本身上一個時間點的值，如圖 3.4 所示。因此在做資料切割與計算切割時，在靠近邊界的點的迭代會使用到相鄰的 CPU 的值，故邊界的點必須與相鄰的 CPU 做資料交換。假設將序列程式分割成 16 顆處理器 (process) 做運算。數字代表處理器的編號，分別為 0 ~ 15，如圖 3.5 所示。假設以鄰近的 CPU4、5 為例，圖 3.6 在更新 CPU5 的 $J_{local}=JSTART$ 的資料時，需要用到 CPU4 的 $J_{local}=JEND$ ，而在更新 CPU4 的 $J_{local}=JEND$ 的資料時，需要用到 CPU5 的 $J_{local}=JSTART$ ，所以必須做資料之交換，以將 CPU4 的 $J_{local}=JEND$ 交換到 CPU5 的 $J_{local}=JSTART-1$



圖 3.3: 序列程式之計算流程。

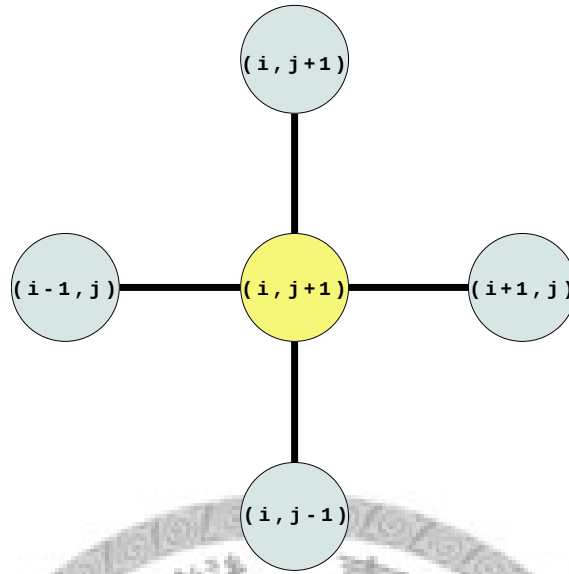


圖 3.4: 二維時域有限差分方法所需之計算格點。

當做鬼細胞 (ghost cell)，而 CPU5 的 $J_{\text{local}} = \text{JSTART}$ 交換到 CPU4 的 $J_{\text{local}} = \text{JEND} + 1$ 當做鬼細胞 (ghost cell)。同理，CPU1、5，CPU9、5 和 CPU6、5 相同的動作，差別只在於鄰近的 CPU 的不同需要不同的資料來源，如此才能正確的完成一次時間步的運算。其他的分量在計算前都必須與鄰近的 CPU 做資料之交換。

當然二維的計算還有一維資料切割的方式，分別為欄切割、列切割。兩種相當類似只是方向的不同，圖 3.7 所示，也都比二維資料切割容易的多。一般而言，二維的計算以二維資料切割的方式效率最高，且切割的區塊愈接近正方形愈好。

三維的計算比二維更複雜，這裡以一維的資料切割 z 方向為例子，在三維裡更新某點時需要前、後、左、右、上、下及本身上一個時間點的值，如圖 3.8 所示。因此在做資料切割時必須將邊界的資料與相鄰的 CPU 做資料之交換，三維的資料交換是以整個資料面 (plane) 為基礎，而二維是以資料線 (line) 為基礎。以圖 3.9 為例，將序列程式分割成 8 顆 CPU 做運算，數字代表 CPU 編號，分別為 0 ~ 7，，假設以鄰近的 CPU4、5 為例，圖 3.10 所示，在更新 CPU5 的 $K_{\text{local}} = \text{KSTART}$ 的資料時，需要用到 CPU4 的 $K_{\text{local}} = \text{KEND}$ ，而在更新 CPU4 的 $K_{\text{local}} = \text{KEND}$ 的資料時，需要用到 CPU5 的 $K_{\text{local}} = \text{KSTART}$ ，所以必須做資料之交換，以將 CPU4 的 $K_{\text{local}} = \text{KEND}$ 交換到 CPU5 的 $K_{\text{local}} = \text{KSTART} - 1$ 當做鬼細胞 (ghost cell)，而 CPU5 的 $K_{\text{local}} = \text{KSTART}$ 交換到 CPU4 的 $K_{\text{local}} = \text{KEND} + 1$ 當做鬼細胞 (ghost cell)。同理 CPU6、5 相同的動作，差別只在於鄰近的 CPU 的不同需要不同的資料來源，如此才能正確的完成一次時間步運算。其他的分量在計

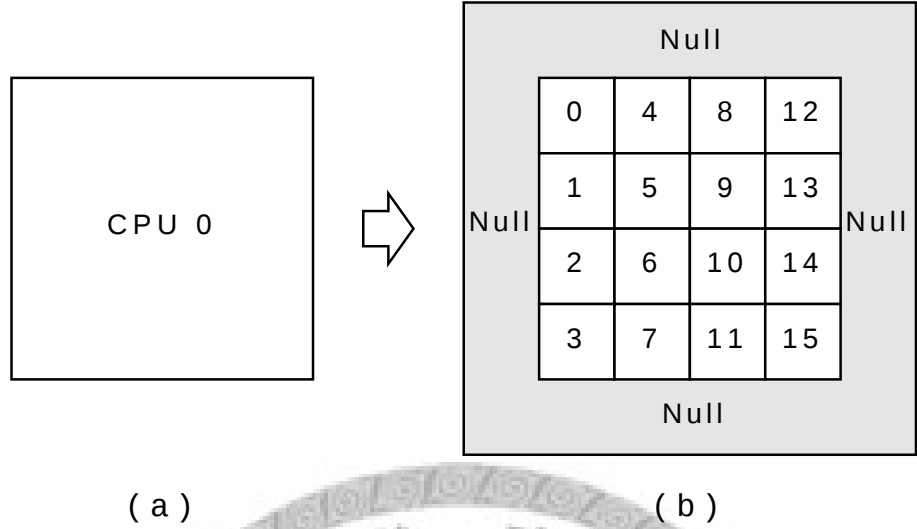


圖 3.5: 二維時域有限差分法之資料與計算切割示意圖 (a) 單一程序，(b) 分割成 16 顆處理器。

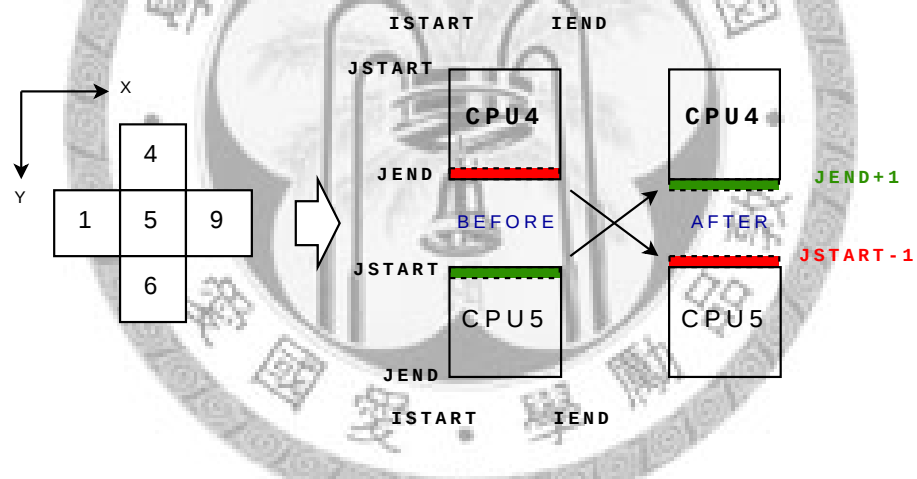


圖 3.6: 平行計算之二維資料與計算切割資料交換示意圖。

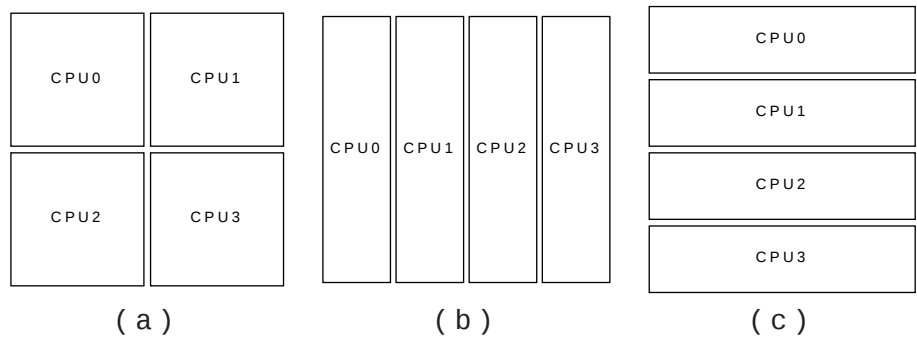


圖 3.7: 二維區域資料與計算切割分類 (a) 二維切割，(b) 一維欄切割，(c) 一維列切割。

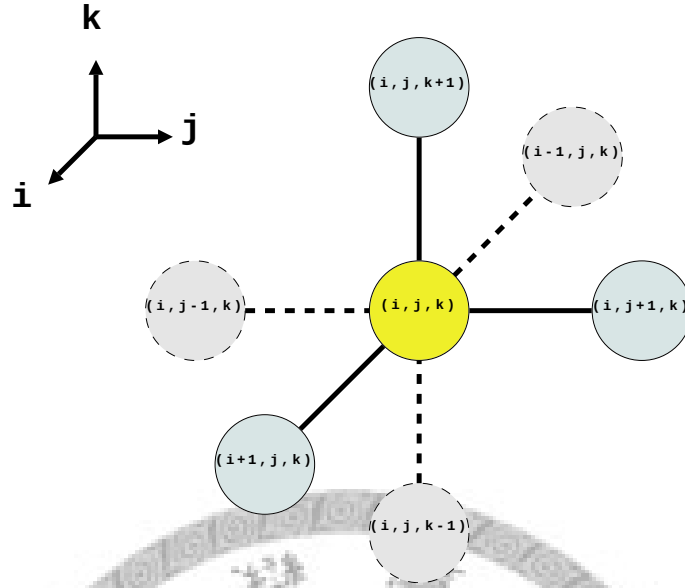


圖 3.8: 三維時域有限差分方法所需之計算格點。

算前都必須與鄰近的 CPU 做資料之交換。

當然三維的計算還有另外兩種一維資料切割的方式，即 x 、 y 方向。三種的二維資料切割的方式，即 x - y 、 y - z ，和 z - x ，三維資料切割一種，如圖 3.11 所示。總而言之，不管是二維或三維切割，都是從一維的切割做起，切割愈多，程式會愈複雜，實行起來也愈困難，雖然三維切割法的好處是記憶體可以發揮其最大的效益，且計算的負載較為平均，但需要使用到三個方向的資料交換，資料之交換因其繁複，將會直接影響到 MPI 平行效率的問題，因此本論文是用一維的切割方式。

綜合以上所述，規劃出的平行化之計算流程，如圖 3.12 所示。

3.3 平行化的效率

平行加速比 (parallel speed-up ratio) 與平行效率 (parallel efficiency) 是評估平行計算的兩個重要參數 [25]，他們會表現出在使用叢集式電腦平行於求解實際問題所獲得的好處。定義如下：

$$\text{平行增速比} = \frac{T_s(n)}{T_p(n)} \quad (3.3.1)$$

其中 $T_s(n)$ 為求解一規模 n 大小的問題在單處理器所運行的時間， $T_p(n)$ 為求解

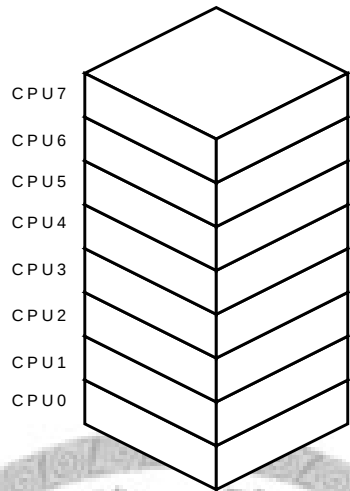


圖 3.9: 平行計算之三維區域資料一維切割 (使用 8 顆 CPU 之示意圖)。

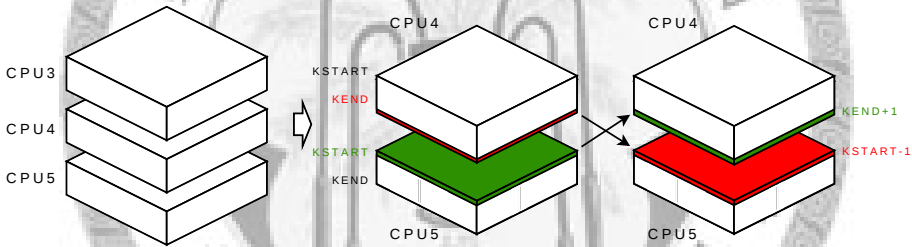


圖 3.10: 平行計算之三維區域以資料一維切割資料交換示意圖。

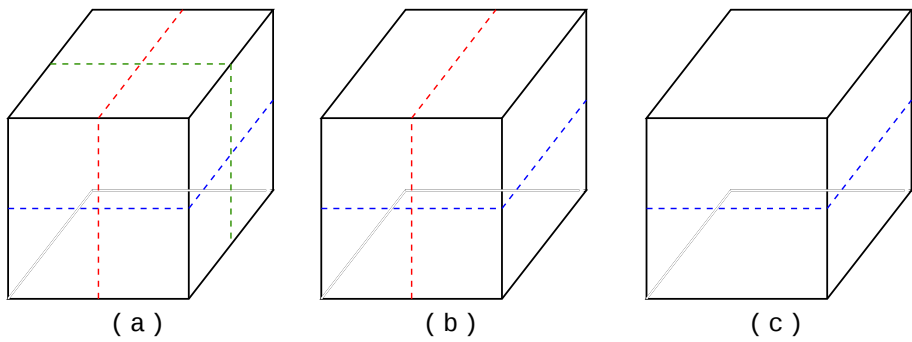


圖 3.11: 三維區域資料與計算切割分類 (a) 三維切割, (b) 二維切割, (c) 一維切割。



圖 3.12: 平行化程式之計算流程。

該問題的平行計算在 p 台處理器 (process) 所運行的時間。

$$\text{平行效率} = \frac{\text{平行增速比}}{p} \quad (3.3.2)$$

其中 p 為平行計算時所需的處理器 (process) 台數

測試題目：計算空間 $2 \times 2 \times 14 \mu\text{m}^3$ ，網格大小 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 20 \text{ nm}$ ，模擬的空間網格 $100 \times 100 \times 700$ ，時間間隔 $\Delta t = 3.3333E - 02 \text{ fs}$ ，時間步數 (time steps) 為 4000 步，平面波在自由空間傳遞，總模擬時間 133 fs 。測試機器為國家高速網路與計算中心 (NCHC) 的 HP 64 bit Cluster。本研究所使用的軟、硬體環境如下：(1) 硬體環境：每一節點，HP Integrity rx2600 server，Intel Itanium2 1.5 GHz (EPIC)，PC2100 ECC registered DDR266A SDRAM(8 GB x 169) + (16 GB x 23)，L1 Cache：32 KB，L2 Cache：256 KB，L3 Cache：6 MB (on-die)，192 Nodes (2) 軟體環境：Intel Fortran Compiler 8.1，MPI 1.2 函式庫。其測試題目的結果如表 3.3，圖 3.13 及圖 3.14 所示。

表 3.1: 平行化 FDTD 時間、增速比與效率。

NPROC ^a	time(sec)	speed-up	efficiency(%)
1 ^b	10204.878	1.0000	100.00
4	2696.331	3.7847	94.62
8	1385.540	7.3653	92.07
16	718.702	14.1990	88.74
32	375.739	27.1595	84.87
64	195.911	52.0894	81.39

^a Number of Process

^b 單處理器

本文是使用三維計算空間使用一維資料與計算切割屬於最簡單的寫法，此種切割方法會造成資料量過大的傳輸，直接影響到大量的資料交換與等待時間；另外使用三維計算空間使用三維資料與計算切割，會使每個處理器負載平均。綜合以上可以歸納出影響平行的效率的主要因素有以下幾種：

- (1) 程式平行化的百分比
- (2) 大量且繁複的資料交換與等待時間
- (3) 處理器負載不平衡

若要提高程式的平行效率可以針對以上幾點作改善。

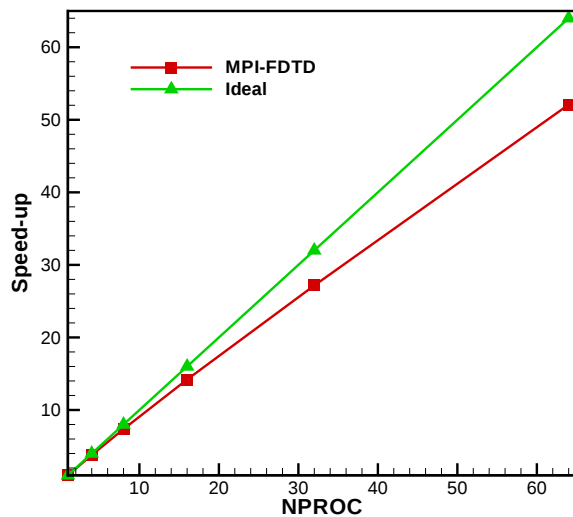


圖 3.13: 使用 1 ~ 64 顆處理器之平行加速比。

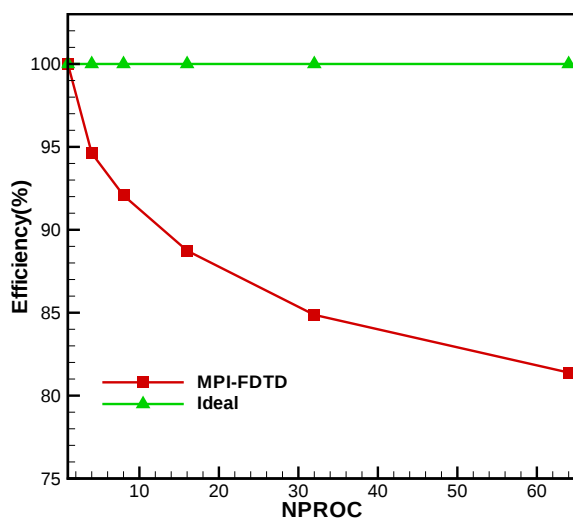


圖 3.14: 使用 1 ~ 64 顆處理器之平行效率 (%)。

第四章

程式之驗證

4.1 全場與散射場

全場與散射場驗證可以使用高斯波入射，分別討論在自由空間中有散射體的情況與沒有散射體的情況。以三維空間之全場與散射場為例子，當入射波往 y 方向傳遞到全場與散射場的交介面時，在沒有散射體的情況下，全場值進入散射場時入射波場值會被截掉，散射場值為零，如圖 4.1 所示為 y - z 平面 ($x=0$) E_z 場值。而當空間中有散射體時，散射場才会有散射波產生，如圖 4.2 所示為 y - z 平面 ($x=0$) E_z 場值。

4.2 完美匹配層之討論

此節的吸收邊界係使用在 3.10 節所推導出的完美匹配層 (PML)。以二維為例，在電磁場內 $(0,0)$ 的位置處給予一個高斯波：

$$\text{Gaussian pluse} = e^{-0.5((x-x_0)^2+(y-y_0)^2)} \quad (4.2.1)$$

其中 x_0 、 y_0 為高斯波起始位置，計算的結果如圖 4.3、圖 4.4、圖 4.5、圖 4.6 所示。圖 4.3 是高斯波的初始值，可以看到中心值為 1，就像水波的傳遞一樣，它會慢慢的散佈到四面八方，所以值會隨著中心距離的增加而慢慢的衰減，經過 100 個時間步時 (圖 4.4 所示)，可以看到此高斯波在經過 100 個時間步後依傳遞到了邊界，電場 E_z 最大值由原本的 1 變成了 0.18。經過了 350 時間步時 (圖 4.5 所示)，理論上此時高斯波已經傳出計算域的範圍，所以全場區範

圍的電場值應為 0，由於所採用的完美匹配層並非完美的吸收邊界條件，所以仍會有部分的波反射回來，在第 350 個時間步的解可以看到最大的電場 E_z 的最大值為 -0.0059 ，相較於初始的高斯波僅 0.59% ，而到了 700 個時間步時（圖 4.6 所示），計算域範圍電場 E_z 最大值為 -0.000825 ，相較於初始的高斯波僅 0.0825% ，由此可知此一吸收邊界確實可以將電磁波在邊界處吸收掉。另外反射誤差的場值為對稱 $x=y$ line 而非對稱 x -line 與 y -line，推論 Gaussian 波源中心點非正確放置於計算域的正中心，而是往負 x 與負 y 方向各偏移了半個格子的誤差，造成反射的場值對稱 $x=y$ line。

4.3 三維空間具有解析解的圓球散射

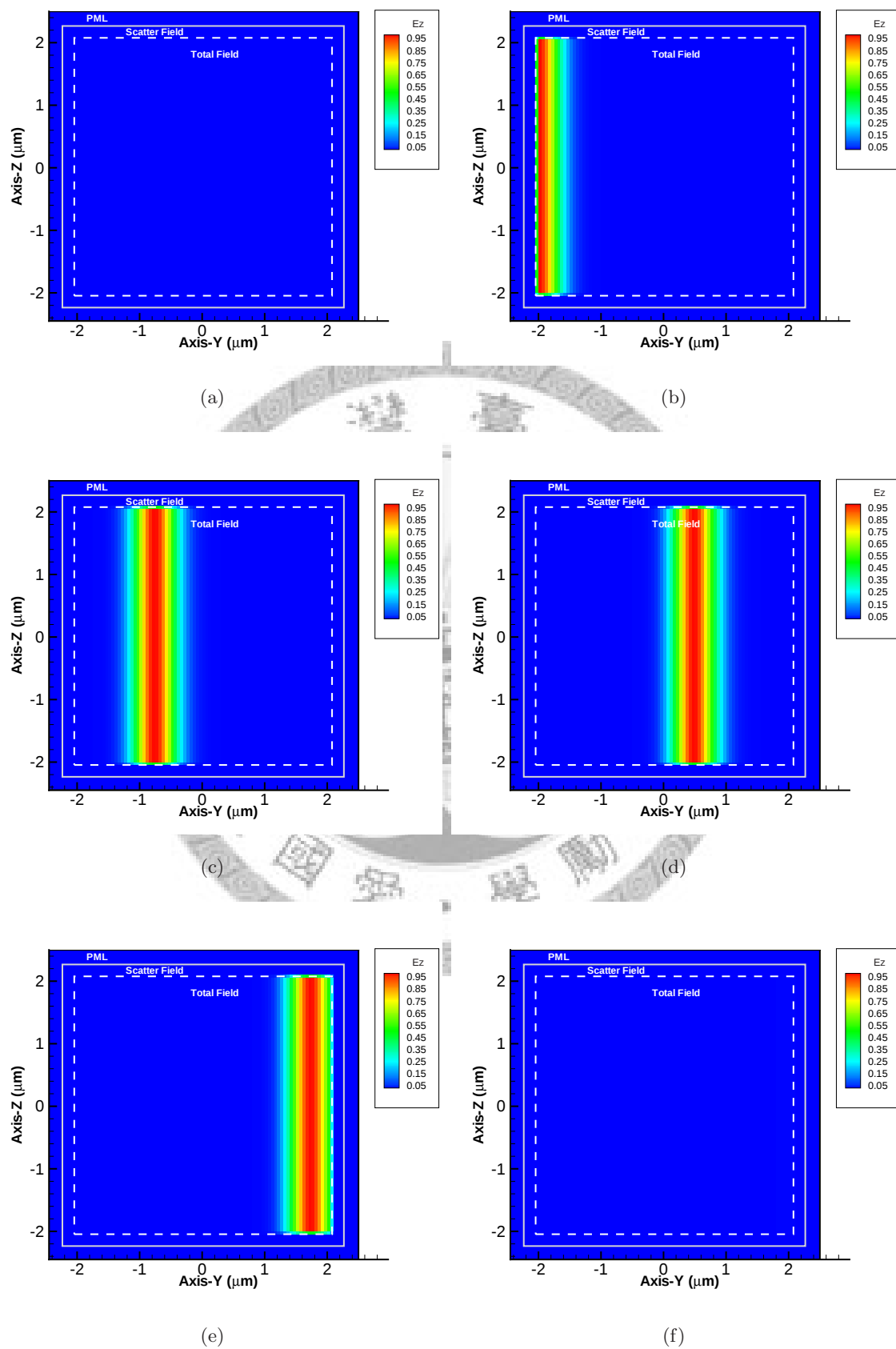
為了驗證 FDTD 模擬的精確度，我們先計算一個有解析解的例子。考慮一材質為矽 (silicon) 的圓球半徑為 $a = 1/10\lambda$ ，入射波長為 $\lambda = 632.8 \text{ nm}$ 時的 x 分量電場的全場值 ($E_{x,total}$) (如圖 4.7 所示)，再與 FDTD 的數值解作比較 (如圖 4.8 所示)，以驗證程式的正確性。其中空氣與矽相對介電常數值比為 $1:12.1104$ 。

詳細解析解推導如附錄 A，三維空間圓球散射是以圓球座標來展開，並以 Legendre function 級數解來逼近實解 [27]，表 4.3 為 Legendre function 的階數 n 與入射場最大值 $\text{MAX}\{E_i\}$ 的誤差比較，假如入射場的值 1，表示當 Legendre function 階數愈高，精準度會提高，如表 4.3。

表 4.1: Legendre function 階數與誤差比較。

階數 n	$\text{MAX}\{E_i\}$	誤差
3	1.033041525049673	3.3042E-2
5	1.002946737323515	2.9467E-3
7	1.000130851753434	1.3085E-4
9	1.000001004272765	1.0043E-6
11	1.000000004566903	4.5669E-9
13	1.000000000024403	2.4403E-11

使用不同網格 20 nm 、 10 nm 、 5 nm 取 x -line ($y = 0, z = 0$) 與解析解比較 (如圖 4.9 所示)。當網格持續加密，不管是圓球內部或圓球外部的 $E_{x,total}$ 都會逼近解析解。



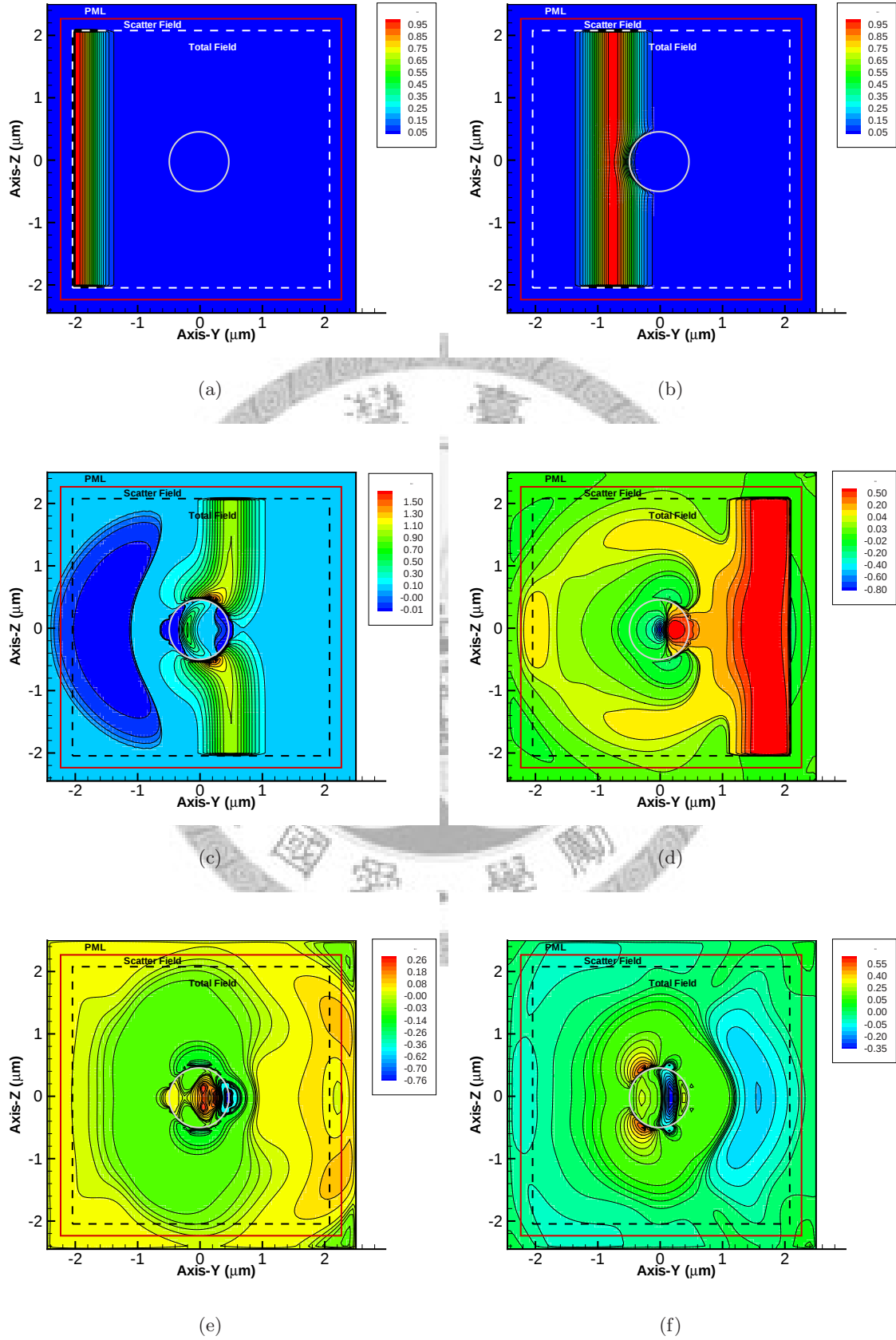


圖 4.2: 有散射體的電磁波在全場 / 散射場之分佈 (a) time step = 50 ; (b) time step = 100 ; (c) time step = 150 ; (d) time step = 200 ; (e) time step = 250 ; (f) time step = 300 。

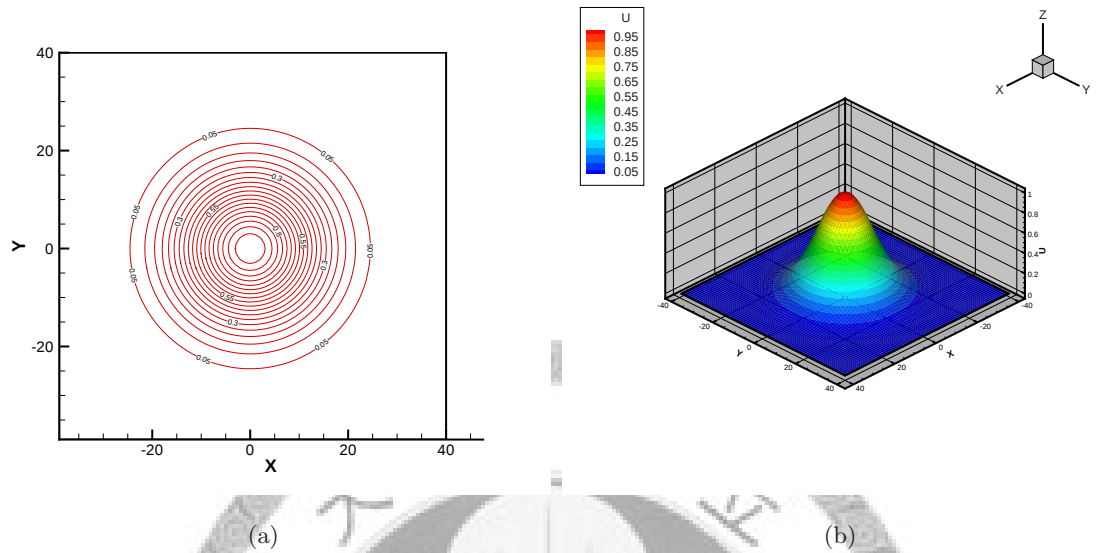


圖 4.3: 在 time step = 1 時電場 E_z 的等高線圖。

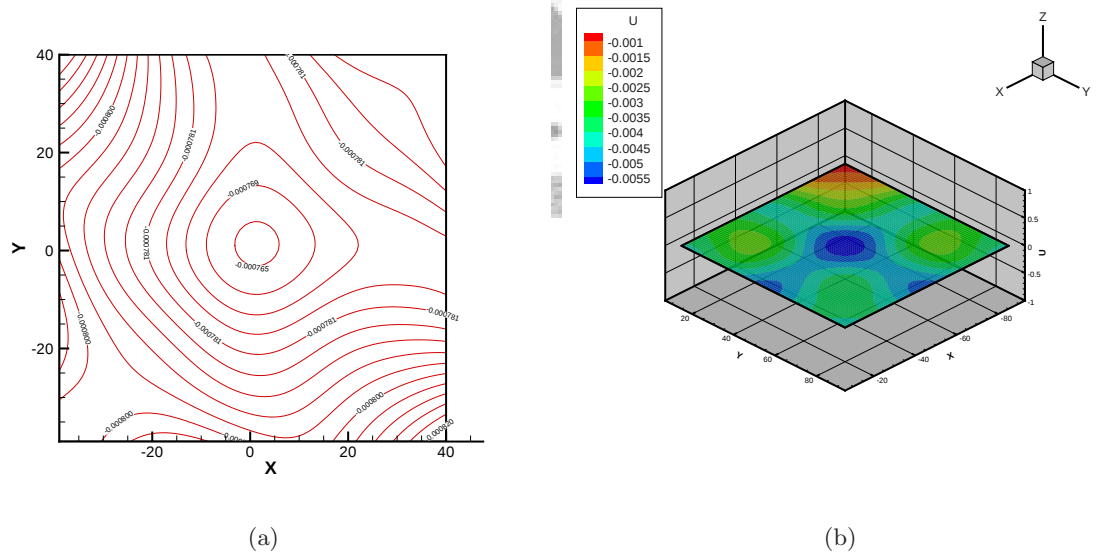
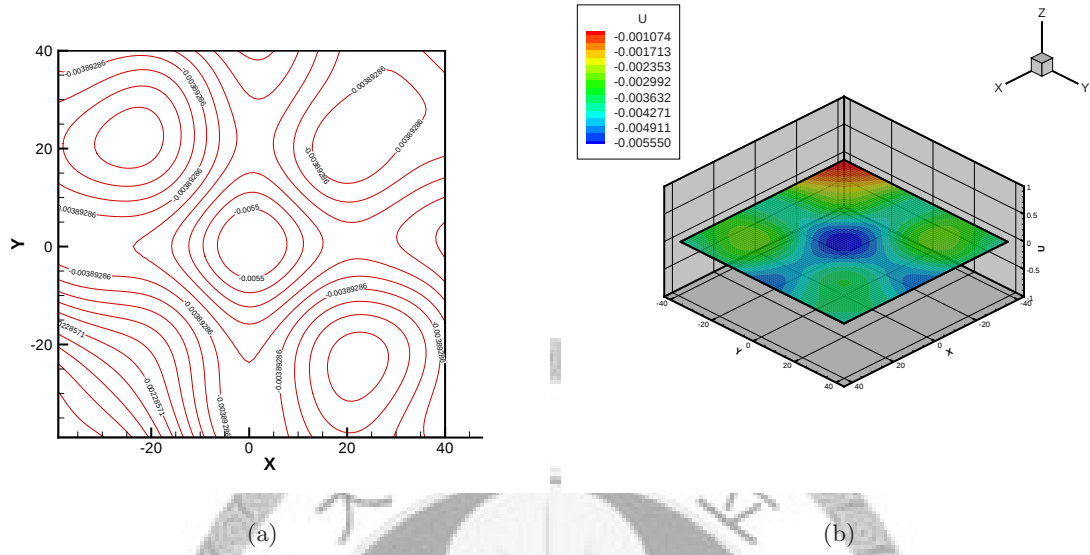
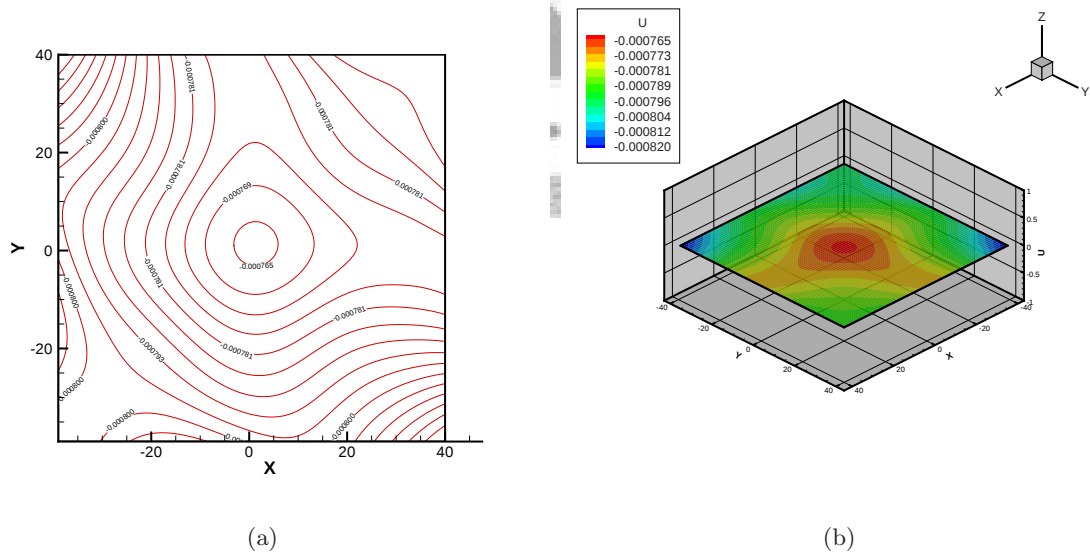


圖 4.4: 在 time step = 100 時電場 E_z 的等高線圖。

圖 4.5: 在 time step = 350 時電場 E_z 的等高線圖。圖 4.6: 在 time step = 700 時電場 E_z 的等高線圖。

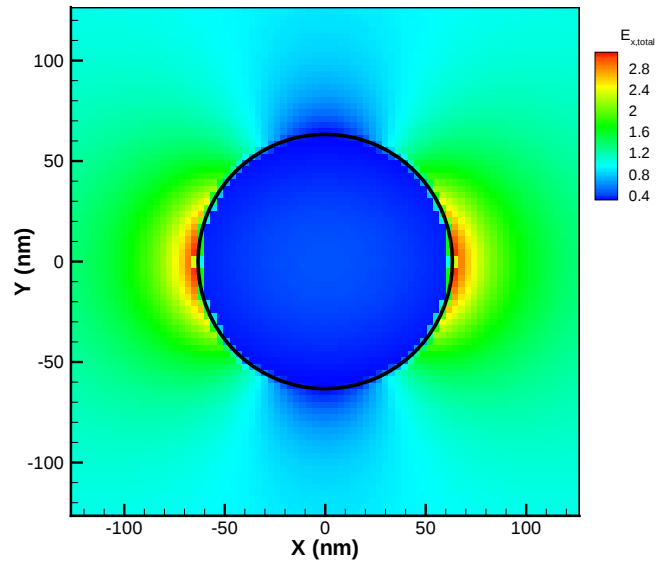


圖 4.7: 半徑 $a = 1/10\lambda$, x-y 平面 ($z = 0$), x 分量電場的全場解析解。

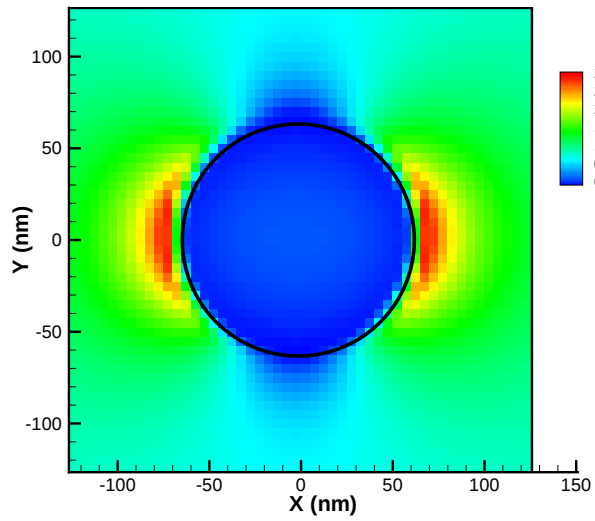


圖 4.8: 半徑 $a = 1/10\lambda$, x-y 平面 ($z = 0$), x 分量電場的 FDTD 數值解。

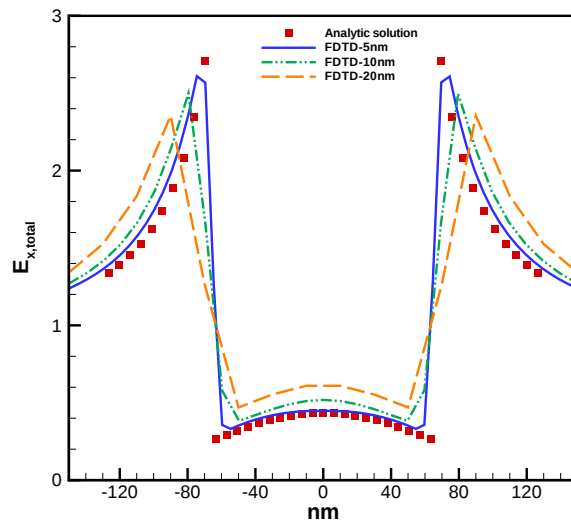


圖 4.9: 半徑 $a = 1/10\lambda$ ，x-line ($y = 0$ 、 $z = 0$)，x 分量電場的 FDTD 數值解與解析解之比較。

第五章

數值模擬結果

5.1 傳統光學繞射性質與完美電導體結構之計算結果

在本節中我們使用菲涅耳波帶片結構分別就傳統光學繞射與完美電導體 (perfect electric conductor, PEC) 材質作分析，再與銀材質的菲涅耳波帶片做比較。本節所使用的結構為一厚度 T nm 的平板在偶數圈將介質鑿空，中心點放置於模擬空間位置 $(0, -\frac{T}{2}, 0)$ ，圖 5.1 表示八個空氣環 ($n = 16$) 之菲涅耳波帶片，環的圈數與半徑的關係如式 (5.1.1) [28]

$$R_n^2 = \left(f + \frac{n\lambda}{2}\right)^2 - f^2 \quad (5.1.1)$$

其中 n 為環的圈數， R_n 為第 n 環的半徑， f 為離開波帶片的垂直距離 (稱為聚焦長度)， λ 為入射波波長。表 5.1 為波長 632.8 nm，聚焦長度為 $f = 1.0 \mu\text{m}$ 下 $n = 1 \sim 20$ 圈的半徑，與前一環半徑的差值。

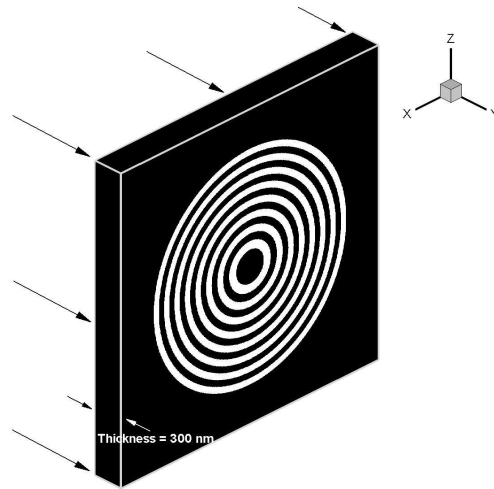


圖 5.1: 模擬厚度為 $T = 300 \text{ nm}$ ， $n = 16$ 的菲涅耳波帶片，中心位置位於 $(0, -\frac{T}{2}, 0)$ 。

表 5.1: 波長 632.8 nm ，聚焦平面為 $1.0 \mu\text{m}$ 的菲涅耳波帶片半徑的值與前一個環半徑差值。

$f = 1.0 \mu\text{m}$ ， $\lambda = 632.8 \text{ nm}$		
n	$R_n(\mu\text{m})$	$R_n - R_{n-1}(\text{nm})$
1	0.856	856.1
2	1.291	434.6
3	1.673	382.4
4	2.034	359.8
5	2.380	347.5
6	2.720	339.9
7	3.055	334.9
8	3.387	331.3
9	3.715	328.7
10	4.042	326.8
11	4.367	325.2
12	4.691	324.0
13	5.014	323.1
14	5.337	322.3
15	5.658	321.6
16	5.979	321.0
17	6.300	320.6
18	6.620	320.2
19	6.940	319.8
20	7.259	319.5

利用光學近場繞射公式，其物理意義是光通過孔徑後到整個聚焦平面的貢獻程度。我們可以在其聚焦平面 $1.0 \mu\text{m}$ 上做積分的動作，由於結構具有對稱性

質，因此可以由中心點直線往外積分，從 1 個空氣環到 10 個空氣環做分析，其結果如圖 5.2 所示。

在近場光學的數值積分中我們假設了只對空氣環的孔徑做積分，表示光在有結構的地方無法穿透的性質。理論上，FDTD 模擬上可以假設其為一結構為 PEC 材質的菲涅耳波帶片，有相似的性質，因此假設聚焦平面為 $1.0 \mu\text{m}$ ，使用表 5.1 之半徑值，當材質為 PEC 時從 1 個空氣環到 10 個空氣環做分析，其結果為 $z = 0.0 \mu\text{m}$ 、 $y = 1.0 \mu\text{m}$ ， y 方向波因亭向量強度 ($|S_y|$) 沿 x 軸變化情形，如圖 5.3 所示。

在 FDTD 模擬的介質為銀菲涅耳波帶片的結構，菲涅耳波帶片平版面朝向 y 方向，計算空間為 $16 \mu\text{m} \times 4 \mu\text{m} \times 16 \mu\text{m}$ ，採用 20 nm 網格格距，結構為一厚度 $T = 300 \text{ nm}$ 的平板在偶數圈將介質鑿空，中心點放置於模擬空間位置 $(0, -\frac{T}{2}, 0)$ 。材質銀 (silver) 在 632.8 nm 波長時相對介電常數 $\epsilon_r = -17.6235 + i0.4204$ [30]。根據式 (2.6.13)，所對應的高頻時的相對介電常數 $\epsilon_D(\infty) = 4.00$ 、電漿共振頻率 $\omega_D = 13844.57 \text{ THz}$ 與電子碰撞頻率 $\Gamma_D = 57.87 \text{ THz}$ 。當波長于 $0.18 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 1.94 \mu\text{m}$ 之間有相當程度的符合性 [29]，如圖 5.4 所示。

表 5.2 為使用近場光學公式、PEC 及介質為銀菲涅耳波帶片的 FWHM 比較。

表 5.2: 近場光學公式、PEC 及介質為銀菲涅耳波帶片的 FWHM 比較。

空氣環圈數	光學	FWHM (nm)			
		PEC-x	PEC-z	Silver-x	Silver-z
1	432.0	411.1	578.4	306.3	390.4
2	396.8	387.4	444.4	286.4	314.7
3	380.0	375.0	441.0	276.9	302.4
4	369.9	373.7	404.9	275.8	289.6
5	371.0	360.5	408.7	265.0	284.9
6	364.5	356.4	391.5	263.4	277.2
7	359.8	344.9	397.0	255.8	279.5
8	356.1	339.7	412.4	251.5	280.4
9	353.1	338.6	435.0	251.2	277.3
10	350.7	338.1	595.5	251.5	276.3

根據模擬的結果，可以得到如下的結論：

- 一、 在使用近場光學公式計算光場分佈只針對空氣環做積分，因此使用 PEC 來模擬時可以將此解當做是解析解，如表 5.2 可看出 FWHM 的趨勢相似。

- 二、發現近場光學公式與使用 PEC 材質皆無法突破繞射極限，將 PEC 改用銀材質來替換之，使用相同入射波長 632.8 nm 在聚焦平面 1.0 μm 位置處的 FWHM 較 PEC 為小，在一定的圈數下銀材質的 FWHM 可以小於 1/2 之入射波長。

5.2 銀奈米結構菲涅耳波帶片之設計與結果

在本節中我們針對八圈空氣環銀奈米結構菲涅耳波帶片結構的情況進一步的探討聚焦平面與聚焦點的關係。圖 5.5 為八圈空氣環銀菲涅耳波帶片 (a) $z = 0.0 \mu\text{m}$ ，x-y 平面上的 $|S_y|$ 的分佈情況，(b) $z = 0.0 \mu\text{m}$ 、 $y = 1.0 \mu\text{m}$ ， $|S_y|$ 沿 x 軸的變化情形，(c) $x = 0.0 \mu\text{m}$ ，y-z 平面上的 $|S_y|$ 的分佈情況，(d) $x = 0.0 \mu\text{m}$ 、 $y = 1.0 \mu\text{m}$ ， $|S_y|$ 沿 z 軸的變化情形，(e) $y = 1.0 \mu\text{m}$ ，x-z 平面上的 $|S_y|$ 的分佈情況，(f) $z = 0.0 \mu\text{m}$ 、 $x = 0.0 \mu\text{m}$ ， $|S_y|$ 沿 y 軸的變化情形。

根據模擬的結果，可以得到下面的結論：

- 一、銀 (silver) 材質八圈空氣環 ($n = 16$) 的菲涅耳波帶片分析聚焦平面位於 $y = 1.0 \mu\text{m}$ ，可以得到 x 軸的半高全寬 (axis-x of full width half maximum, x-FWHM) 為 251.5 nm (如圖 5.5 (b) 所示)；z 軸的半高全寬 (z-FWHM) 為 280.4 nm (如圖 5.5 (d) 所示)，聚焦點 (focal point) 均有小於入射波長的 1/2，即突破傳統光學的繞射極限，其半強度深為 693.0 nm。
- 二、電場的偏振方向所造成聚焦平面位於 $y = 1.0 \mu\text{m}$ 的聚焦點為橢圓 (可以看作 x-FWHM 為短軸，z-FWHM 為長軸， $z\text{-FWHM} \geq x\text{-FWHM}$)，而非呈現一個圓點。原因會于後幾節中討論，其中銀的厚度也會造成聚焦點偏橢圓。
- 三、依菲涅耳波帶片環的圈數與半徑的關係式 (5.1.1) 所設計的 $y = 1.0 \mu\text{m}$ 的聚焦平面，實際上 y 方向最大波因亭向量強度 ($\text{Max}|S_y|$) 位置位於 $y = 1.08 \mu\text{m}$ 的平面上，兩個相差 0.9513 % 其差距不大，因此可以以所設計的 $y = 1.0 \mu\text{m}$ 的聚焦平面當做最佳聚焦平面。
- 四、每 200 nm 分析一次，由 0.6 μm 持續往後至 1.4 μm 可以發現只有在接近設計聚焦平面 1.0 μm 處的聚焦效果最好，如圖 5.6 所示。

同樣地，以八圈空氣環的菲涅耳波帶片來改變厚度 T 從 20 nm 遞增到 300 nm，每 20 nm 改變一次，不同厚度的改變對光場強度、解析度與半強度

深的影響做一分析。這裡我們觀察距離 $y = 1.0 \mu\text{m}$ 的聚焦平面的 x-FWHM、z-FWHM、沿 y 軸的半強度深其結果如圖 5.7(a) 所示與 y 方向最大波因亭向量強度 ($\text{Max}|S_y|$) 其結果如圖 5.7(b) 所示。

根據模擬的結果，可得到下面的結論：

- 一、八圈空氣環同時改變銀的厚度可以發現當厚度為 100 nm 時 x-FWHM 可以得到最好的聚焦點，但另一軸 (z-FWHM) 的聚焦效果卻不是最佳值，聚焦點呈現橢圓的形狀，如圖 5.7(a) 所示，但都有小於繞射極限的規範。
- 二、若以最大能量來決定，則是以銀的厚度為 40 nm 時，能量最大。如圖 5.7(b)。半強度深則是在厚度為 200 nm 時最佳，如圖 5.7(a)。
- 三、這裡我們希望聚焦點為一個圓點 ($x\text{-FWHM} \cong z\text{-FWHM}$)，因此根據以上的分析及半導體曝光的要求 (能量大，景深長)，因此可以選擇以厚度為 40 nm 當做元件製作的最佳值。

5.3 不同圈數的菲涅耳波帶片之對解析度與半強度深的影響

根據雷利準則 (Rayleigh criterion) [31] 式 (5.3.1) 要能分辨兩物體的最小距離時即解析度 (resolution) 與波長 (λ) 成正比，與數值孔徑 (numerical aperture, NA) 成反比；而景深 (depth of focus) 式 (5.3.2) 與波長 (λ) 成正比，與 NA 的平方成反比，這正是所謂的繞射極限 (diffraction limit)。意味著使用較短的波長或更大的數值孔徑 (透鏡)，可以得到更好的解析度，但提高解晰度同時又喪失了景深。因此現今半導體業者為了使用更小的線寬，得使用更短的波長來當做微影製程的曝光波源。

$$R \propto \frac{K_1 \lambda}{NA} \quad (5.3.1)$$

$$\text{DOF} \propto \frac{K_2 \lambda}{2(NA)^2} \quad (5.3.2)$$

其中 λ 為波長； K_1 、 K_2 為光學系統參數；R 為解析度 (resolution)；DOF 為景深 (depth of focus)。

接著探討菲涅耳波帶片的圈數對距離相同的聚焦平面解析度與半強度深的影響。這裡圈數可以當作成空氣環的數量，分別針對空氣環 1 ~ 10 做模擬。

設計聚焦平面為距波帶片 $y = 1.0 \mu\text{m}$ 位置處。圖 5.8 表示當對聚焦平面 y 方向波因亭向量強度 ($\text{Max}|S_y|$) normalize 到值為 1，觀察 x -FWHM 隨圈數的變化。圖 5.9 表示當對聚焦平面 y 方向波因亭向量強度 ($\text{Max}|S_y|$) normalize 到值為 1，觀察 z -FWHM 隨圈數的變化。圖 5.10(a) 為 y 方向波因亭向量強度 ($|S_y|$) 沿 y 軸變化情形觀察半強度深與 z -FWHM、 x -FWHM 隨圈數的變化。圖 5.10(b) 為聚焦平面最大的 y 方向波因亭向量強度 ($\text{Max}|S_y|$) 與孔徑面積的變化。

根據模擬的結果，可以得到下面的結論：

- 一、當空氣環的圈數提高，表示數值孔徑將會增加，以孔徑面積來表示。當孔徑面積增加，則光場強度也會增加，如圖 5.10(b) 所示。
- 二、由式 (5.3.1) 可知數值孔徑與解析度成正比，空氣環的圈數提高，則 x -FWHM， z -FWHM 皆是線性的變小，且有相似的下降斜率。而由式 (5.3.2) 可知景深與數值孔徑平方成反比，空氣環的圈數提高，相對的半強度深會變小。模擬結果如圖 5.8、5.9、5.10(a) 所示。
- 三、當空氣環的圈數提高，第一個峰場值與次高峰場值的比會變大，容易分辨曝光源降低雜訊的干擾。

5.4 雙曲型的菲涅耳波帶片

本文研究兩種雙曲型的菲涅耳波帶片，其中一種為雙凹 (concave)，另一種為雙凸 (convex)。雙凹型的菲涅耳波帶片外型類似幾何光學裡的凹透鏡；雙凸型的菲涅耳波帶片則類似幾何光學裡的凸透鏡。菲涅耳波帶片與幾何光學裡的凹凸透鏡但在聚焦的性質上完全不同，在 5.2 節裡藉由同時改變銀的厚度，確實可在某個厚度下可以達到最佳的聚焦效果，因此獨立地各自改變不同銀環的厚度，以達到最佳的聚焦效果是本節所要探討的。

5.4.1 雙凹型的菲涅耳波帶片

雙凹型的菲涅耳波帶片的參數設定，其半徑列于表 5.1 中。獨立控制每個環的厚度 $T_1 \sim T_{11}$ ，最內圈為厚度 $T_1 = 20 \text{ nm}$ 每個環依續向外遞增 20 nm ， 40 nm ， 60 nm ， 80 nm 及 100 nm ，五種情況。圖 5.11 所示為每個環依續由內向外遞增 100 nm 的雙凹型菲涅耳波帶片， $T_1 = 20 \text{ nm}$ ， $T_2 = 120 \text{ nm}$ ， $T_3 = 220 \text{ nm}$ ，..... 及 $T_{11} = 1020 \text{ nm}$ 。中心點放置於模擬空間位置 $(0, -T_1/2, 0)$ 。

圖 5.12 為五種不同厚度變化的雙凹型的菲涅耳波帶片在 $z = 0.0 \mu\text{m}$ 、 $x = 0.0 \mu\text{m}$ ， y 方向波因亭向量強度 ($|S_y|$) 沿 y 軸變化情形。分別在設計的聚焦平面 $1.0 \mu\text{m}$ 位置附近的最大的場值做分析，其依序分別位於 y 軸 $1.24 \mu\text{m}$ 、 $0.68 \mu\text{m}$ 、 $0.64 \mu\text{m}$ 、 $1.12 \mu\text{m}$ 及 $1.16 \mu\text{m}$ 的位置處，如圖 5.12 圓點表示處，畫出的聚焦平面 x - z ，結果如圖 5.13 所示。聚焦點的 x -FWHM 與 z -FWHM 如表 5.3。

表 5.3: 雙凹型的菲涅耳波帶片， x -FWHM 與 z -FWHM。

$f = \text{Max} S_y ^{(a)}$ ， $\lambda = 632.8 \text{ nm}$		
內圈 FZP 向外遞增厚度 (nm)	x -FWHM(nm)	z -FWHM(nm)
$0^{(b)}$	251.5	276.4
20	243.2	271.2
40	243.4	279.0
60	295.5	241.8
80	未聚焦	246.7
100	未聚焦	248.8

(a) 聚焦平面依序為 $f = 1.24 \mu\text{m}$ 、 $0.68 \mu\text{m}$ 、 $0.64 \mu\text{m}$ 、 $1.12 \mu\text{m}$ 及 $1.16 \mu\text{m}$ ，

(b) $T = 300 \text{ nm}$ 之平版型 FZP，聚焦平面為 $1.0 \mu\text{m}$ 。

5.4.2 雙凸型的菲涅耳波帶片

雙凸型的菲涅耳波帶片參數設定，其半徑列於表 5.1 中。獨立控制每個環的厚度 $T_1 \sim T_{11}$ ，最外圈為平板厚度 $T_{11} = 20 \text{ nm}$ 每個環依續向內遞增 20 nm ， 40 nm ， 60 nm ， 80 nm 及 100 nm ，五種情況。圖 5.14 所示為每個環依續向外向內遞增 100 nm 的雙凸型菲涅耳波帶片， $T_{11} = 20 \text{ nm}$ ， $T_{10} = 120 \text{ nm}$ ， $T_9 = 220 \text{ nm}$ ，..... 及 $T_1 = 1020 \text{ nm}$ 。中心點放置於模擬空間位置 $(0, -T_1/2, 0)$ 。

圖 5.15 為五種不同厚度變化的雙凸型的菲涅耳波帶片在 $z = 0.0 \mu\text{m}$ 、 $x = 0.0 \mu\text{m}$ ， y 方向波因亭向量強度 ($|S_y|$) 沿 y 軸變化情形。分別在設計的聚焦平面 $1.0 \mu\text{m}$ 位置附近的最大的場值做分析，其依序分別位於 y 軸 $0.98 \mu\text{m}$ 、 $1.92 \mu\text{m}$ 、 $0.92 \mu\text{m}$ 、 $0.94 \mu\text{m}$ 及 $1.92 \mu\text{m}$ 的位置處，如圖 5.15 圓點表示處，畫出的聚焦平面 x - z ，結果如圖 5.16 所示。聚焦點的 x -FWHM 與 z -FWHM 如表 5.4。

表 5.4: 雙凸型的菲涅耳波帶片，x-FWHM 與 z-FWHM。

$f = \text{Max} S_y ^{(a)}$ ， $\lambda = 632.8 \text{ nm}$		
外圈 FZP 向內遞增厚度 (nm)	x-FWHM(nm)	z-FWHM(nm)
0 ^(b)	251.5	276.4
20	253.3	255.2
40	259.7	307.7
60	246.9	262.5
80	247.8	270.5
100	383.7	270.7

^(a) 聚焦平面依序為 $0.98 \mu\text{m}$ 、 $1.92 \mu\text{m}$ 、 $0.92 \mu\text{m}$ 、 $0.94 \mu\text{m}$ 及 $1.92 \mu\text{m}$ ，

^(b) $T = 300 \text{ nm}$ 之平版型 FZP，聚焦平面為 $1.0 \mu\text{m}$ 。

根據雙凹型、雙凸型的菲涅耳波帶片模擬的結果，可以得到下面的結論：

- 一、雙凹與雙凸的菲涅耳波帶片由於外型特殊無法以式 (5.1.1) 所設計的 $f = 1.0 \mu\text{m}$ 位置處找到最佳的聚焦點，因此聚焦點的尋找必須在 $1.0 \mu\text{m}$ 位置附近處找尋最佳的聚焦平面，雙凹與雙凸的聚焦平面、x-FWHM、z-FWHM 如表 5.3、5.4 所示。
- 二、雙凹型菲涅耳波帶片的在厚度變化較緩時 x-FWHM、z-FWHM 中心尚可維持一定的解析度，但隨著厚度遞增愈大時四周的雜訊變的更加嚴重，如圖 5.13 所示。到了厚度增幅 80 nm 與 100 nm 的時候其中一個方向的 FWHM 在中心位置處出現了三個聚焦點，使得無法判定 FWHM 的值，如表 5.3 所示。
- 三、雙凸菲涅耳波帶片在最外圍平板厚度向內遞增厚度為 20 nm 時 x-FWHM 與 z-FWHM 的值極為接近，如表 5.4 所示，近似圓形，比相同厚度的平板型菲涅耳波帶片佳。隨著遞增厚度變大時聚焦點幾乎呈現橢圓狀，其 FWHM 甚至變差。

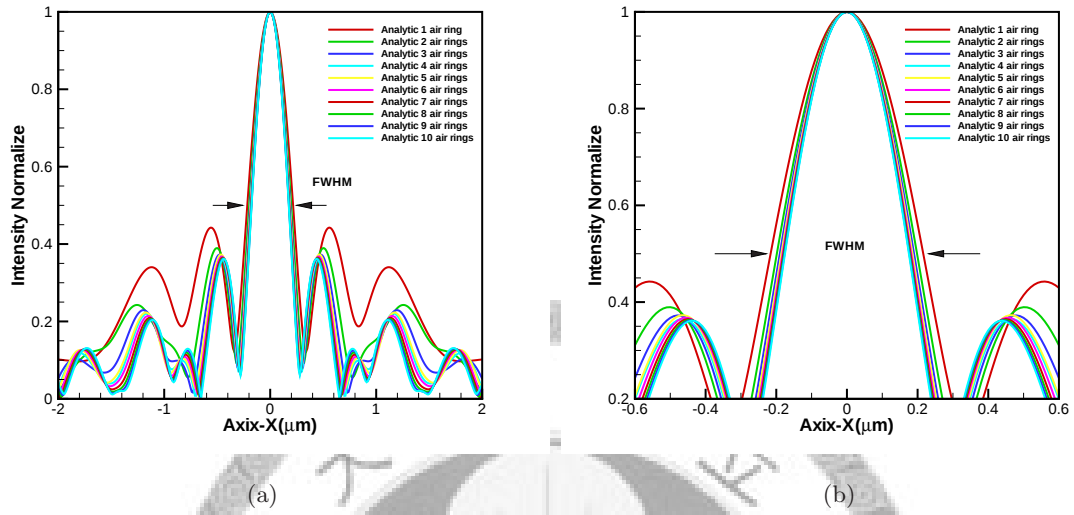


圖 5.2: (a) 使用光學公式求得 1 到 10 個空氣環的解析解，(b) 局部放大圖。

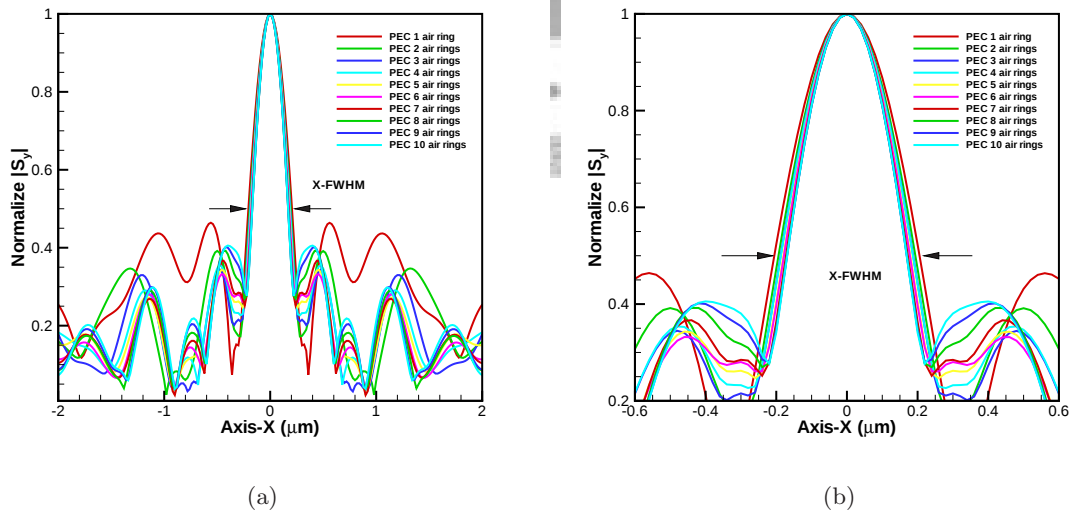


圖 5.3: (a) 使用 PEC 模擬 1 到 10 個空氣環的 x 方向場的分佈，(b) 局部放大圖。

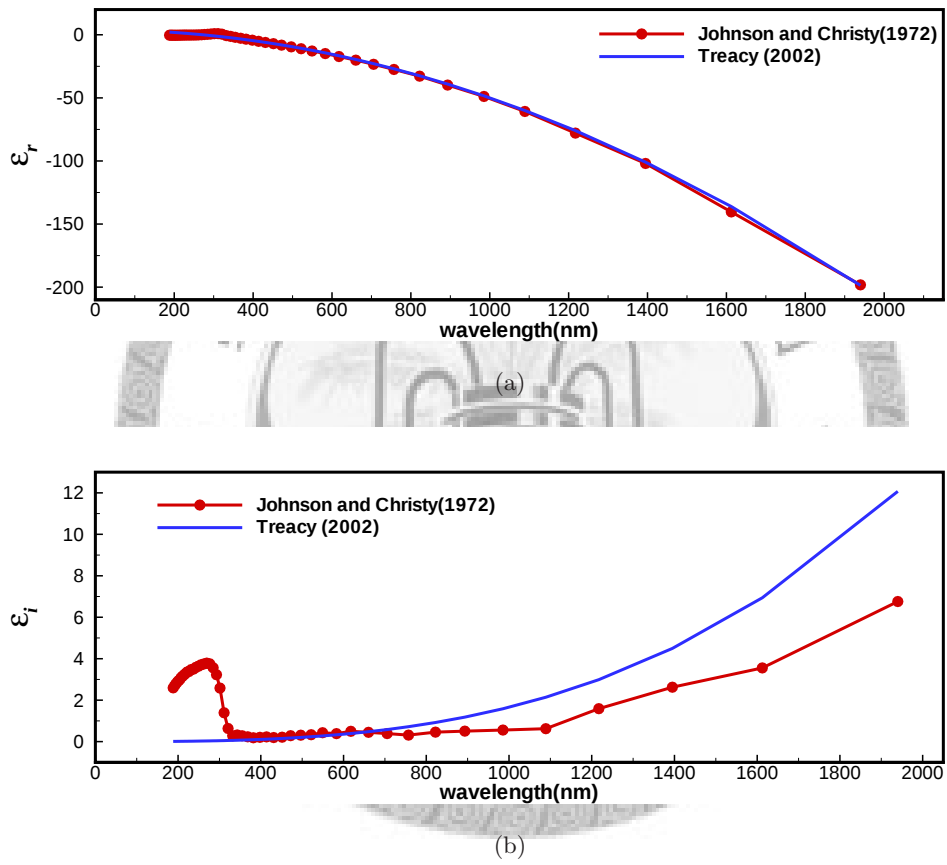
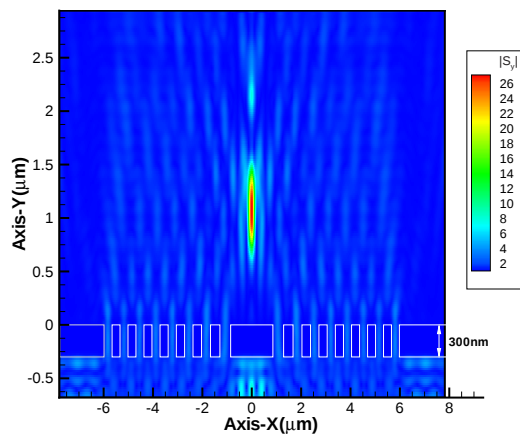
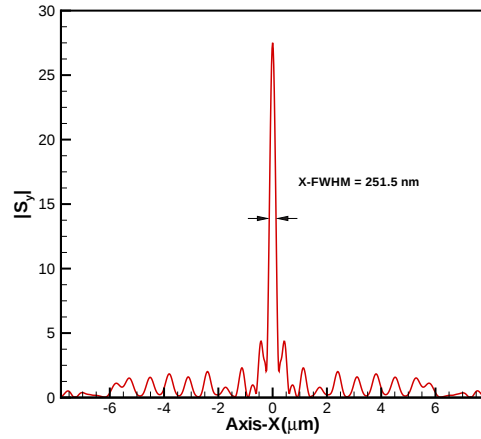


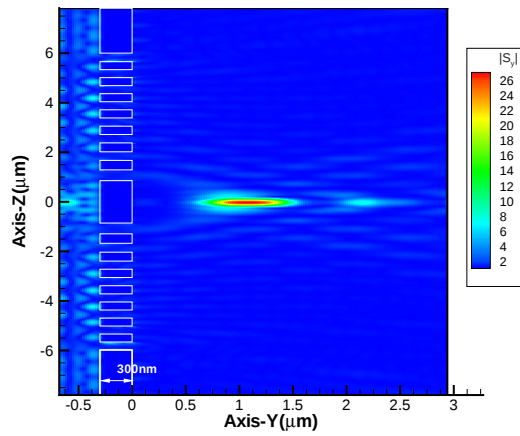
圖 5.4: 介質銀 (Ag) 于波長介於 $0.18 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 1.94 \mu\text{m}$ 範圍之 (a) 實部介電常數，(b) 虛部介電常數。



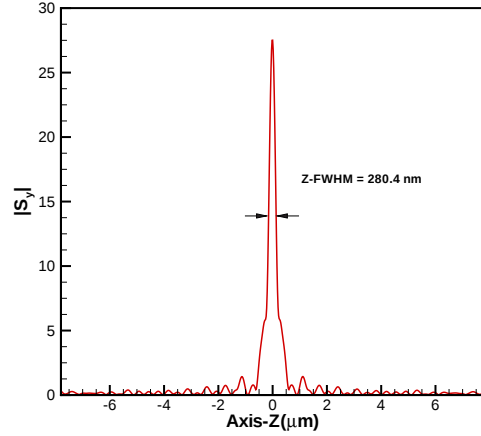
(a)



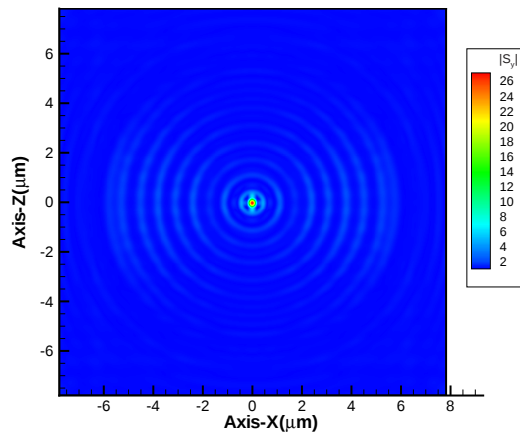
(b)



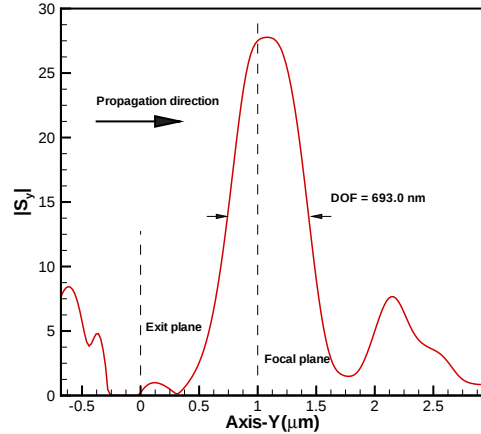
(c)



(d)



(e)



(f)

圖 5.5: 銀菲涅耳波帶片 (a) $z = 0.0 \mu\text{m}$, x - y 平面上的 $|S_y|$ 的分佈情況, (b) $z = 0.0 \mu\text{m}$ 、 $y = 1.0 \mu\text{m}$, $|S_y|$ 沿 x 軸的變化情形, (c) $x = 0.0 \mu\text{m}$, y - z 平面上的 $|S_y|$ 的分佈情況, (d) $x = 0.0 \mu\text{m}$ 、 $y = 1.0 \mu\text{m}$, $|S_y|$ 沿 z 軸的變化情形, (e) $y = 1.0 \mu\text{m}$, x - z 平面上的 $|S_y|$ 的分佈情況, (f) $z = 0.0 \mu\text{m}$ 、 $x = 0.0 \mu\text{m}$, $|S_y|$ 沿 y 軸的變化情形。

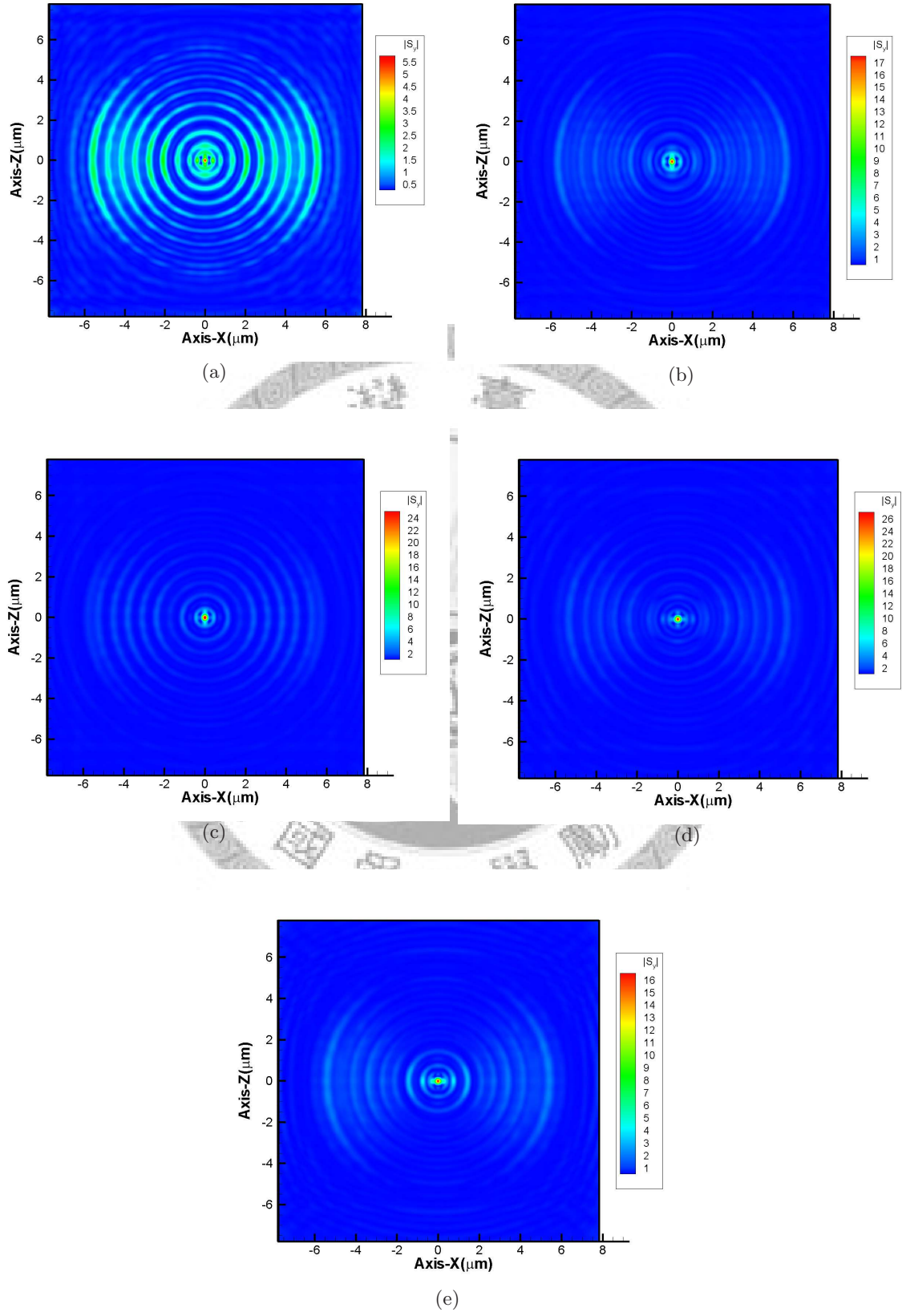


圖 5.6: 銀菲涅耳波帶片，其聚焦平面在 (a) $y = 0.6 \mu\text{m}$; (b) $y = 0.8 \mu\text{m}$; (c) $y = 1.0 \mu\text{m}$; (d) $y = 1.2 \mu\text{m}$; (e) $y = 1.4 \mu\text{m}$ ，x-z 的 y 方向波因亭向量強度 ($|S_y|$) 的分佈情況。

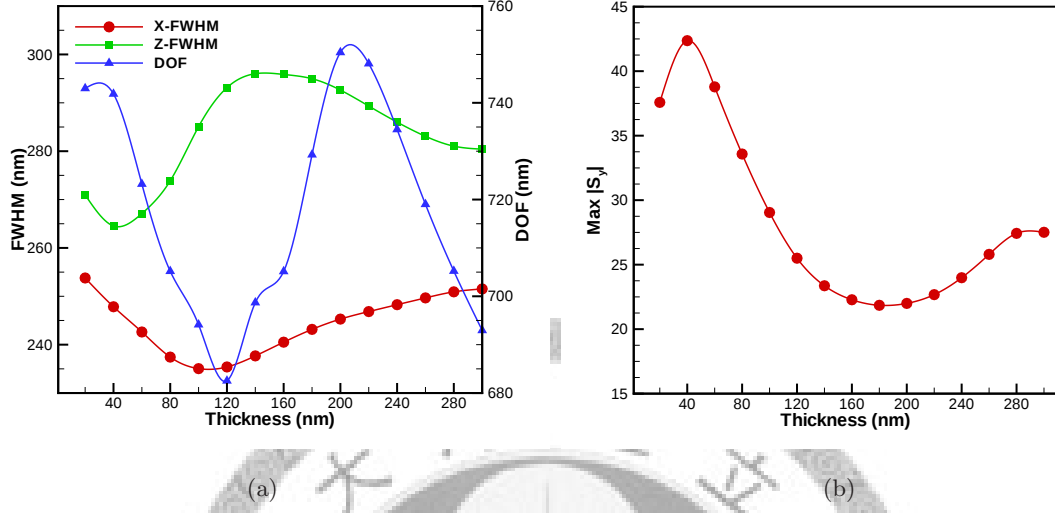


圖 5.7: 銀菲涅耳波帶片，(a) 厚度 $T = 20 \text{ nm} \sim 300 \text{ nm}$ 的解析度與半強度深；(b) 厚度 $T = 20 \text{ nm} \sim 300 \text{ nm}$ 的 y 方向最大波因亭向量強度 ($\text{Max}|S_y|$)。

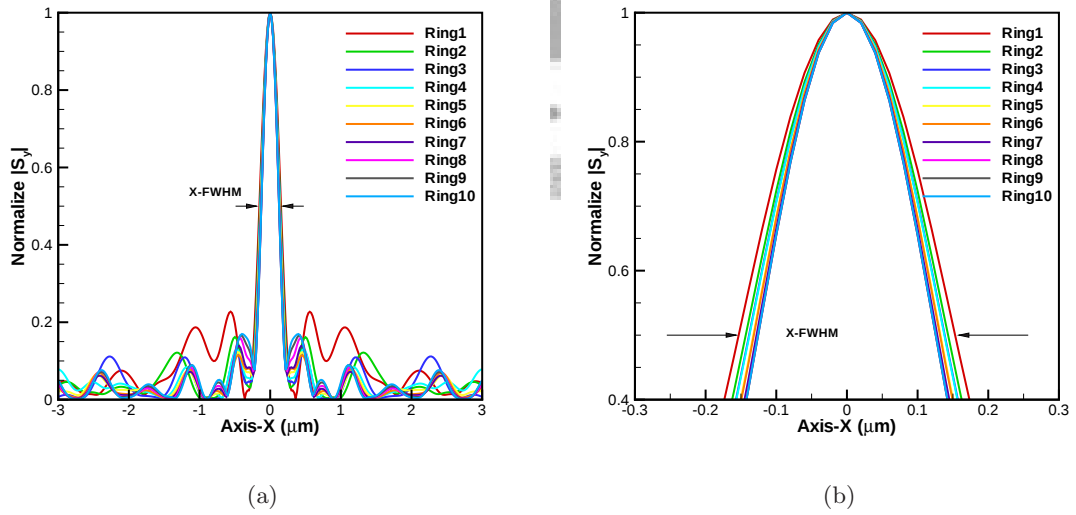


圖 5.8: 聚焦平面 $y = 1.0 \mu\text{m}$ 位置處，(a) 對 $\text{Max}|S_y|$ normalized，x-FWHM 隨圈數的變化，(b) 局部放大圖。

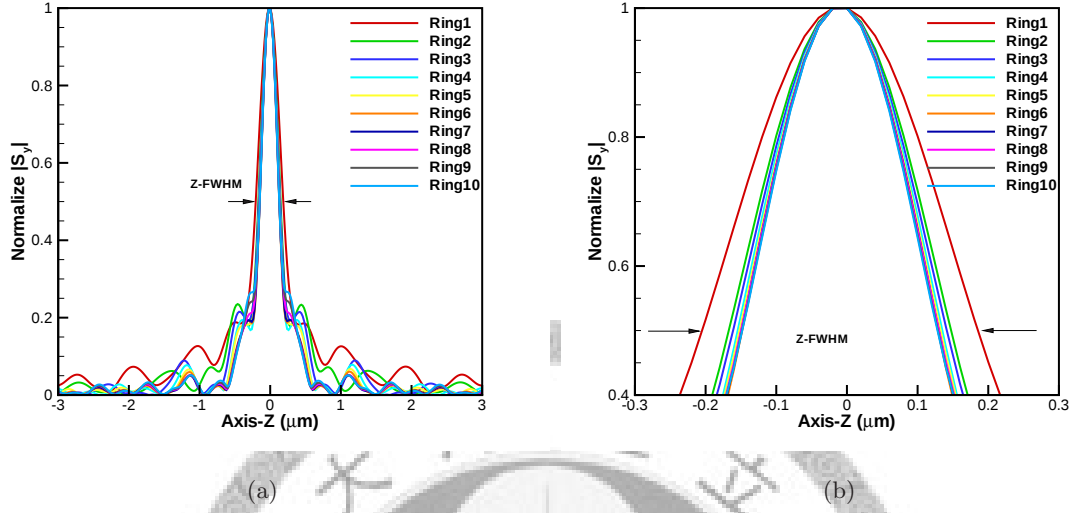


圖 5.9: 聚焦平面 $y = 1.0 \mu\text{m}$ 位置處，(a) 對 $\text{Max}|S_y|$ normalized，z-FWHM 隨圈數的變化，(b) 局部放大圖。

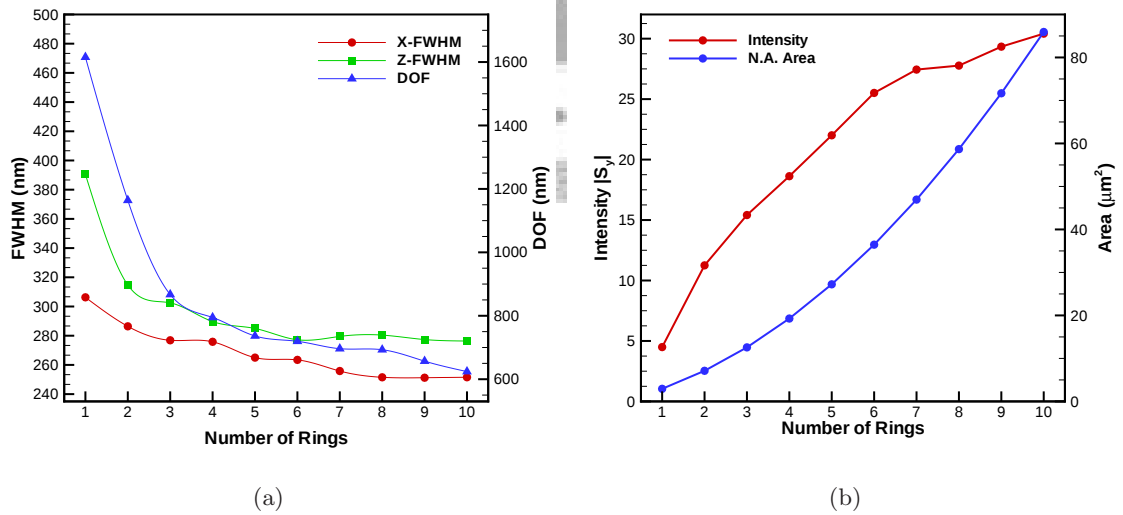


圖 5.10: 厚度 $T = 300 \text{ nm}$ 的菲涅耳波帶片，1 ~ 10 圈空氣環，(a) 解析度與半強度深，(b) 聚焦平面最大的 y 方向波因亭向量強度 ($\text{Max}|S_y|$) 與孔徑面積的變化。

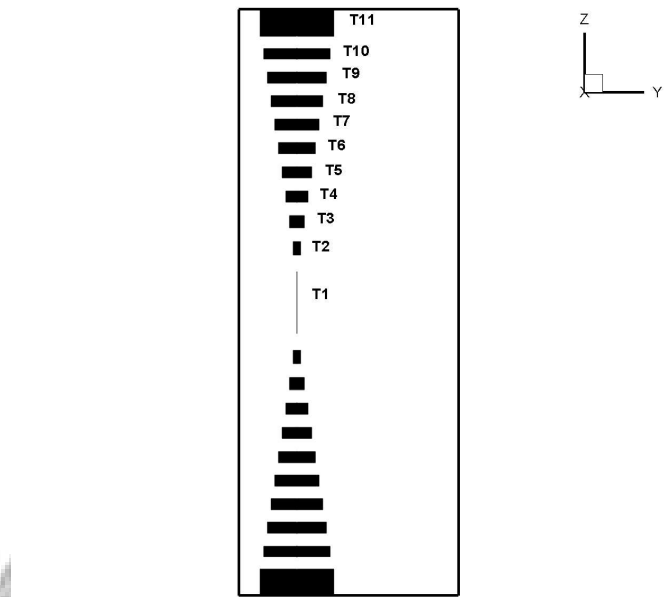


圖 5.11: 每個環依續向外遞增 100 nm 的雙凹型菲涅耳波帶片。

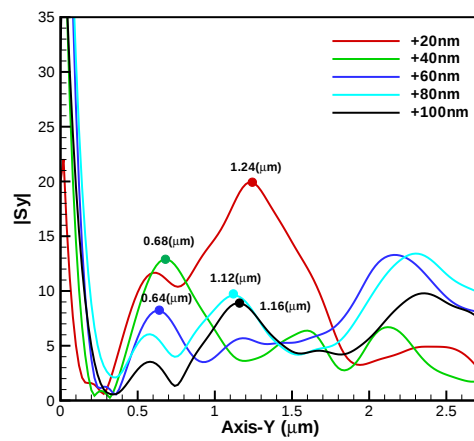


圖 5.12: 雙凹型的菲涅耳波帶片在 $z = 0.0 \mu\text{m}$ 、 $x = 0.0 \mu\text{m}$ ， y 方向波因亭向量強度 ($|S_y|$) 沿 y 軸的變化情形。

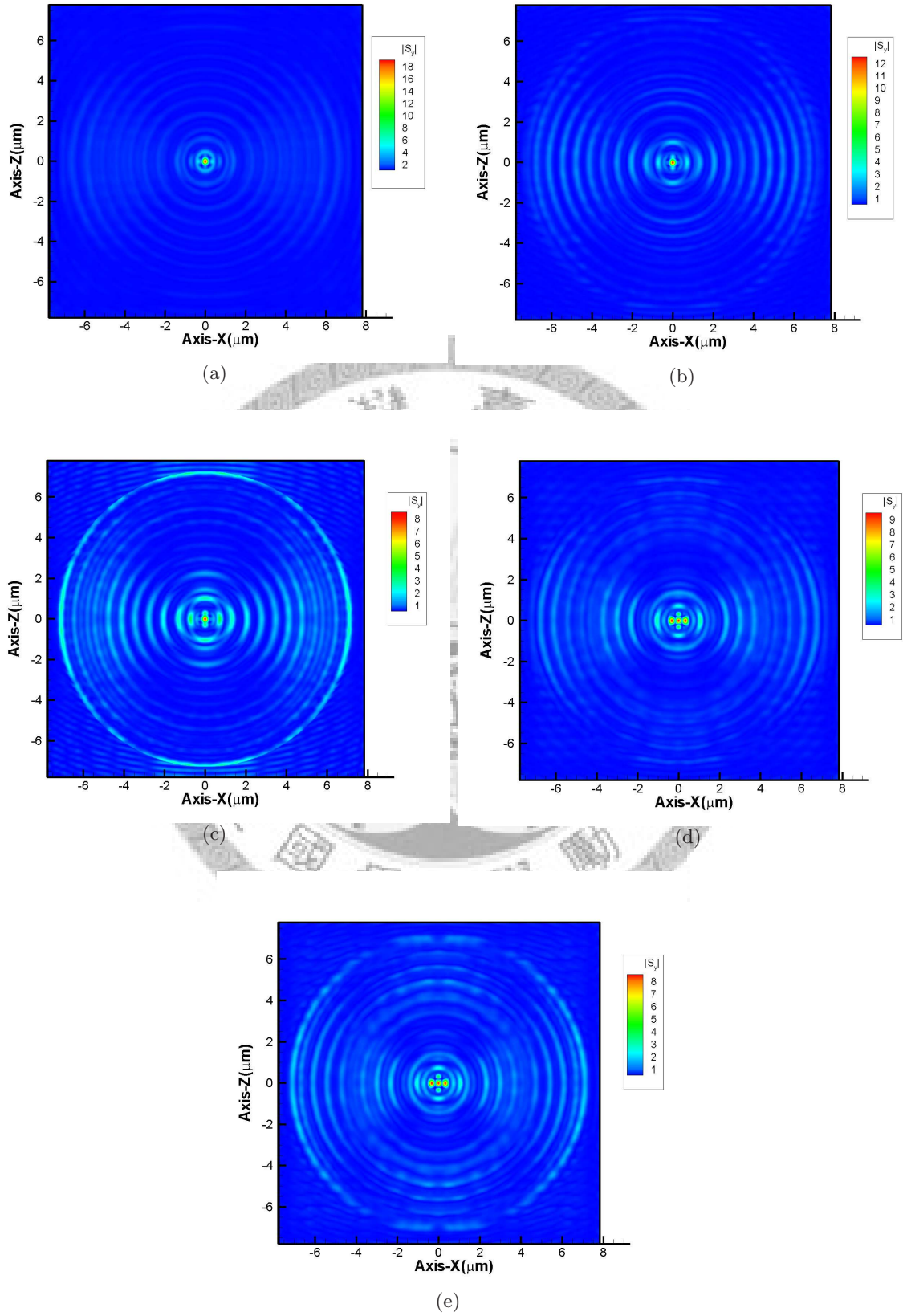


圖 5.13: 雙凹型的菲涅耳波帶片，中心厚度向內遞增 (a) 20 nm，聚焦平面 $y = 1.24 \mu\text{m}$; (b) 40 nm，聚焦平面 $y = 0.68 \mu\text{m}$; (c) 60 nm，聚焦平面 $y = 0.64 \mu\text{m}$; (d) 80 nm，聚焦平面 $y = 1.12 \mu\text{m}$; (e) 100 nm，聚焦平面 $y = 1.16 \mu\text{m}$ ，x-z 平面上的 y 方向波因亭向量強度 ($|S_y|$) 的分佈情況。

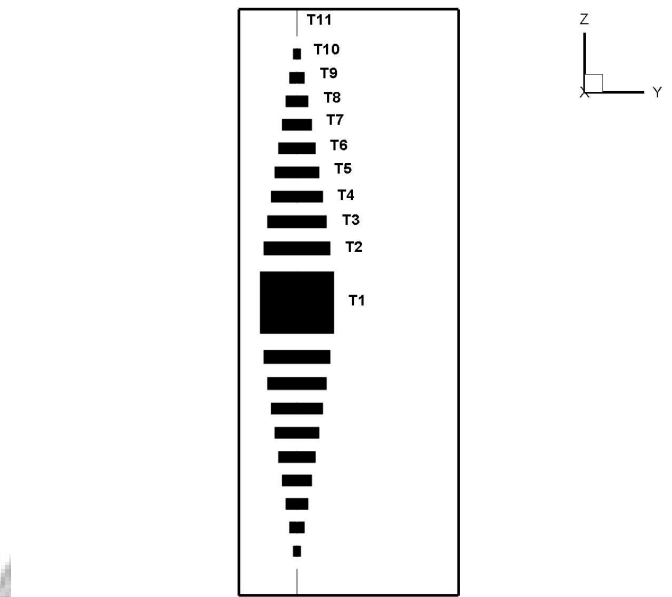


圖 5.14: 每個環依續向內遞增 100 nm 的雙凸型菲涅耳波帶片。

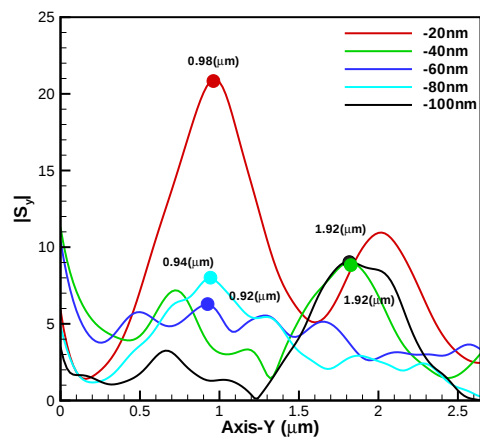


圖 5.15: 雙凸型的菲涅耳波帶片在 $z = 0.0 \mu\text{m}$ 、 $x = 0.0 \mu\text{m}$ ， y 方向波因亭向量強度 ($|S_y|$) 沿 y 軸的變化情形。

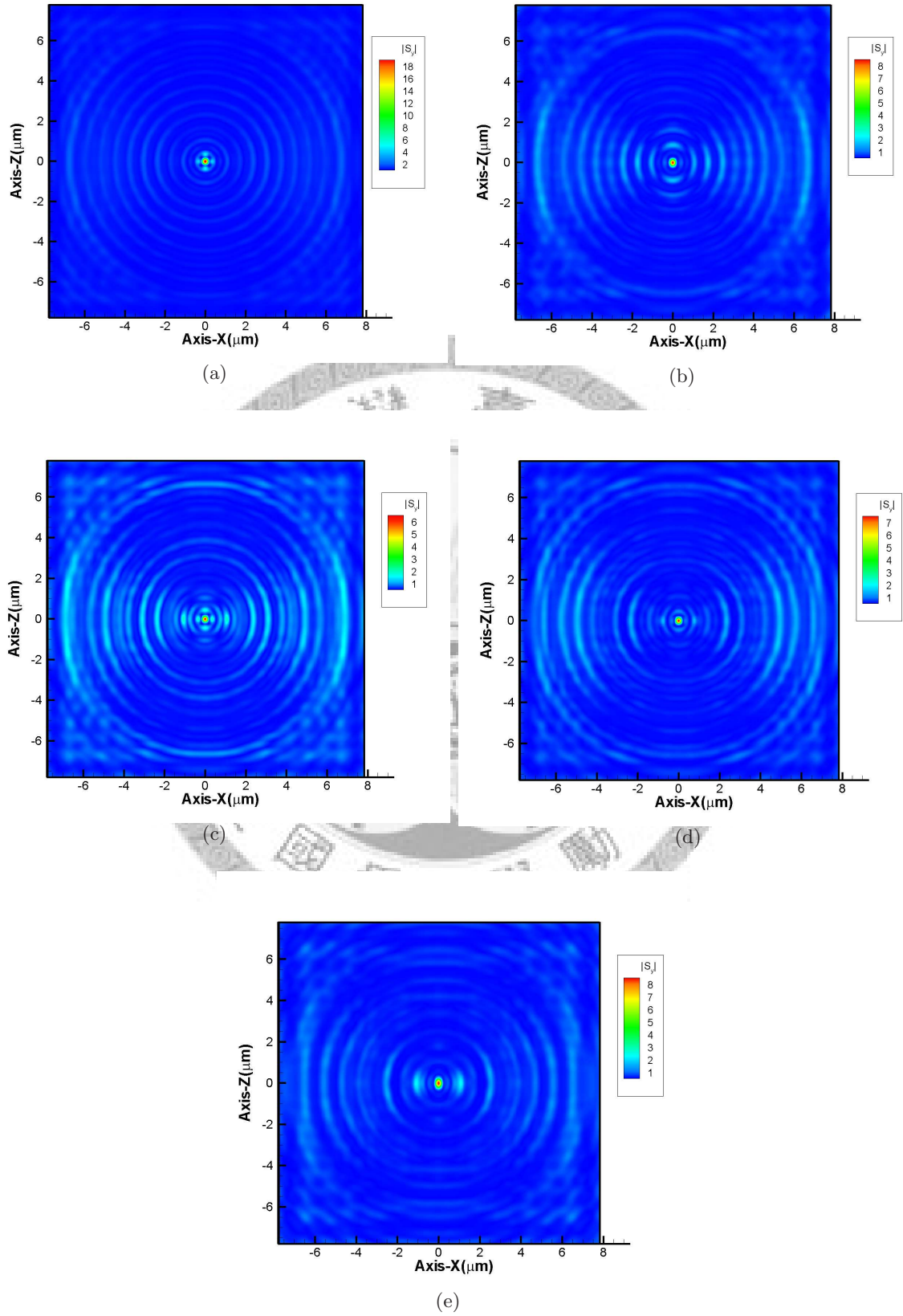


圖 5.16: 雙凸型的菲涅耳波帶片，最外圍平板厚度向內遞增 (a) 20 nm，聚焦平面 $y = 0.98 \mu\text{m}$; (b) 40 nm，聚焦平面 $y = 1.92 \mu\text{m}$; (c) 60 nm，聚焦平面 $y = 0.92 \mu\text{m}$; (d) 80 nm，聚焦平面 $y = 0.94 \mu\text{m}$; (e) 100 nm，聚焦平面 $y = 1.92 \mu\text{m}$ ，x-z 平面上的 y 方向波因亭向量強度 ($|S_y|$) 的分佈情況。

第六章

結論

6.1 研究成果與討論

三維的 FDTD 需要高計算量與大量的記憶體，是使用此方法的缺點之一，透過 MPI(message passing interface) 函式庫的平行化，確實可以提升計算的效能。藉由模擬不同圈數的銀奈米結構的菲涅耳波帶片針對在特定波長下 (632.8 nm) 的聚焦行為，發現在適當的聚焦平面可以突破傳統光學的繞射極限。而數值孔徑的定義相當於空氣環的面積，數值孔徑的大小決定了聚焦平面的能量與解析度，另外半強度深仍會受到數值孔徑的影響。然而受到電磁波偏振的行為會產生聚焦平面下 x 與 z 方向的 FWHM 不一致，造成聚焦點呈現橢圓的形狀。此外，針對平版型的菲涅耳波帶片對不同厚度下做分析，發現在某一厚度下可以得到較大的光場強度，與最較佳的 FWHM 及半強度深，但仍舊無法改變聚焦點的形狀，解決聚焦點的問題我們發現在雙凸型的菲涅耳波帶片某種厚度的變化，可以將聚焦點修正為近似圓形，而符合未來微影的需求。

6.2 未來工作與展望

- 一、使用傳統菲涅耳波帶片是可以突破傳統光學的繞射極限，本文中討論了厚度隨圈數的變化有所不同的聚焦性質。未來實際製作元件時，考慮目前半導體工業技術將很難實行，因此勢必朝向平版型的菲涅耳波帶片做設計，結構可以類似圓形的幾何形狀為之，並搭配最佳化程序，以找到更佳的聚焦特性。

- 二、以本程式為例，結構體本身最大的銀環半徑為 $7.259\ \mu\text{m}$ ，如表 5.1，及為了描述 $200 \sim 400\ \text{nm}$ 的聚焦點大小使用了網格大小為 $20\ \text{nm}$ 做計算，計算空間設定為 $800 \times 300 \times 800$ 網格點，使用總記憶體為 $122.26\ \text{GB}$ ，總 CPU time 為 64991.27 秒，計算量相當的驚人，平行處理上雖然使用了分散式記憶體架構，可以解決計算程序時所需的大量記憶體，及過長的計算時間（使用 16 顆處理器，平均單一處理器所負擔的記憶體為 $7641\ \text{MB}$ ，計算時間為 1083.18 秒）。未來仍可朝向減少記憶體及計算量來改寫程式，另外可以搭配 OpenMP 與 MPI 混合編程使計算更為快速。
- 三、吸收邊界條件是誤差來源之一，本論文是使用 APML 來做吸收邊界層，已有不錯的效果，使用 APML 設定吸收條件比 convolutional PML (CPML) 來的容易，僅需設定導電率張量。文獻指出 CPML 的吸收效果比 APML 好 [14]，未來程式的吸收邊界條件可以改成 CPML，以降低反射誤差。
- 四、使用非均勻的網格 (non-uniform grids)。本文的三維計算空間為扁平正方形，以結構到聚焦平面的軸最短。未來可以在菲涅耳波帶片與聚焦平面的計算空間中使用較密的網格，其餘空間使用較粗的網格，使記憶體使用效率更佳，並可以考慮搭配區域分裂法 (domain decomposition methods) 解決電磁問題。

參考文獻

- [1] K. S. Yee, "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equation in isotropic media," *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. AP-14, pp. 302-307, 1966.
- [2] G. E. Moore, "Cramming more components onto integrated circuits," *Electronics*, vol. 38, no. 8, 1965.
- [3] J. W. Goodman, *Introduction to Fourier Optics*, 3rd ed. New York:McGraw-Hill, 2005.
- [4] 高宗聖, 蔡定平, "近場光學新視界," *科學發展*, 386 期, 22-27 頁, 2005.
- [5] T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. F. Ghaemil, T. Thiol, and P. A. Wolff, "Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays," *Nature*, vol. 391, pp. 667-669, 1998.
- [6] S. Maier, P. Kik, H. Atwater, S. Meltzer, E. Harel, B. Koel, and A. Requicha, "Local detection of electromagnetic energy transport below the diffraction limit in metal nanoparticle plasmon waveguides," *Nature Mater.*, vol. 2, pp. 229-232, 2003.
- [7] S. K. Gray and T. Kupka, "Propagation of light in metallic nanowire arrays: Finite-difference time-domain. studies of silver cylinders," *Phys. Rev. B*, vol. 68, pp. 045415, 2003.
- [8] A. Ono, J. Kato, and S. Kawata, "Subwavelength optical imaging through a metallic nanorod array," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, no. 26, pp. 267407-267410, 2005.

- [9] Y. Q. Fu, W. Zhou, L. E. N. Lim, C. L. Du, and X. G. Luo, "Plasmonic Microzone Plate: Superfocusing at Visible Regime," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 91, no. 6, pp. 061124, 2007.
- [10] Y. Fu, W. Zhou, and L. E. N. Lim, "Near-field behavior of zone-plate-like plasmonic nanostructures," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 25, pp. 238-249, 2008.
- [11] Y. Fu, W. Zhou, and L. E. N. Lim, "Propagation properties of plasmonic microzone plates with and without fractals," *Appl. Phys. B*, vol. 90, pp. 421-425, 2008.
- [12] Matthew N. O. Sadiku, *Numerical Techniques in Electromagnetics*, 2nd ed. CRC Press, 2000.
- [13] D. M. Sullivan, "A simplified PML for use with the FDTD method," *IEEE Microwave Guided Wave Lett.*, vol. 6, pp. 97-99, 1996.
- [14] A. Taflove and S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics: The Finite-difference Time-domain Method*, 3rd ed. Boston:Artech House, 2005.
- [15] R. Luebbers, F. Hunsberger, K. Kunz, and R. Standler, "A Frequency Dependent Finite Difference Time Domain Formulation for Dispersive Materials," *IEEE Trans. Electromagn. Compat.*, vol. 32, no. 3, pp. 222-227, 1990.
- [16] S. Osher and J. A. Sethian, "Fronts Propagating with Curvature Dependent Speed: Algorithms Based on Hamilton-Jacobi Formulation," *J. Comput. Phys.*, vol. 79, pp. 12-49, 1998.
- [17] E. Olsson and G. Kreiss, "A conservative level set method for two phase flow," *J. Comput. Phys.*, vol. 210, no. 1, pp. 225-246, 2005.
- [18] G. Mur, "Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic field equations," *IEEE Trans. Electromagn. Compact.*, vol. 23, pp. 377-382, 1981.
- [19] E. Godlewski and P.-A. Raviart, *Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws*, Berlin:Springer, 1991.
- [20] J. P. Berenger, "A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves," *J. Comput. Phys.*, vol. 114, pp. 185-200, 1994.

- [21] Z. S. Sacks, D. M. Kingsland, R. Lee, and J. F. Lee, "A perfectly matched anisotropic absorber for use as an absorbing boundary condition," *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 43, pp. 1460-1463, 1995.
- [22] S. D. Gedney, "An anisotropic perfectly matched layer-absorbing medium for the truncation of FDTD lattices," *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 44, pp. 1630-1639, 1996.
- [23] Message Passing Interface Forum, "MPI: A Message Passing Interface Standard," Version 1.1, 1998. (<http://www.mpi-forum.org>).
- [24] Top500 Supercomputer Sites, "<http://www.top500.org/>".
- [25] B. Wilkinson and Michael Allen, *Parallel Programming: Techniques and Applications Using Networked Workstations and Parallel Computers*, Prentice Hall, 1998.
- [26] G. D. Smith, *Numerical Solution of Partial Differential Equations : Finite Difference Methods*, 3rd ed. USA:Oxford University Press, 1985.
- [27] C. F. Bohren and D. R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, New York:Wiley, 1998.
- [28] F. L. Pedrotti and L. S. Pedrotti, *Introduction to Optics*, 2nd ed. Prentice Hall, 1987.
- [29] P. B. Johnson and R. W. Christy "Optical Constants of the Noble Metals," *Phys. Rev. B*, vol. 6, pp. 4370-4379, 1972.
- [30] M. M. J. Treacy, "Dynamical diffraction explanation of the anomalous transmission of light through metallic gratings," *Phys. Rev. B*, vol. 66, pp. 195105, 2002.
- [31] H. Xiao 原著；羅正忠，張鼎張譯，半導體製程技術導論，二版臺北市：臺灣培生教育，2006.

附錄 A

三維球體散射解析解

A.1 向量波方程的解

考慮一個時間和諧 (time-harmonic) 的電磁場 (E、H) 在一個線性 (linear)、等方性 (isotropic)、齊性 (homogeneous) 的介質中，需滿足波動方程式 [27]

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = 0 \quad (\text{A.1.1a})$$

$$\nabla^2 \mathbf{H} + k^2 \mathbf{H} = 0 \quad (\text{A.1.1b})$$

其中 $k^2 = \omega^2 \epsilon \mu$ ，也滿足散度等於零

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \quad (\text{A.1.2a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (\text{A.1.2b})$$

此外 E、H 旋度表示

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu\mathbf{H} \quad (\text{A.1.3a})$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\epsilon\mathbf{E} \quad (\text{A.1.3b})$$

求解三維圓球體散射解析解問題。

假設 ψ 為純量函數 (scalar function)， $\mathbf{c}$ 為常數向量 (constant vector)，建立向量函數 (vector function) $\mathbf{M}$ 為：

$$\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{c}\psi) \quad (\text{A.1.4})$$

滿足

$$\nabla \cdot \mathbf{M} = 0 \quad (\text{A.1.5})$$

由

$$\nabla \times (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = \mathbf{A}(\nabla \cdot \mathbf{B}) - \mathbf{B}(\nabla \cdot \mathbf{A}) + (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{A} - (\mathbf{A} \cdot \nabla) \mathbf{B} \quad (\text{A.1.6a})$$

及

$$\nabla (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \times (\nabla \times \mathbf{B}) + \mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{A}) + (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{A} + (\mathbf{A} \cdot \nabla) \mathbf{B} \quad (\text{A.1.6b})$$

得知

$$\nabla^2 \mathbf{M} + k^2 \mathbf{M} = \nabla \times [\mathbf{c} (\nabla^2 \psi + k^2 \psi)] \quad (\text{A.1.7})$$

若為純量波動方程式

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0 \quad (\text{A.1.8})$$

$\mathbf{M}$ 就滿足向量波動方程式。也可寫成 $\mathbf{M}$ 正垂直於 $\mathbf{c}$ 尚可建立另一個向量函數：

$$\mathbf{N} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}}{k} \quad (\text{A.1.9})$$

具零散度，且滿足向量波動方程式

$$\nabla^2 \mathbf{N} + k^2 \mathbf{N} = 0 \quad (\text{A.1.10})$$

並具

$$\nabla \times \mathbf{N} = k \mathbf{M} \quad (\text{A.1.11})$$

顯然， $\mathbf{M}$ 與 $\mathbf{N}$ 滿足所有的電磁波條件，而要找適當的解，就是要找到適當的 ψ 解 ψ 稱之為 a generalizing function for the vector harmonics $\mathbf{M}$ and $\mathbf{N}$ ， $\mathbf{c}$ 為 guiding or pilot vector。

選擇函數 ψ 滿足球極座標之波動方程式，極座標： r 、 θ 、 ψ 選擇 $\mathbf{c}$ 為 $\mathbf{r}$

$$\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{r}\psi) \quad (\text{A.1.12})$$

其中 $\mathbf{r}$ 是半徑向量，所以 $\mathbf{r} \cdot \mathbf{M} = 0$ 。

純量波動方程式，式 (A.1.8) 使用球極座標展開

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + k^2 \psi = 0 \quad (\text{A.1.13})$$

式 (A.1.13) 解的形式為

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi) \quad (\text{A.1.14})$$

將式 (A.1.14) 代入式 (A.1.13)，使用變數分離 (separable variables) 可得

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + m^2 \Phi = 0 \quad (\text{A.1.15a})$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta = 0 \quad (\text{A.1.15b})$$

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + [k^2 r^2 - n(n+1)] R = 0 \quad (\text{A.1.15c})$$

式 (A.1.15) 解為

$$\psi_{emn} = \cos(m\phi) P_n^m(\cos \theta) z_n(kr) \quad (\text{A.1.16})$$

$$\psi_{omn} = \sin(m\phi) P_n^m(\cos \theta) z_n(kr) \quad (\text{A.1.17})$$

其中下標 e 與 o 分別表示 *even* 與 *odd*， m 、 n 為滿足函數 ψ 的變數常數。 z_n 為任意四個球類貝索函數 (spherical Bessel functions) (j_n ， y_n ， $h_n^{(1)}$ ， $h_n^{(2)}$) 所產生之 M 與 N 向量，為：

$$\mathbf{M}_{emn} = \nabla \times (r\psi_{emn}) \quad ; \quad \mathbf{M}_{omn} = \nabla \times (r\psi_{omn}) \quad (\text{A.1.18})$$

$$\mathbf{N}_{emn} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}_{emn}}{k} \quad ; \quad \mathbf{N}_{omn} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}_{omn}}{k} \quad (\text{A.1.19})$$

進一步

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{emn} = & \frac{-m}{\sin \theta} \sin(m\phi) P_n^m(\cos \theta) z_n(\rho) \hat{e}_\theta \\ & - \cos(m\phi) \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} z_n(\rho) \hat{e}_\phi \end{aligned} \quad (\text{A.1.20})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{omn} = & \frac{m}{\sin \theta} \cos(m\phi) P_n^m(\cos \theta) z_n(\rho) \hat{e}_\theta \\ & - \sin(m\phi) \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} z_n(\rho) \hat{e}_\phi \end{aligned} \quad (\text{A.1.21})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{N}_{emn} = & \frac{z_n(\rho)}{\rho} \cos(m\phi) n(n+1) P_n^m(\cos \theta) \hat{e}_r \\ & + \cos(m\phi) \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{e}_\theta \\ & - m \sin(m\phi) \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{\sin \theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{e}_\phi \end{aligned} \quad (\text{A.1.22})$$

$$\begin{aligned}
N_{omn} = & \frac{z_n(\rho)}{\rho} \sin(m\phi) n(n+1) P_n^m(\cos\theta) \hat{e}_r \\
& + \sin(m\phi) \frac{dP_n^m(\cos\theta)}{d\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{e}_\theta \\
& - m \cos(m\phi) \frac{dP_n^m(\cos\theta)}{\sin\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{e}_\phi
\end{aligned} \tag{A.1.23}$$

A.2 平面波展開

考慮一散射問題，x 方向入射平面波在球座標下可寫成

$$E_i = E_0 e^{ikr \cos\theta} \hat{e}_x \tag{A.2.1}$$

其中

$$\hat{e}_x = \sin\theta \cos\phi \hat{e}_r + \cos\theta \cos\phi \hat{e}_\theta - \sin\phi \hat{e}_\phi \tag{A.2.2}$$

以前一節四個解展開式 (A.2.1) 爲之

$$E_i = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=m}^{\infty} (B_{emn} M_{emn} + B_{omn} M_{omn} + A_{emn} N_{emn} + A_{omn} N_{omn}) \tag{A.2.3}$$

由於 $\sin m\phi$ 正垂直於 $\cos m'\phi$ (對所有 m 與 m')，所以 M_{emn} 與 M_{omn} 相互垂直。

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi M_{em'n'} \cdot M_{omn} \sin\theta d\theta d\phi = 0 \quad (\text{all } m, m', n, n') \tag{A.2.4}$$

其他， (N_{omn}, N_{emn}) ， (M_{omn}, N_{omn}) ， (M_{emn}, N_{emn}) 亦是相互垂直所以，係數 B_{emn} 爲

$$B_{emn} = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi E_i \cdot M_{emn} \sin\theta d\theta d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |M_{emn}|^2 \sin\theta d\theta d\phi} \tag{A.2.5}$$

同理可得 B_{omn} ， A_{emn} 及 A_{omn} 。進一步，得到： $B_{emn} = A_{mn} = 0$ (對所有 m 與 m') 其他係數則僅在 $m = 1$ 時，不等於 0。所以

$$E_i = \sum_{n=1}^{\infty} \left(B_{o1n} M_{o1n}^{(1)} + A_{e1n} N_{e1n}^{(1)} \right) \tag{A.2.6}$$

其中上標 (1) 表示 r 函數爲 j_n 且

$$B_{o1n} = i^n E_0 \frac{2n+1}{n(n+1)} \tag{A.2.7}$$

$$A_{e1n} = -iE_0 i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \quad (\text{A.2.8})$$

乃得到入射電場平面波在極坐標下展開

$$E_i = E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(M_{o1n}^{(1)} - iN_{e1n}^{(1)} \right) \quad (\text{A.2.9})$$

對式 (A.2.9) 做旋度其相對應的入射磁場為：

$$H_i = \frac{-k}{\omega\mu} E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(M_{o1n}^{(1)} + iN_{e1n}^{(1)} \right) \quad (\text{A.2.10})$$

A.3 散射場與內部場

假設一 x 方向平面波入射於一介質等方性 (isotropic)、齊性 (homogeneous) 半徑為 a 的介質中。

散射場為 ($r > a$) 定義為 E_s, H_s ；內部場為 ($r < a$) 定義為 E_I, H_I 邊界條件為：

$$(E_i + E_s - E_I) \times \hat{e}_r = 0 \quad (\text{A.3.1a})$$

$$(H_i + H_s - H_I) \times \hat{e}_r = 0 \quad (\text{A.3.1b})$$

得解：

$$E_I = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(c_n M_{o1n}^{(1)} - i d_n N_{e1n}^{(1)} \right) \quad (\text{A.3.2a})$$

$$H_I = \frac{-k_1}{\omega\mu_1} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(d_n M_{e1n}^{(1)} + i c_n N_{o1n}^{(1)} \right) \quad (\text{A.3.2b})$$

$$E_s = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(i a_n N_{e1n}^{(3)} - b_n M_{o1n}^{(3)} \right) \quad (\text{A.3.3a})$$

$$H_s = \frac{k_1}{\omega\mu_1} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(i b_n N_{o1n}^{(3)} + a_n M_{e1n}^{(3)} \right) \quad (\text{A.3.3b})$$

其中 μ_1 為內部場的導磁率，上標 (3) 表示 r 函數為 $h_n^{(3)}$ 且

$$E_n = i^n E_0 \frac{2n+1}{n(n+1)} \quad (\text{A.3.4})$$

附錄 B

程式使用說明

本研究所使用的叢集式電腦為國家網路與計算中心 (NCHC) 的 HP 64bit Cluster、軟體為 Intel Fortran Compiler 8.1，MPI 1.2 函式庫。使用方式可以參考 <http://140.110.2.200/>

使用 Makefile 來編譯程式，設定 CPU 數量與 Submit job 的排程：

Makefile 範例如下：

```
CC=mpif90                                # 使用 mpif90 編譯器
CFLAGS=-O3                               # O3 最佳化
OBJ = *.f90
exefile = a.out                           # 輸出執行檔
#-----bsub options-----
queue = 32cpu
CPU_Num = 16                             # 設定 cpu 數量
output = out                             # 輸出結果
error = err                              # 輸出錯誤
JobName = $(PWD)
#----- End of embedded BSUB options-----
prog:$(OBJ)                               # 編譯
$(CC) $(OBJ) -o $(exefile)
clean:                                    # 清除計算結果
@rm -rf *.out *.dat *.plt *.PLT work/* err* out*
job:                                      # 加入排程
bsub -o $(output) -e $(error) -J $(JobName) -n $(CPU_Num)
-q $(queue) mpirun -srun ./$(exefile)
```

一、執行

\$make clean

將上一回執行的結果清除

二、執行

\$make

對程式做編譯

三、執行

\$make job

將程式置入 LSF 做排程

