

國立臺灣大學電機資訊學院電機工程學系

碩士論文

Department of Electrical Engineering

College of Electrical Engineering and Computer Science

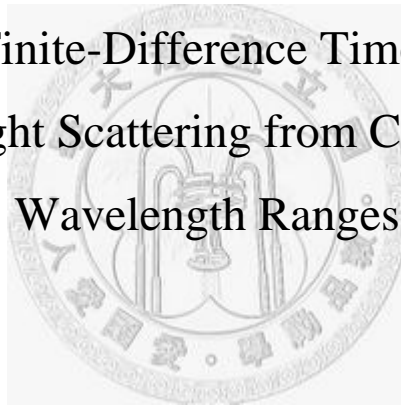
National Taiwan University

Master Thesis

利用一個脈衝波的有限差分時域法來模擬寬波長範圍

的細胞散射光

Using A Pulsed Finite-Difference Time-Domain Method  
to Simulate Light Scattering from Cells Over Broad  
Wavelength Ranges



巢國山

Guo-Shan Chao

指導教授：宋孔彬 博士

Advisor: Kung-Bin Sung, Ph.D.

中華民國 97 年 6 月

June, 2008

## 誌謝

二年的時間一下就過去了，在台大學到了不少東西，也讓我有時間能思考一下自己的目標與方向，心裡感到非常的充實。

首先，在此感謝我的指導老師宋孔彬博士，在研究方向上給了我很多的啟發與想法，也謝謝柏禎、留連與俊佑，在實驗室成立的初期，大家的努力與互相的幫助，更重要的是在心情不好的時候，有人可以聊聊、開開玩笑，紓解一下壓力。

在實驗上，也謝謝學長克槃與學姊德玉的幫助。最後，感謝我母親以及女友倫瑩，在繼續深造的路上，對我的支持，謝謝！



## 中文摘要

逆散射光譜對於細胞結構與折射率的變化非常的敏感，因此，若能建立一套模擬工具，將逆散射光譜與細胞結構以及折射率變化量之間的關係量化，將有機會實現上皮細胞非侵入式癌症檢測。

本論文主要是利用有限差分時域 (FDTD) 法來建立模擬工具，並加入高斯脈衝波，以達到模擬寬波長範圍的散射光，FDTD 是一套彈性且實用的數值方法來解 Maxwell's equation，其適用於任意形狀與電介質的物體。可藉由調整細胞模擬參數來觀察逆散射光譜的變化，藉此找出逆散射光譜與細胞結構以及折射率變化之間的關係。

利用 Mie theory 來驗證在均質圓球條件下的模擬結果，並且討論不同空間取樣率對於模擬結果準確度、消耗時間與記憶體使用量的影響。最後模擬數個不同條件的細胞核散射光譜，觀察其逆散射光譜的變化，確實會受到細胞核結構與折射率變化量的影響。

**關鍵字：**有限差分時域法、逆散射光譜、細胞結構、折射率變化量。

## Abstract

Backscattering is very sensitive to structure and refraction index variation of cell. Hence, if I can build a simulation tool to find relationship between backscattering and structure and refraction index variation of cell, and then, it would be potential to achieve non-invasive epithelium cancer diagnosis.

In this thesis, I use finite difference time domain (FDTD) method to build simulation tool, and use Gaussian pulsed for achieving simulation light scattering over broad wavelength ranges. FDTD is a flexible and powerful method to solve Maxwell's equation. FDTD is suitable for dielectric objects of arbitrary shape. By change the simulation parameter of cell to observe backscattering, and investigate the relationship between backscattering and structure and refraction index variation of cell.

To verify FDTD simulation result of uniform sphere by Mie theory, and discuss the influence of special sampling on accuracy, elapsed time and memory size. At last, I simulate several different nuclei, and observe the influence of structure and refraction index variation of cell on backscattering. The backscattering is certainly influenced by structure and refraction index variation of cell.

**Keyword : Finite Difference Time Domain, Backscattering, Cell Structure, Refraction Index Variation, Mie theory.**

# 目錄

口試委員會審定書.....	i
誌謝.....	ii
中文摘要.....	iii
英文摘要.....	iv
第一章 簡介.....	1
1-1 研究動機.....	1
1-2 研究目標.....	4
第二章 研究方法.....	5
2-1 The Yee Algorithm.....	5
2-2 Total Field/Scattered Field Formulation.....	11
2-3 Light Source.....	12
2-4 PML Boundary Condition.....	14
2-5 Near-to-Far-Field Transform.....	22
第三章 程式驗證與分析.....	26
3-1 Comparisons with Mie Theory.....	26
3-2 BroadBand Result.....	31
3-3 Analysis of different grid spacing.....	33

第四章	微米圓球的散射光譜.....	37
4-1	簡介與實驗方法.....	37
4-2	實驗結果.....	39
4-3	與模擬結果比較.....	41
第五章	細胞核散射光譜.....	43
第六章	討論.....	48
第六章	結論與未來工作.....	53
參考文獻	.....	54



## 圖目錄

圖 2-1 離散化電磁場在空間中的分布情形。.....	7
圖 2-2 電磁場在時間軸上的處理次序。.....	8
圖 2-3 Total field 與 Scattered field 的區域分布。.....	11
圖 2-4 入射光的時域圖形。.....	13
圖 2-5 入射光經傅氏轉換後的頻域圖形。.....	13
圖 2-6 在 PML 內 $\sigma$ 與 $\rho$ 的關係圖。.....	16
圖 2-7 不同方向的 $\sigma$ 與 $\sigma^*$ 在 PML 的分布圖。.....	17
圖 2-8 紅色虛線 (S) 為近場對遠場轉換的地方。.....	22
圖 2-9 近場對遠場轉換的座標圖。.....	23
圖 3-1 圓球結構示意圖。.....	26
圖 3-2 寬頻入射波經過直徑 $1\mu\text{m}$ 的圓球，其特定波長散射場的正規化取對數結果與 Mie theory 比較 (a) $\lambda=600\text{nm}$ 、(b) $\lambda=750\text{nm}$ 、(c) $\lambda=900\text{nm}$ 、(d) $\lambda=1000\text{nm}$ 。.....	27
圖 3-3 寬頻入射波經過直徑 $2\mu\text{m}$ 的圓球，其特定波長散射場的正規化取對數結果與 Mie theory 比較 (a) $\lambda=600\text{nm}$ 、(b) $\lambda=750\text{nm}$ 、(c) $\lambda=900\text{nm}$ 、(d) $\lambda=1000\text{nm}$ 。.....	28
圖 3-4 寬頻入射波經過直徑 $3\mu\text{m}$ 的圓球，其特定波長散射場的正規	

化取對數結果與 Mie theory 比較 (a)  $\lambda=600\text{nm}$ 、(b)  $\lambda=750\text{nm}$ 、  
(c)  $\lambda=900\text{nm}$ 、(d)  $\lambda=1000\text{nm}$ 。..... 29

圖 3-5(a) 寬頻入射光經過直徑  $1\mu\text{m}$  圓球所得到的寬頻散射光譜  
圖。..... 31

圖 3-5(b) 寬頻入射光經過直徑  $2\mu\text{m}$  圓球所得到的寬頻散射光譜  
圖。..... 31

圖 3-5(c) 寬頻入射光經過直徑  $3\mu\text{m}$  圓球所得到的寬頻散射光譜  
圖。..... 32

圖 3-6 不同空間取樣率與 Mie Theory 的計算結果。..... 33

圖 3-7 不同空間取樣率與 Mie Theory 結果的 RMS error。..... 34

圖 3-8 不同空間取樣率所消耗的計算時間。..... 34

圖 3-9 不同空間取樣率所佔用的記憶體大小。..... 35

圖 4-1 測量逆散射光譜的實驗架構，左邊為顯微鏡側面的剖面圖，右  
邊為顯微鏡正面的剖面圖。..... 38

圖 4-2 微米圓球的處理結果。..... 38

圖 4-3 CCD 所擷取到的影像，黃色框內的微米圓球為待測物。..... 39

圖 4-4 為圖 4-3 黃色框內的逆散射光譜圖，其中白色亮線即為微米圓  
球的逆散射光譜（此光譜包含背景雜訊），橫軸對應的是波  
長。..... 40



圖 4-5 微米圓球的逆散射光譜對波長的作圖。.....	40
圖 4-6 入射光波長 $\lambda=410\text{nm}\sim 510\text{nm}$ ，微米圓球逆散射光譜正規化後的實驗結果與模擬結果。.....	42
圖 5-1 細胞核結構示意圖。.....	44
圖 5-2 Case b 各波長散射場的模擬結果。.....	44
圖 5-3 Case a~c 的模擬結果，(a)順向散射光譜，(b) 逆向散射光譜。.....	45
圖 5-4 Case d~f 的模擬結果，(a)順向散射光譜，(b) 逆向散射光譜。.....	46
圖 5-5 Case b 與 g 的模擬結果，(a)順向散射光譜，(b) 逆向散射光譜。.....	47
圖 6-1 有加弦波與沒加弦波的結果。.....	49
圖 6-2 Case b 與 e 順向與逆向散射光譜的模擬結果。.....	52

## 表目錄

表 3-1 在入射光波長 600~1000nm，介質折射率 1.0，物體折射率 1.02 的條件下，三個不同直徑的圓球所消耗的時間與記憶體使用量。.....	32
表 3-2 列出空間取樣率 $N=10、20、30、40$ 的 $\Delta\text{RMS error}$ （與空間取樣率 $N=10$ 的差）、消耗時間以及記憶體使用量的結果。...	35
表 5-1 細胞核的模擬條件。.....	43
表 6-1 顯示利用單波長或寬波長入射光模擬時，所消耗的時間與記憶體的使用量。.....	51



# 一、簡介

## 1-1、研究動機

目前為止許多研究指出光散射光譜（Light scattering spectroscopy [LSS]）可以提供許多生物組織的細胞資訊[1-3]，經由分析逆散射光譜（Backscattering）可以得到細胞核大小、核染色質含量…等定量資訊。這主要是因為逆散射光譜對於細胞與細胞核的形態變化非常敏感，因此可以從中獲得細胞形態的定量資訊。要定量研究細胞形態就需要一套能將細胞模型化的方法，初期一些研究報告都是利用米氏原理（Mie theory）作為細胞核模型，而Mie theory主要是提供，平行光在均勻介質中，入射於均質圓球時，其散射光在空間分布的解析解。

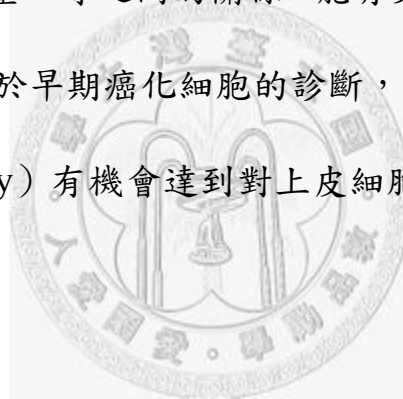
在Judith R. Mourant等人的報告裡[4]，他們假設組織內的散射物為均質圓球，且入射於每個圓球的入射光皆為平面波，如此便可利用Mie theory來預測組織內散射場的分布，此外，他們還利用polystyrene spheres來建立組織假體，並測量組織假體的光譜與Mie theory的預測結果比較。隔年（1998）Judith R. Mourant等人的報告[5]，進一步利用哺乳類動物的細胞，來研究光與生物組織之間的關係，並且定義測量到的訊號與散射物大小之間的關係。2000年Judith R. Mourant等人的報告[6]，則是研究細胞核對於整體散射光的貢獻，並考慮DNA含

量的多寡。Judith R. Mourant的作法是利用組織假體，來測量細胞散射光譜，而非真實的組織，且所量到的是一個總和效應的細胞散射光譜，並非單一細胞實際的散射光譜。L. T. Perelman等人的報告[7]，是將上皮細胞核視為米氏圓球，而上皮細胞核正規化的反射係數，經由傅氏轉換可得到上皮細胞核的大小分布。Vadim Backman等人的報告[8]，則是利用光的極化特性，來區分上皮細胞一次逆散射光與多次散射光的測量方法，其理論基礎為Mie theory。L. T. Perelman與Vadim Backman的方法是針對光譜在診斷上的應用，在實驗上也是測量一個總和效應的細胞散射光譜。上述報告都是將細胞或細胞核視為米氏圓球，然而，到目前為止，沒有細胞或細胞核散射光實驗可以證明其結果是正確的，顯而易見的原因是細胞與細胞核並非均質圓球。

有限差分時域（Finite-Difference Time-Domain [ FDTD ] ）法提供了一套彈性且實用的方法來研究細胞的散射光譜，此方法能提供Maxwell's equation在三度空間中的數值解，且適用於任意形狀與電介質的物體。早期都是利用弦波作為入射光源，所以一次只能模擬單一波長的細胞散射光，且FDTD在模擬細胞散射光時會佔用大量的記憶體與中央處理器時間（以一個 $1\mu\text{m}$ 的圓球而言，在入射光 $500\text{nm}$ 的條件下，格點間距 $\delta=25\text{nm}$ ，所需時間約一小時，記憶體使用約 $37\text{Mb}$ ），因此要模擬寬波長範圍的細胞散射光時，就需要花較長的時間才能得

到細胞在寬波長範圍的散射光，非常不符合時間效益。對於時間效益的問題，解決的方法是將入射光源由弦波改成高斯脈衝波[9]。高斯脈衝波在頻率域上也是高斯函數，是一個寬頻入射光，所以只要利用傅氏轉換（Fourier Transform）與power theory，就可以在執行一次FDTD後得到細胞在寬波長範圍的散射光。

FDTD method是一套彈性且強大的工具，利用FDTD將有助於研究細胞內各結構與其散射光之間的關係。對於逆散射光譜與上皮細胞核大小、核染色質含量…等之間的關係，能有更深入的了解與更強的關聯性證據，將有利於早期癌化細胞的診斷，配合共焦顯微技術（Confocal microscopy）有機會達到對上皮細胞非侵入式的檢測。



## 1-2、研究目標

- 利用C/C++來建立三維的FDTD模擬程式。C/C++非常適合處理龐大的浮點運算，且執行速度較其它數值軟體來的快（如：MatLab）。
- 以高斯脈衝波作為入射光源，並利用傅氏轉換（Fourier Transform）與power theory，來實現執行一次FDTD後得到細胞在寬波長範圍的散射光。
- 結合完美匹配層（Perfectly Matched Layer〔PML〕）吸收邊界條件。電磁波在空間中傳播是沒有固定範圍的，但是電腦的記憶體是有限的，因此要利用電腦來模擬電磁波時，就必須限定電磁波的傳播範圍，如此便會產生人為反射，在此選擇PML吸收邊界條件，來解決人為反射的問題。

## 二、研究方法

### 2-1、The Yee Algorithm

Finite-Difference Time-Domain (FDTD) 是 Yee 在 1966 年提出的 [10]，這個方法主要是將微分方程以差分法來處理 (Eq.2-1)，以利在電腦上運算。

$$\frac{\partial y(x)}{\partial x} = \frac{y(x + \Delta x) - y(x)}{\Delta x} \quad (2-1)$$

考慮在空間中均勻 (homogeneous) 且各向同性 (isotropic) 的介質裡，其 Maxwell's equation 的表示式如下：

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \quad \nabla \times \vec{H} = \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \quad (2-2)$$

式中， $\mu$  為導磁係數 (permeability)， $\varepsilon$  為介電常數 (permittivity)。本論文採用卡氏座標系，因此電磁場在卡氏座標系下共有六個分量，其表示式為 Eq.2-3。

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right), \quad (2-3a)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right), \quad (2-3b)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right), \quad (2-3c)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right), \quad (2-3d)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right), \quad (2-3e)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right), \quad (2-3f)$$

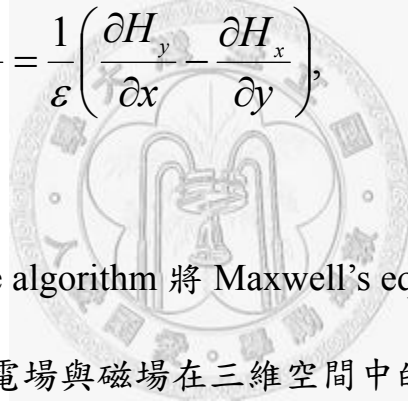


圖 2-1 是利用 Yee algorithm 將 Maxwell's equation (Eq.2-3) 在空間上離散化之後，其電場與磁場在三維空間中的分佈情形（藍色代表電場、紅色代表磁場），此六面體為一個基本的 Cell，且其邊長皆為  $\delta$  ( $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \delta$ )， $\delta$  的定義為  $\lambda/N$ ，為每個維度分割的最小單位， $\lambda$  為入射光波長（對於多頻入射光， $\lambda$  為最短波長）， $N$  為空間取樣率， $\delta$  必須小於  $\lambda/10$ [11]。在模擬時會先把有限空間規劃成這個基本 Cell 的組成。



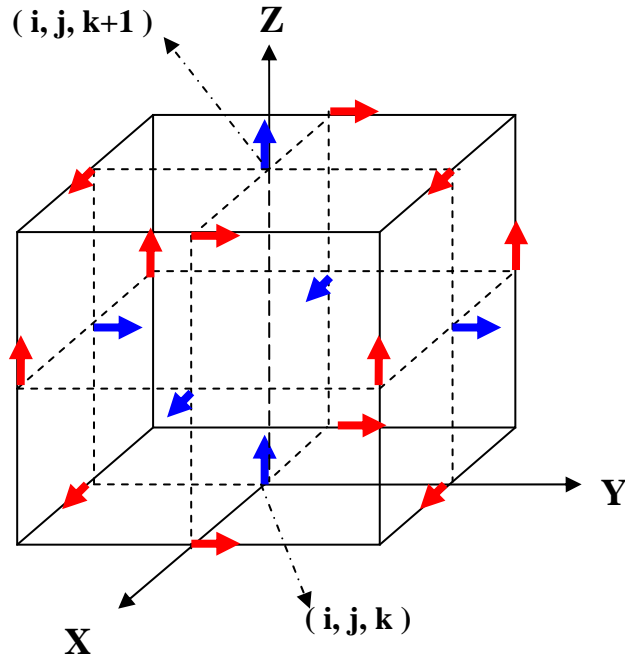


圖2-1 離散化電磁場在空間中的分布情形。

在時間上的離散化則是如圖2-2所示，在任一時刻只考慮電場或磁場的變化，兩者交替的改變。根據Courant穩定準則 $\Delta t$ 必須要滿足Eq.2-4，其中 $V_{\max}$ 為光在介質中最大的波速[11]。

$$\Delta t \leq \frac{1}{V_{\max}} \left( \frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (2-4)$$

在此取 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \delta$ ，且 $\Delta t$ 、 $\delta$ 與 $V_{\max}$ 的關係如下：

$$\Delta t = \frac{\delta}{2V_{\max}} \quad (2-5)$$

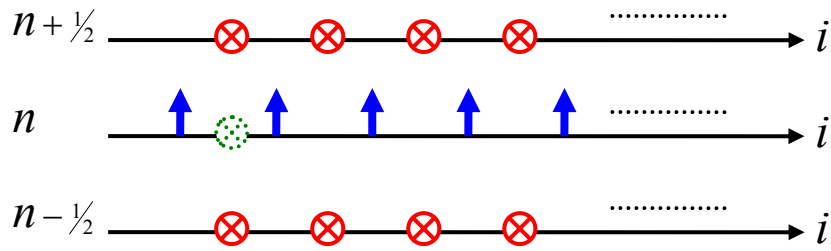


圖2-2 電磁場在時間軸上的處理次序。

根據 Yee algorithm 的標示，空間上任一點在卡氏座標系下可標示成[10]：

$$(i, j, k) = (i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$$

下述標示為一完整的標示，其中  $U$  代表電場或磁場，上標代表時間，下標代表方向。

$$U_x^n(i, j, k) = U_x(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t)$$

利用上述方法將 Maxwell's equation 離散化，其結果如下：

$$H_x^{n+1/2}(i, j + 1/2, k) = H_x^{n-1/2}(i, j + 1/2, k) + \left\{ \left( \frac{\Delta t}{\delta\mu(i, j + 1/2, k)} \right) \left[ \begin{array}{l} E_y^n(i, j + 1/2, k + 1/2) - E_y^n(i, j + 1/2, k - 1/2) \\ - E_z^n(i, j + 1, k) + E_z^n(i, j, k) \end{array} \right] \right\}, \quad (2-6a)$$

$$\begin{aligned}
H_y^{n+1/2}(i+1/2, j, k) &= H_y^{n-1/2}(i+1/2, j, k) \\
&+ \left\{ \left( \frac{\Delta t}{\delta\mu(i+1/2, j, k)} \right)^\times \right. \\
&\left. \left[ \begin{array}{c} E_z^n(i+1, j, k) - E_z^n(i, j, k) \\ -E_x^n(i+1/2, j, k+1/2) + E_x^n(i+1/2, j, k-1/2) \end{array} \right] \right\}, \tag{2-6b}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_z^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2, k+1/2) &= H_z^{n-1/2}(i+1/2, j+1/2, k+1/2) \\
&+ \left\{ \left( \frac{\Delta t}{\delta\mu(i+1/2, j+1/2, k+1/2)} \right)^\times \right. \\
&\left. \left[ \begin{array}{c} E_x^n(i+1/2, j+1, k+1/2) - E_x^n(i+1/2, j, k+1/2) \\ -E_y^n(i+1, j+1/2, k+1/2) + E_y^n(i, j+1/2, k+1/2) \end{array} \right] \right\}, \tag{2-6c}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E_x^{n+1}(i+1/2, j, k+1/2) &= E_x^n(i+1/2, j, k+1/2) \\
&+ \left\{ \left( \frac{\Delta t}{\delta\varepsilon(i+1/2, j, k+1/2)} \right)^\times \right. \\
&\left. \left[ \begin{array}{c} H_z^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2, k+1/2) - H_z^{n+1/2}(i+1/2, j-1/2, k+1/2) \\ -H_y^{n+1/2}(i+1/2, j, k+1) + H_y^{n+1/2}(i+1/2, j, k) \end{array} \right] \right\}, \tag{2-6d}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E_y^{n+1}\left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right) &= E_y^n\left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right) \\
&+ \left\{ \left( \frac{\Delta t}{\delta\varepsilon\left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right)} \right) \times \right. \\
&\left. \left[ \begin{aligned} &H_x^{n+\frac{1}{2}}\left(i, j + \frac{1}{2}, k + 1\right) - H_x^{n+\frac{1}{2}}\left(i, j + \frac{1}{2}, k\right) \\ &- H_z^{n+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right) + H_z^{n+\frac{1}{2}}\left(i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right) \end{aligned} \right] \right\},
\end{aligned}
\tag{2-6e}$$

$$\begin{aligned}
E_z^{n+1}(i, j, k) &= E_z^n(i, j, k) \\
&+ \left\{ \left( \frac{\Delta t}{\delta\varepsilon(i, j, k)} \right) \left[ \begin{aligned} &H_y^{n+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right) - H_y^{n+\frac{1}{2}}\left(i - \frac{1}{2}, j, k\right) \\ &- H_x^{n+\frac{1}{2}}\left(i, j + \frac{1}{2}, k\right) + H_x^{n+\frac{1}{2}}\left(i, j - \frac{1}{2}, k\right) \end{aligned} \right] \right\}.
\end{aligned}
\tag{2-6f}$$

其中每個格點的 $\varepsilon(i, j, k)$ 與 $\mu(i, j, k)$ 都要事先定義好，其數值大小與物體材質有關。

## 2-2、Total Field/Scattered Field Formulation

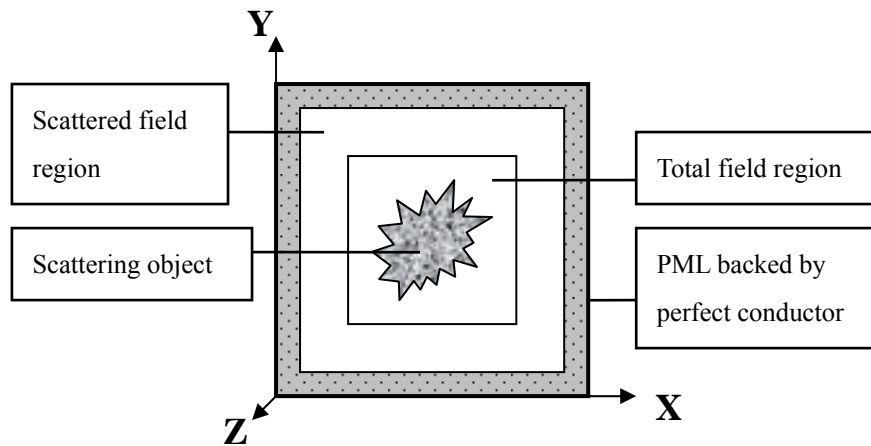


圖2-3 Total field與Scattered field的區域分布。

Total field 是指入射場加散射場，而 Scattered field 就很單純的只有散射場，其分佈如圖 2-3 所示。將模擬空間分成 Total field region 與 Scattered field region 的目的是希望，在模擬的時候就先把入射場與散射場分離出來，以便後面將近場散射場轉換成遠場散射場的處理。

入射場與散射場在 Total field 區域的關係如下：

$$E_{total} = E_{inc} + E_{scattered}, \quad (2-7)$$

$$H_{total} = H_{inc} + H_{scattered}. \quad (2-8)$$

## 2-3、Light Source

高斯脈衝平面波（Gaussian pulse plane wave）在頻率域也是一個高斯分布，為一個寬波長範圍的入射光，在時域上，當時間遠離中心峰值的時間時，其電場強度會趨近於零，因此選擇高斯脈衝平面波作為入射光源，並且加入正弦波作為載波，數學式如下：

$$E_{inc}(t) = E_0 \exp\left[-\left(\frac{t-t_0}{w}\right)^2\right] \sin(2\pi f_{max} t) \quad (2-9)$$

其中， $t_0$  為中心峰值的延遲時間， $w$  為脈寬， $f_{max}$  為感興趣頻率的<sub>最大值</sub>（也就是最短的波長 $\lambda_{min}$ ），加入正弦波的目的是為了平移中心頻率，如此可以使感興趣的波長範圍的光強度較強，而選擇最大頻率的原因在於，加入弦波後的光源，其傅氏轉換有兩個高斯分布項，兩個高斯分布的中心峰值所在位置越遠的話，其互相影響的效果也越小，經由傅氏轉換後得到Eq.2-10，Eq.2-11為其正規化的結果。

$$F\{E_{inc}(t)\}(f) = j \frac{E_0 \sqrt{\pi} w}{2} \exp(-j2\pi f t_0) \left\{ \begin{array}{l} \exp\left[-j2\pi f_{max} t_0 - \pi^2 w^2 (f + f_{max})^2\right] \\ - \exp\left[j2\pi f_{max} t_0 - \pi^2 w^2 (f - f_{max})^2\right] \end{array} \right\} \quad (2-10)$$

$$\frac{|F\{E_{inc}(t)\}(f)|}{|F\{E_{inc}(t)\}(f_{max})|} = \left\{ \frac{\exp[-2\pi^2 w^2 (f + f_{max})^2] + \exp[-2\pi^2 w^2 (f - f_{max})^2]}{-2 \cos(4\pi f_{max} t_0) \exp[-2\pi^2 w^2 (f^2 + f_{max}^2)]} \right\}^{1/2} \quad (2-11)$$

圖 2-4 為入射光的時域圖形，圖 2-5 為入射光經傅氏轉換與正規化後的頻域圖形，並與離散的計算結果比較。（其中  $f_{max} = C / \lambda_{min}$ ， $C$  為光速， $\lambda = 400\text{nm} \sim 800\text{nm}$ ， $w = 80 * \Delta t$ ， $t_0 = 4 * w$ ， $E_0 = 1$ ）

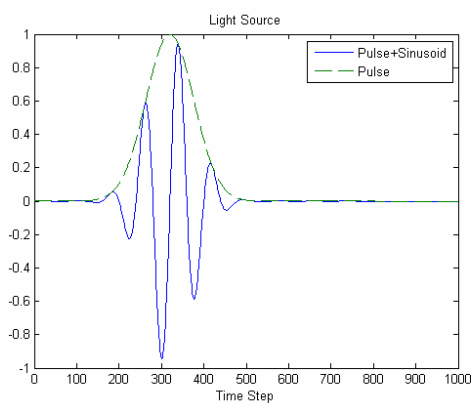


圖2-4 入射光的時域圖形。

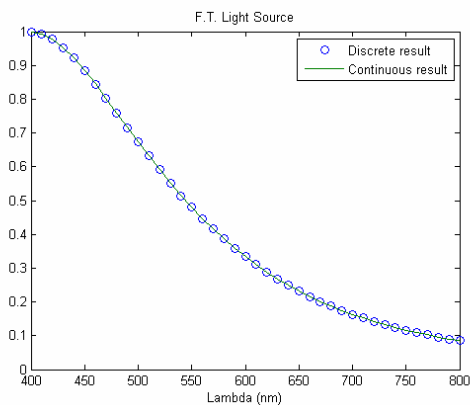


圖2-5 入射光經傅氏轉換後的頻域圖形。

## 2-4、PML Boundary Condition

Perfectly matched layer (PML) 是 Berenger 在 1994 年提出的[12]，是一種吸收邊界條件，其目的是為了消除人為的反射，因為電腦所能模擬的空間是有限的，所以當電磁波碰到事先設定的邊界時就會發生反射現象，但是在實驗時並沒有把電磁波限制在有限區間裡，所以當我們將電磁波限制在有限區間模擬時，會使得區間內的電場與磁場越來越強，因此為了要消除人為反射所造成的錯誤，我們需要一個吸收邊界條件，好把反射波吸收消耗掉。圖 2-3 灰色的部分就是 PML 的範圍，在 PML 的外層是 perfectly electric conductor (PEC)，所有通過 PEC 的電磁波，其電場都會變成零。

Berenger 的方法是將三個維度的電磁場再加以細分，分成  $E_{xy}$ 、 $E_{xz}$ 、 $E_{yx}$ 、 $E_{yz}$ 、 $E_{zx}$ 、 $E_{zy}$ 、 $H_{xy}$ 、 $H_{xz}$ 、 $H_{yx}$ 、 $H_{yz}$ 、 $H_{zx}$ 、 $H_{zy}$  共十二個部份，下列是磁場與電場經過細分後的表示式：

$$\begin{aligned}
 \mu \frac{\partial H_{xz}}{\partial t} + \sigma_z^* H_{xz} &= \frac{\partial(E_{yz} + E_{yx})}{\partial z}, & \mu \frac{\partial H_{xy}}{\partial t} + \sigma_y^* H_{xy} &= -\frac{\partial(E_{zx} + E_{zy})}{\partial y}, \\
 \mu \frac{\partial H_{yx}}{\partial t} + \sigma_x^* H_{yx} &= \frac{\partial(E_{zx} + E_{zy})}{\partial x}, & \mu \frac{\partial H_{yz}}{\partial t} + \sigma_z^* H_{yz} &= -\frac{\partial(E_{xy} + E_{xz})}{\partial z}, \\
 \mu \frac{\partial H_{zy}}{\partial t} + \sigma_y^* H_{zy} &= \frac{\partial(E_{xy} + E_{xz})}{\partial y}, & \mu \frac{\partial H_{zx}}{\partial t} + \sigma_x^* H_{zx} &= -\frac{\partial(E_{yz} + E_{yx})}{\partial x}.
 \end{aligned}$$

(2-12a~f)



$$\begin{aligned}
\varepsilon \frac{\partial E_{xy}}{\partial t} + \sigma_y E_{xy} &= \frac{\partial(H_{zy} + H_{zx})}{\partial y}, & \varepsilon \frac{\partial E_{xz}}{\partial t} + \sigma_z E_{xz} &= -\frac{\partial(H_{yx} + H_{yz})}{\partial z}, \\
\varepsilon \frac{\partial E_{yz}}{\partial t} + \sigma_z E_{yz} &= \frac{\partial(H_{xy} + H_{xz})}{\partial z}, & \varepsilon \frac{\partial E_{yx}}{\partial t} + \sigma_x E_{yx} &= -\frac{\partial(H_{zx} + H_{zy})}{\partial x}, \\
\varepsilon \frac{\partial E_{zx}}{\partial t} + \sigma_x E_{zx} &= \frac{\partial(H_{yx} + H_{yz})}{\partial x}, & \varepsilon \frac{\partial E_{zy}}{\partial t} + \sigma_y E_{zy} &= -\frac{\partial(H_{xz} + H_{xy})}{\partial y}.
\end{aligned}$$

(2-12g~1)

其中， $E_{yx}$  的 y 是指 y 方向的電場，x 是指向 x 方向傳波， $\sigma$  與  $\sigma^*$  分別為電場與磁場的導電率，當  $\sigma$  與  $\sigma^*$  的關係如 Eq.2-13 時，反射係數 (reflection coefficient [  $\Gamma$  ]) 等於零，此時沒有反射發生[12]。

$$\frac{\sigma^*}{\mu_1} = \frac{\sigma}{\varepsilon_1}, \tag{2-13}$$

在此考慮  $\sigma$  與  $\sigma^*$  並非定值，而是會隨著距離的改變而改變，其關係如 Eq.2-14，圖 2-6 為其示意圖。

$$\sigma(\rho) = \sigma_0 g^{\rho/\delta} \tag{2-14}$$

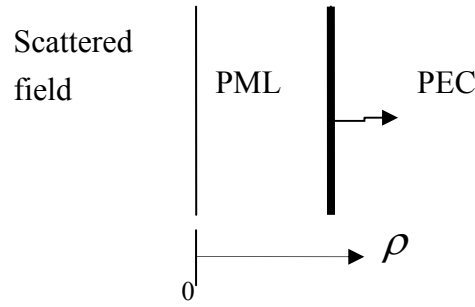


圖 2-6 在 PML 內  $\sigma$  與  $\rho$  的關係圖。

其中， $\rho$  為從散射區與 PML 介面到 PML 內的距離， $\delta$  如同前面所提的，為 FDTD 空間格點的大小， $g$  是比例係數。在不同角度下的反射誤差（reflection error） $R(\theta)$  與  $\sigma_0$  的關係如下[11]：

$$R(\theta) = \exp\left[\frac{-2\eta\varepsilon_r\sigma_0\delta(g^L - 1)\cos\theta}{\ln g}\right] \quad (2-15)$$

其中， $L$  是在 PML 內的格點數目， $\eta = \sqrt{\mu/\varepsilon}$ 。由 Eq.2-15 可以看出，當  $\theta$  等於零時，反射誤差最大，因此在選定  $\sigma_0$  時，只要考慮  $\theta = 0$  的反射誤差  $R(0)$  即可，將 Eq.2-14 與 Eq.2-15 整理後得到下式：

$$\sigma(\rho) = -\frac{\ln[R(0)]\ln g}{2\eta\varepsilon_r\delta(g^N - 1)}g^{\rho/\delta} \quad (2-16)$$

其中，L、g 與  $R(0)$  要事先定義好。利用 Eq.2-13 可以得到  $\sigma^*$ 。

由 Eq.2-14 可以看出  $\sigma$  ( $\sigma^*$ ) 與傳波方向有關，而不同方向的  $\sigma$  與  $\sigma^*$  在 PML 的分布如圖 2-7 所示：

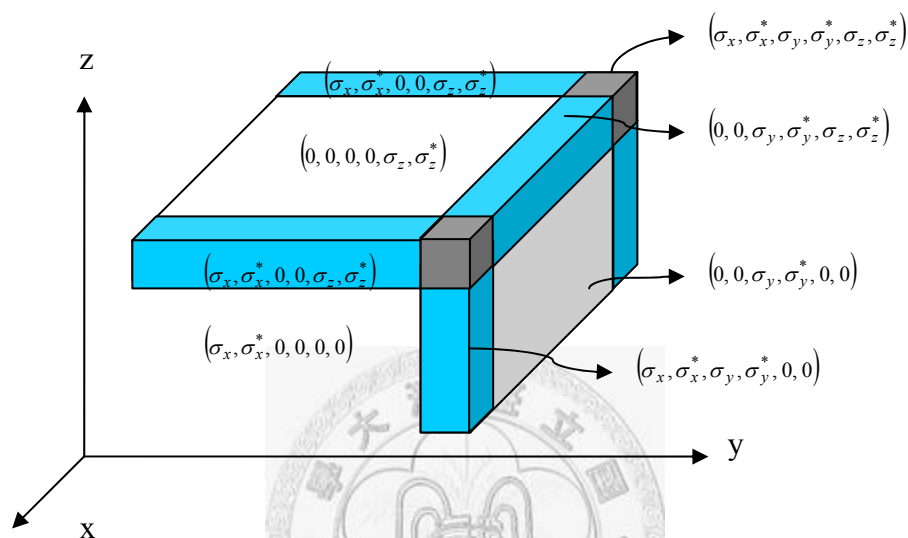


圖 2-7 不同方向的  $\sigma$  與  $\sigma^*$  在 PML 的分布圖。

將前面提到含有  $\sigma$  與  $\sigma^*$  的 Maxwell's equation 以指數方式離散化

後得到下式：

$$H_{xz}^{n+1/2}(i, j + 1/2, k) = \exp\left(\frac{-\eta^2 \sigma_z (k + 1/2) \Delta t}{\mu(i, j + 1/2, k)}\right) H_{xz}^{n-1/2}(i, j + 1/2, k) + \left\{ \frac{1 - \exp\left(\frac{-\eta^2 \sigma_z (k + 1/2) \Delta t}{\mu(i, j + 1/2, k)}\right)}{\eta^2 \sigma_z (k + 1/2) \delta} \left[ \begin{array}{l} E_{yz}^n(i, j + 1/2, k + 1/2) - E_{yz}^n(i, j + 1/2, k - 1/2) \\ + E_{yx}^n(i, j + 1/2, k + 1/2) - E_{yx}^n(i, j + 1/2, k - 1/2) \end{array} \right] \right\}, \quad (2-17a)$$

$$\begin{aligned}
H_{xy}^{n+\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}, k) &= \exp\left(\frac{-\eta^2 \sigma_y (j + \frac{1}{2}) \Delta t}{\mu(i, j + \frac{1}{2}, k)}\right) H_{xy}^{n-\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}, k) \\
&- \left\{ \frac{\left(1 - \exp\left(\frac{-\eta^2 \sigma_y (j + \frac{1}{2}) \Delta t}{\mu(i, j + \frac{1}{2}, k)}\right)\right)}{\eta^2 \sigma_y (j + \frac{1}{2}) \delta} \left[ \begin{aligned} &E_{zx}^n(i, j + 1, k) - E_{zx}^n(i, j, k) \\ &+ E_{zy}^n(i, j + 1, k) - E_{zy}^n(i, j, k) \end{aligned} \right] \right\},
\end{aligned}
\tag{2-17b}$$

$$\begin{aligned}
H_{yx}^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j, k) &= \exp\left(\frac{-\eta^2 \sigma_x (i + \frac{1}{2}) \Delta t}{\mu(i + \frac{1}{2}, j, k)}\right) H_{yx}^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j, k) \\
&+ \left\{ \frac{\left(1 - \exp\left(\frac{-\eta^2 \sigma_x (i + \frac{1}{2}) \Delta t}{\mu(i + \frac{1}{2}, j, k)}\right)\right)}{\eta^2 \sigma_x (i + \frac{1}{2}) \delta} \left[ \begin{aligned} &E_{zx}^n(i + 1, j, k) - E_{zx}^n(i, j, k) \\ &+ E_{zy}^n(i + 1, j, k) - E_{zy}^n(i, j, k) \end{aligned} \right] \right\},
\end{aligned}
\tag{2-17c}$$

$$\begin{aligned}
H_{yz}^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j, k) &= \exp\left(\frac{-\eta^2 \sigma_z (k + \frac{1}{2}) \Delta t}{\mu(i + \frac{1}{2}, j, k)}\right) H_{yz}^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j, k) \\
&- \left\{ \frac{\left(1 - \exp\left(\frac{-\eta^2 \sigma_z (k + \frac{1}{2}) \Delta t}{\mu(i + \frac{1}{2}, j, k)}\right)\right)}{\eta^2 \sigma_z (k + \frac{1}{2}) \delta} \left[ \begin{aligned} &E_{xy}^n(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}) + E_{xy}^n(i + \frac{1}{2}, j, k - \frac{1}{2}) \\ &+ E_{xz}^n(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}) + E_{xz}^n(i + \frac{1}{2}, j, k - \frac{1}{2}) \end{aligned} \right] \right\},
\end{aligned}
\tag{2-17d}$$

$$\begin{aligned}
& H_{zy}^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) = \\
& \exp \left( \frac{-\eta^2 \sigma_y (j + \frac{1}{2}) \Delta t}{\mu \left( i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right)} \right) H_{zy}^{n-1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) \\
& + \left\{ \frac{\left( 1 - \exp \left( \frac{-\eta^2 \sigma_y (j + \frac{1}{2}) \Delta t}{\mu \left( i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right)} \right) \right)}{\eta^2 \sigma_y (j + \frac{1}{2}) \delta} \right\} \times \\
& \left[ \begin{aligned} & E_{xy}^n \left( i + \frac{1}{2}, j + 1, k + \frac{1}{2} \right) - E_{xy}^n \left( i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) \\ & + E_{xz}^n \left( i + \frac{1}{2}, j + 1, k + \frac{1}{2} \right) - E_{xz}^n \left( i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \right] \quad (2-17e)
\end{aligned}$$

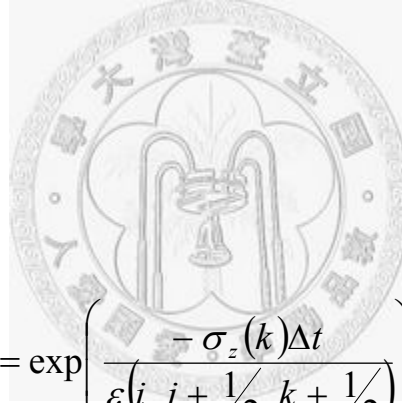
$$\begin{aligned}
& H_{zx}^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) = \\
& \exp \left( \frac{-\eta^2 \sigma_x \left( i + \frac{1}{2} \right) \Delta t}{\mu \left( i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right)} \right) H_{zx}^{n-1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) \\
& - \left\{ \frac{\left( 1 - \exp \left( \frac{-\eta^2 \sigma_x \left( i + \frac{1}{2} \right) \Delta t}{\mu \left( i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right)} \right) \right)}{\eta^2 \sigma_x \left( i + \frac{1}{2} \right) \delta} \right\} \times \\
& \left[ \begin{aligned} & E_{yz}^n \left( i + 1, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) + E_{yz}^n \left( i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) \\ & + E_{yx}^n \left( i + 1, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) + E_{yx}^n \left( i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \right] \quad (2-17f)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& E_{xy}^{n+1} \left( i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) = \exp \left( \frac{-\sigma_y (j) \Delta t}{\varepsilon \left( i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right)} \right) E_{xy}^n \left( i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) \\
& + \left\{ \frac{\left( 1 - \exp \left( \frac{-\sigma_y (j) \Delta t}{\varepsilon \left( i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right)} \right) \right)}{\sigma_y (j) \delta} \right\} \times \\
& \left[ \begin{aligned} & H_{zy}^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) - H_{zy}^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) \\ & + H_{zx}^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) - H_{zx}^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \right] \quad (2-17g)
\end{aligned}$$

$$E_{xz}^{n+1}\left(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}\right) = \exp\left(\frac{-\sigma_z(k)\Delta t}{\varepsilon\left(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}\right)}\right) E_{xz}^n\left(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}\right)$$

$$- \left\{ \left[ \frac{1 - \exp\left(\frac{-\sigma_z(k)\Delta t}{\varepsilon\left(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}\right)}\right)}{\sigma_z(k)\delta} \right] \times \left[ \begin{array}{l} H_{yx}^{n+1/2}\left(i + \frac{1}{2}, j, k + 1\right) + H_{yx}^{n+1/2}\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right) \\ + H_{yz}^{n+1/2}\left(i + \frac{1}{2}, j, k + 1\right) + H_{yz}^{n+1/2}\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right) \end{array} \right] \right\},$$

(2 - 17h)



$$E_{yz}^{n+1}\left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right) = \exp\left(\frac{-\sigma_z(k)\Delta t}{\varepsilon\left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right)}\right) E_{yz}^n\left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right)$$

$$+ \left\{ \left[ \frac{1 - \exp\left(\frac{-\sigma_z(k)\Delta t}{\varepsilon\left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right)}\right)}{\sigma_z(k)\delta} \right] \times \left[ \begin{array}{l} H_{xz}^{n+1/2}\left(i, j + \frac{1}{2}, k + 1\right) - H_{xz}^{n+1/2}\left(i, j + \frac{1}{2}, k\right) \\ + H_{xy}^{n+1/2}\left(i, j + \frac{1}{2}, k + 1\right) - H_{xy}^{n+1/2}\left(i, j + \frac{1}{2}, k\right) \end{array} \right] \right\},$$

(2 - 17i)

$$E_{yx}^{n+1}\left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right) = \exp\left(\frac{-\sigma_x(i)\Delta t}{\varepsilon\left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right)}\right) E_{yx}^n\left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right)$$

$$- \left\{ \frac{1 - \exp\left(\frac{-\sigma_x(i)\Delta t}{\varepsilon\left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right)}\right)}{\sigma_x(i)\delta} \times \left[ \begin{aligned} &H_{zy}^{n+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right) + H_{zy}^{n+\frac{1}{2}}\left(i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right) \\ &+ H_{zx}^{n+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right) + H_{zx}^{n+\frac{1}{2}}\left(i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right) \end{aligned} \right] \right\},$$

(2-17j)

$$E_{zx}^{n+1}(i, j, k) = \exp\left(\frac{-\sigma_x(i)\Delta t}{\varepsilon(i, j, k)}\right) E_{zx}^n(i, j, k)$$

$$+ \left\{ \frac{1 - \exp\left(\frac{-\sigma_x(i)\Delta t}{\varepsilon(i, j, k)}\right)}{\sigma_x(i)\delta} \left[ \begin{aligned} &H_{yx}^{n+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right) - H_{yx}^{n+\frac{1}{2}}\left(i - \frac{1}{2}, j, k\right) \\ &+ H_{yz}^{n+\frac{1}{2}}\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right) - H_{yz}^{n+\frac{1}{2}}\left(i - \frac{1}{2}, j, k\right) \end{aligned} \right] \right\}.$$

(2-17k)

$$E_{zy}^{n+1}(i, j, k) = \exp\left(\frac{-\sigma_y(j)\Delta t}{\varepsilon(i, j, k)}\right) E_{zy}^n(i, j, k)$$

$$- \left\{ \frac{1 - \exp\left(\frac{-\sigma_y(j)\Delta t}{\varepsilon(i, j, k)}\right)}{\sigma_y(j)\delta} \left[ \begin{aligned} &H_{xz}^{n+\frac{1}{2}}\left(i, j + \frac{1}{2}, k\right) + H_{xz}^{n+\frac{1}{2}}\left(i, j - \frac{1}{2}, k\right) \\ &+ H_{xy}^{n+\frac{1}{2}}\left(i, j + \frac{1}{2}, k\right) + H_{xy}^{n+\frac{1}{2}}\left(i, j - \frac{1}{2}, k\right) \end{aligned} \right] \right\}.$$

(2-17l)

## 2-5、Near-to-Far-Field Transform

利用 FDTD 算出來的散射場為近場，但實驗所測得的散射光譜為遠場，所以還要經過近場對遠場的轉換，其原理主要是利用惠根斯原理與 Green's theorem 來實現，圖 2-8 紅色虛線 (S) 就是近場對遠場轉換的地方。

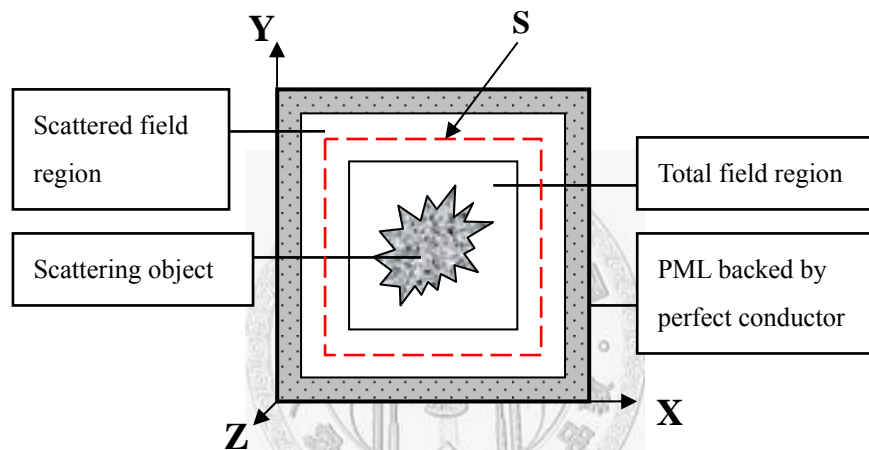


圖 2-8 紅色虛線 (S) 為近場對遠場轉換的地方。

先算出近場電磁場在不同頻率下對時間的傅氏轉換，數學式如下：

$$G(f_{\min} + k\Delta f) = \sum_{n=0}^{N-1} g(n) \exp[-j2\pi(f_{\min} + k\Delta f)n\Delta t], \quad (2-18)$$
$$k = 0, 1, \dots, M-1$$



其中， $g(n)$ 為電場或磁場值， $n$ 為時間步階， $f_{\min}$ 為最小的入射頻率， $\Delta f$ 為頻率的改變量， $k$ 為頻率步階， $M$ 為最大頻率步階， $N$ 為最大時間步階，若入射波為弦波，則積最後一個週期。然後利用 Surface equivalence theorem[11]來定義在  $S$  上的等效電磁表面電流密度。電的表面電流密度  $\vec{J}_s$  與磁的表面電流密度  $\vec{M}_s$  分別定義如下[11]:

$$\vec{J}_s = \hat{n} \times \vec{H}, \quad \vec{M}_s = -\hat{n} \times \vec{E}. \quad (2-19)$$

其中， $\vec{E} = (E_x, E_y, E_z)$  與  $\vec{H} = (H_x, H_y, H_z)$  為電磁場的近場分量， $\hat{n}$  為紅色虛線 ( $S$ ) 上任一面的法線向量。定義散射結構的中心為近場對遠場轉換的原點，如圖 2-9。

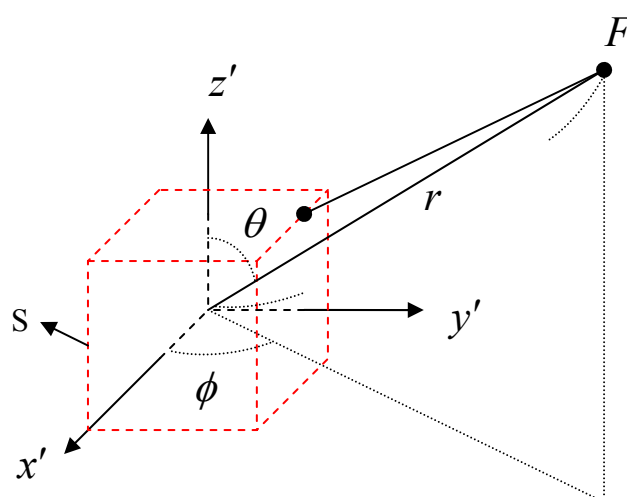


圖 2-9 近場對遠場轉換的座標圖。

其中， $F$  代表遠場的電場或磁場， $\theta$  為傳遞方向與  $z'$  的夾角， $\phi$  為傳遞方向在  $x'-y'$  平面的投影量與  $x'$  的夾角， $r$  為原點到遠場  $F$  的距離。在上述座標系下，利用 Green's function[11] 求出遠場任一點電場與磁場的大小，數學式如下：

$$\begin{aligned}\bar{E}_\theta = & -jk\eta \left( \frac{e^{-jkr}}{4\pi r} \right) \left[ \cos\theta \cos\phi \tilde{J}_x + \cos\theta \sin\phi \tilde{J}_y - \sin\theta \tilde{J}_z \right] \\ & - jk \left( \frac{e^{-jkr}}{4\pi r} \right) \left[ -\sin\phi \tilde{M}_x + \cos\phi \tilde{M}_y \right],\end{aligned}\tag{2-20}$$

$$\begin{aligned}\bar{E}_\phi = & -jk\eta \left( \frac{e^{-jkr}}{4\pi r} \right) \left[ -\sin\phi \tilde{J}_x + \cos\phi \tilde{J}_y \right] \\ & - jk \left( \frac{e^{-jkr}}{4\pi r} \right) \left[ -\cos\theta \cos\phi \tilde{M}_x - \cos\theta \sin\phi \tilde{M}_y + \sin\theta \tilde{M}_z \right],\end{aligned}\tag{2-21}$$

$$\begin{aligned}\bar{H}_\theta = & -\frac{E_\phi}{\eta} = jk \left( \frac{e^{-jkr}}{4\pi r} \right) \left[ -\sin\phi \tilde{J}_x + \cos\phi \tilde{J}_y \right] \\ & - j \frac{k}{\eta} \left( \frac{e^{-jkr}}{4\pi r} \right) \left[ \cos\theta \cos\phi \tilde{M}_x + \cos\theta \sin\phi \tilde{M}_y + \sin\theta \tilde{M}_z \right],\end{aligned}\tag{2-22}$$

$$\begin{aligned}\bar{H}_\phi = \frac{E_\theta}{\eta} &= jk \left( \frac{e^{-jkr}}{4\pi r} \right) \left[ -\cos\theta \cos\phi \tilde{J}_x - \cos\theta \sin\phi \tilde{J}_y + \sin\theta \tilde{J}_z \right] \\ &- j \frac{k}{\eta} \left( \frac{e^{-jkr}}{4\pi r} \right) \left[ -\sin\phi \tilde{M}_x + \cos\phi \tilde{M}_y \right]\end{aligned}\quad (2-23)$$

其中， $\bar{E}_\theta$ 、 $\bar{E}_\phi$ 、 $\bar{H}_\theta$ 、 $\bar{H}_\phi$  分別為電場與磁場的遠場分量， $r$  是指從原點到遠場的距離， $\eta = \sqrt{\mu/\epsilon}$ ， $\tilde{J}_s$  與  $\tilde{M}_s$  的定義如下：

$$\tilde{J}_s = \iiint_S \bar{J}_s \exp[j(k_x x' + k_y y' + k_z z')] dx' dy' dz', \quad (2-24)$$

$$\tilde{M}_s = \iiint_S \bar{M}_s \exp[j(k_x x' + k_y y' + k_z z')] dx' dy' dz'. \quad (2-25)$$

其中， $k_x = k \sin\theta \cos\phi$ ， $k_y = k \sin\theta \sin\phi$ ， $k_z = k \cos\theta$ ， $k = 2\pi/\lambda = \omega/c$ ， $\tilde{J}_s = (\tilde{J}_x, \tilde{J}_y, \tilde{J}_z)$ ， $\tilde{M}_s = (\tilde{M}_x, \tilde{M}_y, \tilde{M}_z)$ 。最後再利用  $\bar{E}_\theta$ 、 $\bar{E}_\phi$ 、 $\bar{H}_\theta$ 、 $\bar{H}_\phi$  這四個電磁場分量，求出遠場散射場的強度分布，其關係式如下：

$$F_s(\theta, \phi) = \text{Re}[\bar{E} \times \bar{H}^*] = \text{Re}[\bar{E}_\theta \bar{H}_\phi^* - \bar{E}_\phi \bar{H}_\theta^*], \quad (2-26)$$

其中， $*$  為取共軛。由 Eq.2-26 便可以知道遠場任一位置的散射場強度。

### 三、程式驗證與分析

#### 3-1、Comparisons with Mie Theory

FDTD的程式碼是利用C/C++來實現的，並藉由計算均質圓球的遠場散射圖形與Mie Theory的結果相比較來驗證程式碼。入射波為TM mode的高斯脈衝平面波，且考慮在真空中波長 $\lambda=600\sim 1000$  nm的範圍，波長增加量為10 nm，載波的頻率 $f_{\max} = c/\lambda_{\min}$  ( $\lambda_{\min}=600$  nm)，脈寬 $w = 40 * \Delta t$ ，中心峰值的延遲時間 $t_0 = 4 * w$ ，介質折射率為1.0。考慮均質圓球的折射率為1.02，且直徑有1 $\mu\text{m}$ 、2 $\mu\text{m}$ 、3 $\mu\text{m}$ ，圖3-1為其結構示意圖。 $\delta = \lambda_{\min}/30 = 20\text{nm}$ ，而 $\Delta t = \delta/2c$ ，共跑1000個時間步階。PML為10-cell，且PML參數 $R(0) = 10^{-6}$ ， $g=2.0$ 。在此只列出波長 $\lambda=600$ 、750、900與1000nm，每個波長的結果都先正規化，然後再取對數，圖3-2、3-3與3-4分別為直徑1 $\mu\text{m}$ 、2 $\mu\text{m}$ 與3 $\mu\text{m}$ 的結果。

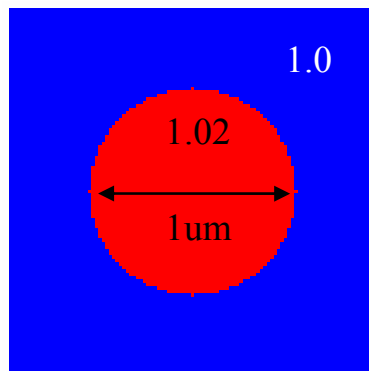
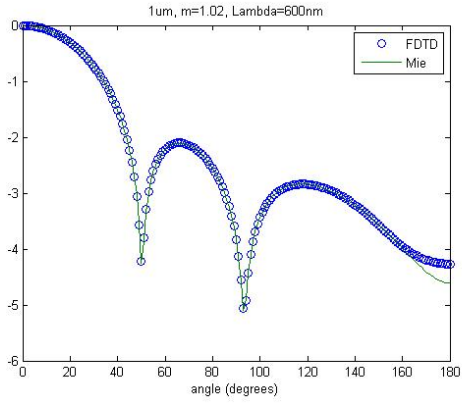
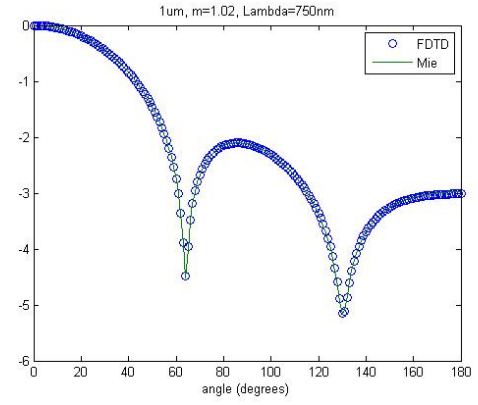


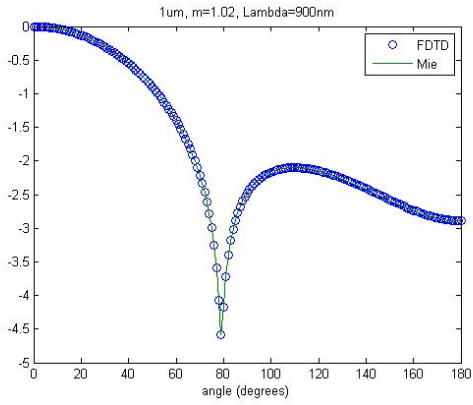
圖3-1 圓球結構示意圖。



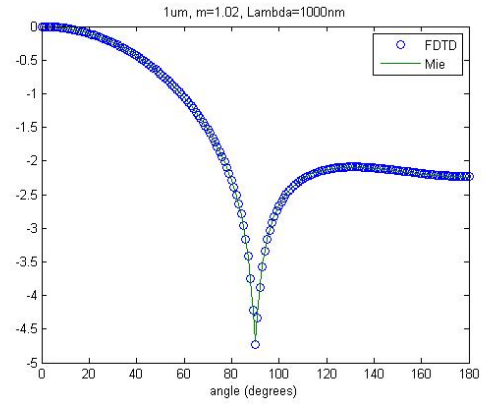
(a)



(b)



(c)

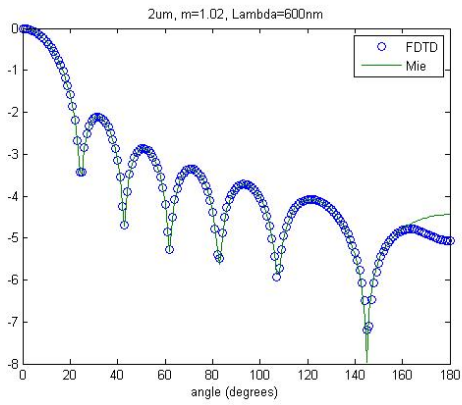


(d)

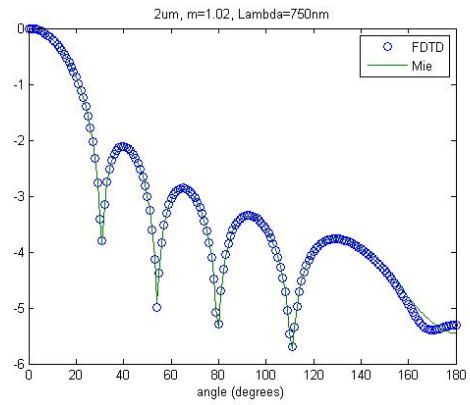
圖3-2 寬頻入射波經過直徑 $1\mu\text{m}$ 的圓球，其特定波長散射場的正規化

取對數結果與Mie theory比較 (a)  $\lambda=600\text{nm}$ 、(b)  $\lambda=750\text{nm}$ 、

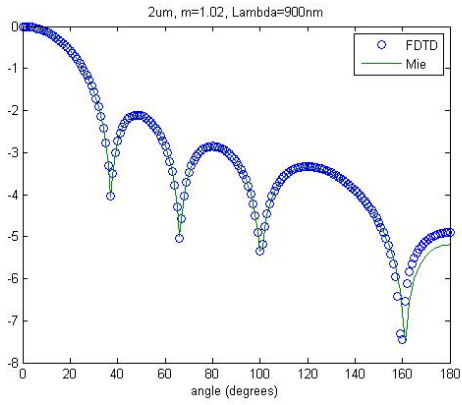
(c)  $\lambda=900\text{nm}$ 、(d)  $\lambda=1000\text{nm}$ 。



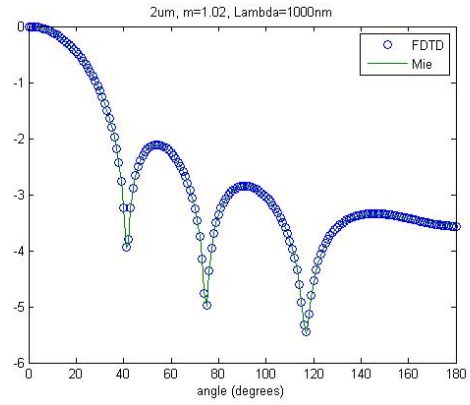
(a)



(b)



(c)

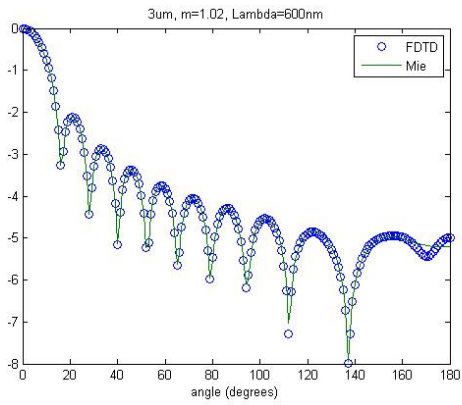


(d)

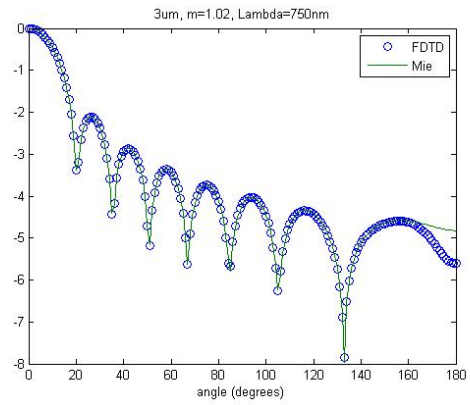
圖3-3 寬頻入射波經過直徑 $2\mu\text{m}$ 的圓球，其特定波長散射場的正規化

取對數結果與Mie theory比較 (a)  $\lambda=600\text{nm}$ 、(b)  $\lambda=750\text{nm}$ 、

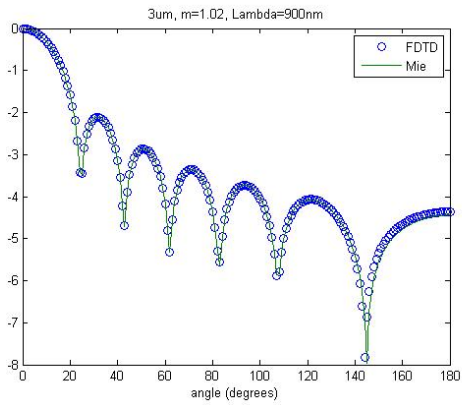
(c)  $\lambda=900\text{nm}$ 、(d)  $\lambda=1000\text{nm}$ 。



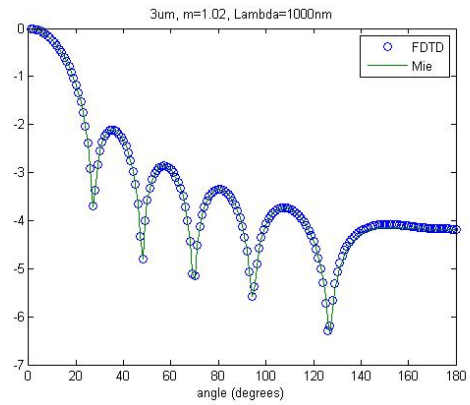
(a)



(b)



(c)



(d)

圖3-4 寬頻入射波經過直徑 $3\mu\text{m}$ 的圓球，其特定波長散射場的正規化

取對數結果與Mie theory比較 (a)  $\lambda=600\text{nm}$ 、(b)  $\lambda=750\text{nm}$ 、

(c)  $\lambda=900\text{nm}$ 、(d)  $\lambda=1000\text{nm}$ 。

結果幾乎都與Mie Theory吻合，只有在某些情況下，遠場大角度 ( $>165^\circ$ ) 的地方沒有與Mie Theory吻合。原因在於將連續積分以離散的方式處理所造成的，第一個連續積分在電磁場對時間做傅氏轉換，第二個連續積分為近場對遠場的轉換，由於近場大角度的強度對遠場大角度的強度影響最多，因此，假如近場小角度強度的誤差位階與近場大角度強度的準確位階相近的話(近場小角度的強度遠大於近場大角度的強度)，遠場大角度強度的誤差就會越大，這也就是遠場大角度的地方沒有與Mie Theory吻合的原因，增加空間取樣率可以改善這個問題，但對硬體的需求相對也提高很多。而波長越長的散射場在大角度的地方與Mie Theory越吻合，其原因在於每個維度的最小分割單位  $\delta = \lambda_{\min} / N$ ，是由最短波長所決定的，也就是說  $\lambda_{\min}$  被切成N等分，相對的長波長被切割的數目就大於N，等同於取樣率上升，所以長波長比短波長更吻合Mie Theory的結果。隨著球體的直徑越大，在大角度的地方，其準確度越低，原因在於近場對遠場轉換的積分點變多，而每個積分點都要先做傅氏轉換，如同前面所提，以離散的方法來處理連續積分一定會有誤差產生，所以近場對遠場轉換的積分點越多，對遠場大角度的影響也越大。



### 3-2、BroadBand Result

將3-1節的模擬結果，以二維圖示表示如圖3-5，其中橫軸為角度，縱軸為波長，顏色代表對數強度。

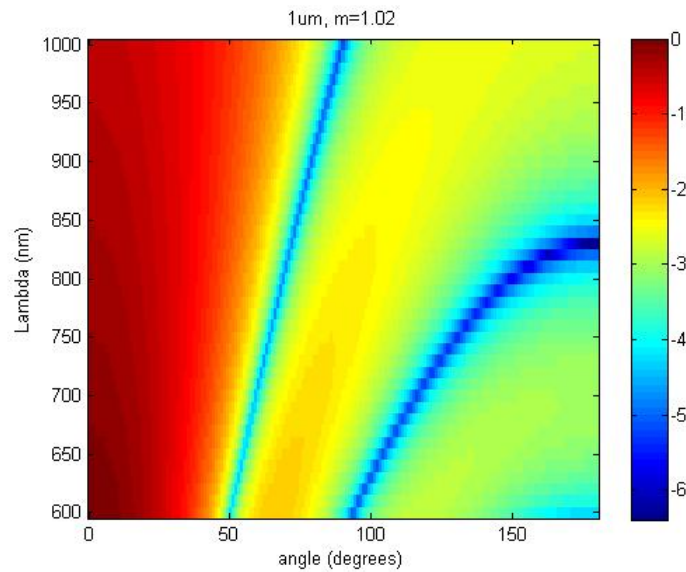


圖3-5(a) 寬頻入射光經過直徑 $1\mu\text{m}$ 圓球所得到的寬頻散射光譜圖。

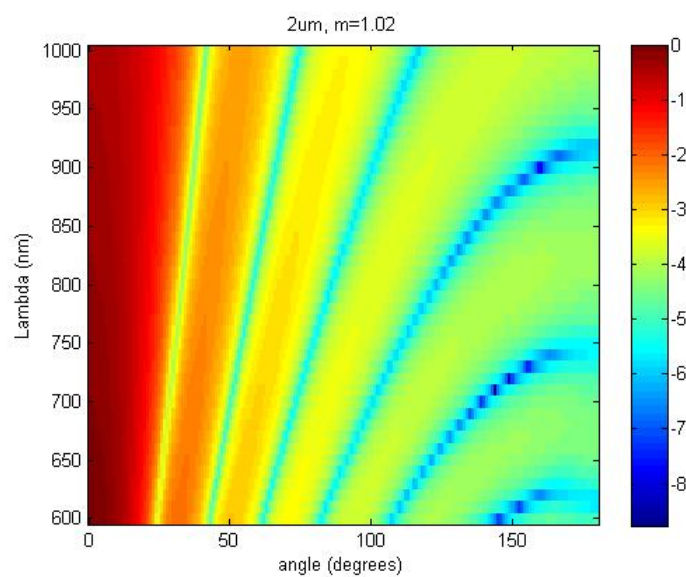


圖3-5(b) 寬頻入射光經過直徑 $2\mu\text{m}$ 圓球所得到的寬頻散射光譜圖。

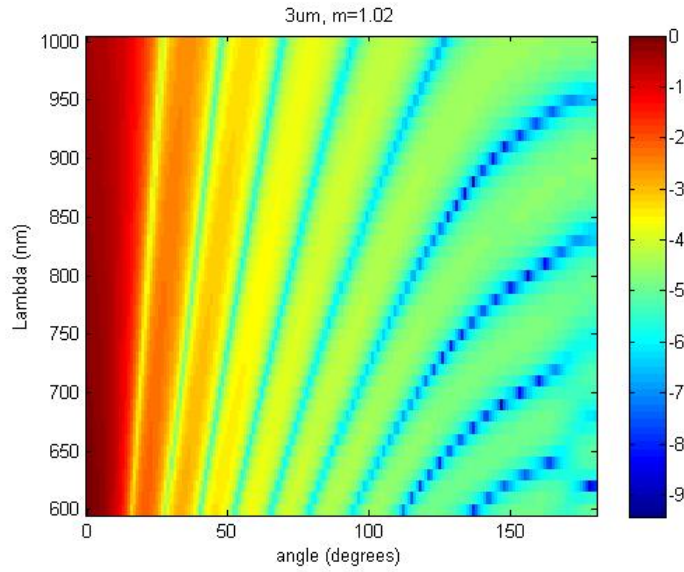


圖3-5(c) 寬頻入射光經過直徑 $3\mu\text{m}$ 圓球所得到的寬頻散射光譜圖。

在短波長與大角度的地方誤差較大，有不連續的現象，且隨著球體的直徑越大，不連續的範圍也越大，其原因3-1節已敘述。在上述條件下，三個不同直徑的圓球所消耗的時間與記憶體使用量，如表3-1所示。

直徑	消耗時間(hr)	記憶體使用量(MB)
1um	1.314722	113
2um	3.964167	347
3um	8.566111	718

表3-1 在入射光波長 $600\sim 1000\text{nm}$ ，介質折射率 $1.0$ ，物體折射率 $1.02$ 的條件下，三個不同直徑的圓球所消耗的時間與記憶體使用量。

### 3-3、Analysis of different grid spacing

連續信號以離散的方式來處理就一定會有誤差產生，其誤差大小跟取樣率有關。在此分析，空間取樣率 $N$ 對於模擬結果的影響，以及所消耗的時間與記憶體用量。在入射光波長 $\lambda=1000\text{nm}$ ，介質折射率1.0，以及直徑 $1\mu\text{m}$ 折射率1.02的圓球的條件下，將不同的空間取樣率 $N$ ，分別為10、20、30與40（格點間距 $\delta$ 分別為 $100\text{nm}$ 、 $50\text{nm}$ 、 $33.33\text{nm}$ 與 $25\text{nm}$ ）的模擬結果與Mie Theory比較。圖3-6為不同空間取樣率與Mie Theory的計算結果，可以看出隨著空間取樣率 $N$ 越大，與Mie Theory就越吻合。圖3-7為不同空間取樣率 $N$ 的模擬結果對Mie Theory的RMS error（絕對誤差）。圖3-8與3-9分別為在不同空間取樣率 $N$ 的模擬條件下，所消耗的時間與記憶體的使用量。

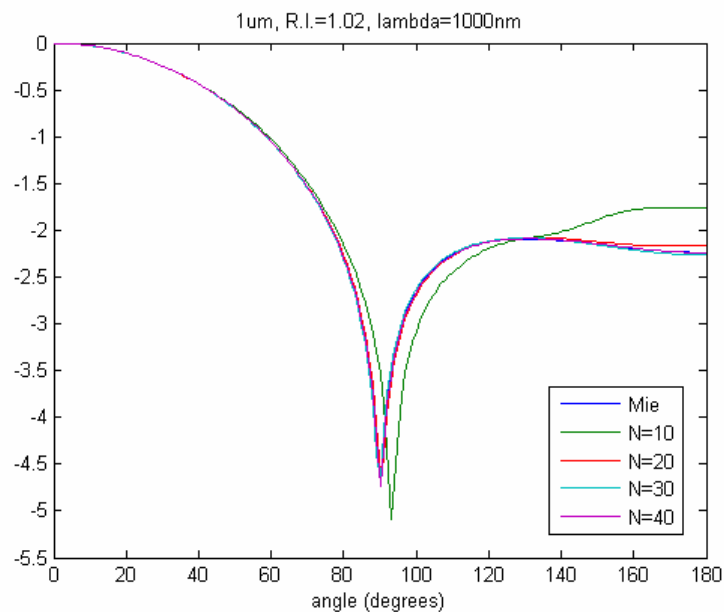


圖3-6 不同空間取樣率與Mie Theory的計算結果。

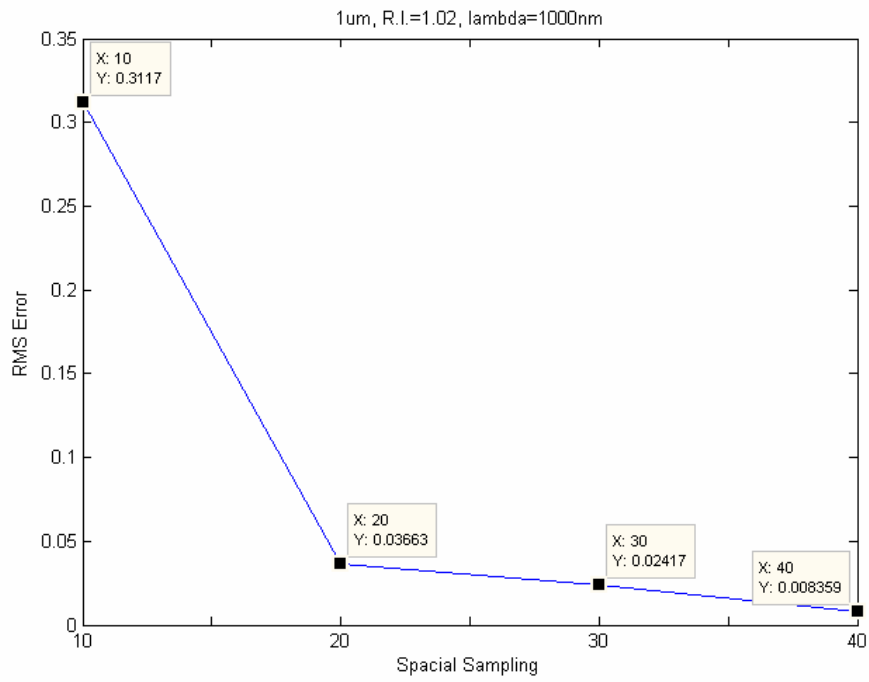


圖3-7 不同空間取樣率與Mie Theory結果的RMS error。

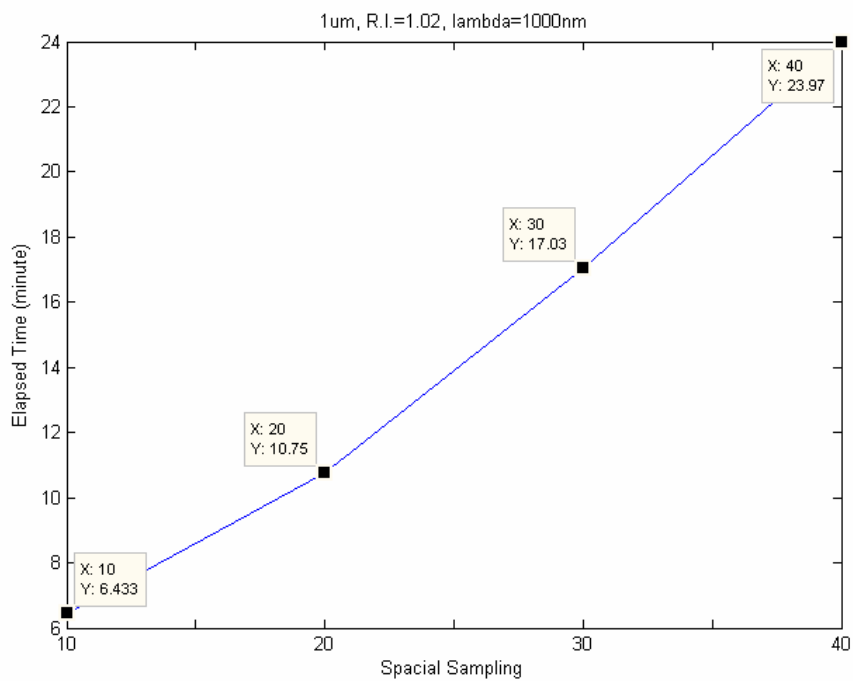


圖3-8 不同空間取樣率所消耗的計算時間。

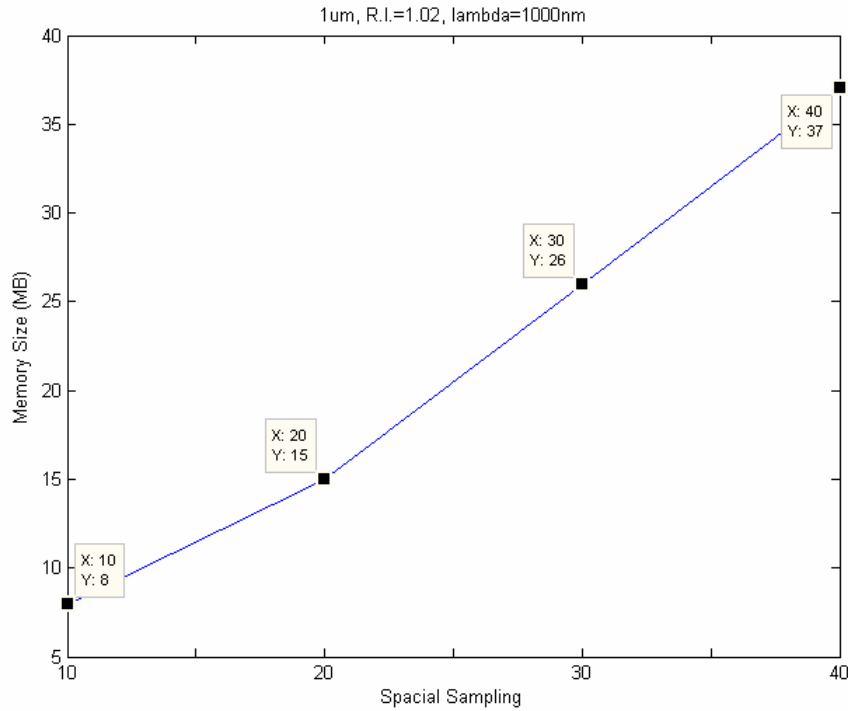


圖3-9 不同空間取樣率所佔用的記憶體大小。

空間取樣率N	$\Delta$ RMS error	消耗時間(分)	記憶體使用量(MB)
10	0	6.433	8
20	-0.27507	10.75	15
30	-0.28753	17.03	26
40	-0.303341	23.97	37

表3-2 列出空間取樣率N=10、20、30、40的 $\Delta$ RMS error（與空間取樣率N=10的差）、消耗時間以及記憶體使用量的結果。

表3-2列出空間取樣率N=10、20、30、40的 $\Delta$ RMS error（與空間取樣率N=10的差）、消耗時間以及記憶體使用量的結果。當取樣率N=20時，誤差就有大幅度的改善，雖然N=40誤差下降的最多，但所

消耗的時間與記憶體的使用量卻是最多，為空間取樣率 $N=20$ 的四倍多，然而誤差的改善 $N=40$ 只比 $N=20$ 多了0.028271，幅度並不大。由圖3-6可以發現大角度的地方誤差最明顯，因此，若所需的散射光譜是在小角度的範圍，或是對於準確度的要求沒那麼高的話，空間取樣率 $N=20$ 就已足夠了。其它波長的RMS error（與Mie theory比較）、消耗時間與記憶體使用量，對空間取樣率 $N$ 作圖的圖形趨勢與波長 $\lambda=1000\text{nm}$ 相同，因此，在此只列出波長 $\lambda=1000\text{nm}$ 作為代表。



## 四、微米圓球的散射光譜

### 4-1、簡介與實驗方法

聚苯乙烯微米圓球 (Polystyrene Microsphere) 是一種均質的圓球，所以常被用來檢測光學散射光譜系統是否正確，其方法是將測量到的微米圓球之逆散射光譜，與計算出來的理論結果比較，看測量結果是否與理論結果的趨勢相符。本實驗採用Polysciences公司所生產的POLYBEAD POLYSTYRENE 3.0 MICRON MICROSPHERES( Cat#: 17134)，實驗架構如圖4-1所示，圖4-1的左邊為顯微鏡側面的剖面圖，而右邊為顯微鏡正面的剖面圖。顯微鏡(OLYMPUS, BX41 System Microscope)的實驗架構為反射式架構，目的是為了測量逆散射光譜，上面的CCD (Qimaging, MicroPublisher 3.3 RTV - non cooled)是用來擷取待測樣本的影像，光源為白光光源 (Newport, Oriel Apex Tunable Light Sources, 100w Xenon)，經過物鏡入射到樣本，如圖4-1的左邊。而樣本的逆散射光也是經由物鏡(OLYMPUS, UMPlanFl, 20x / 0.50 w)接收，傳送到光譜儀 (Acton, SpectraPro SP-2150i)，並利用EMCCD (ANDOR, Newton EM) 擷取資料，如圖4-1的右邊。對於微米圓球的處理，如圖4-2所示，先將PDMS挖出數個井，然後貼在玻片上，井裡的内容物分為上、下兩層，下層為純凝膠 (重量百分比為

0.5% g/ml)，上層為凝膠與微米圓球（水：凝膠粉：微米圓球 = 10ml：0.05g：5 $\mu$ l），凝膠的折射率為1.3313與水相近（水的折射率為1.33）。若微米圓球在水中為浮動的，測量時間就要儘可能的縮短，由於所使用的光源並非雷射光，瞬間能量並不高，因此，瞬間所擷取到的信號非常微弱（訊雜比較低）。然而，若將微米圓球固定在水中，就可以增加測量時間，進而提高信號強度（提高訊雜比）。

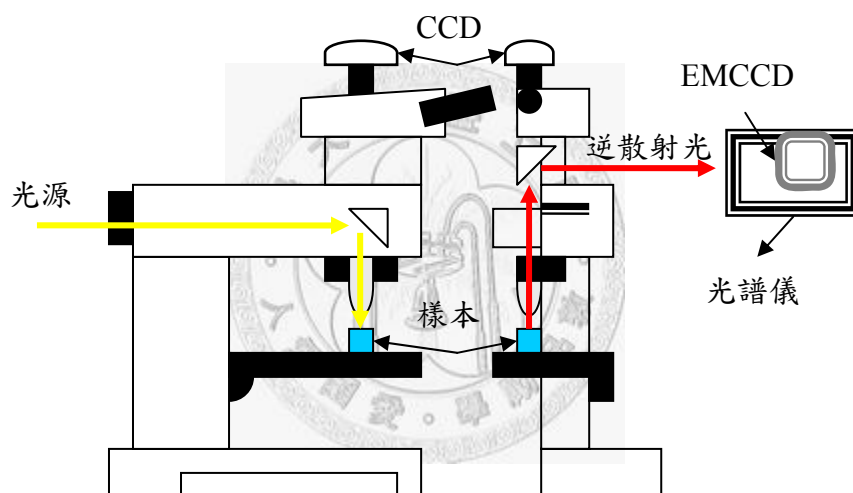


圖4-1 測量逆散射光譜的實驗架構，左邊為顯微鏡側面的剖面圖，右邊為顯微鏡正面的剖面圖。

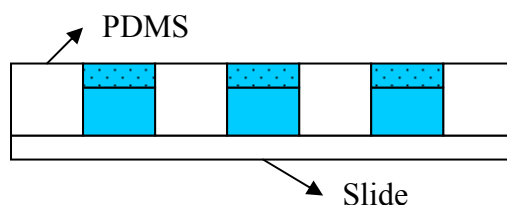


圖4-2 微米圓球的處理結果。



## 4-2、實驗結果

圖4-3為CCD所擷取到的影像，黃色框內的微米圓球為待測物，圖4-4為圖4-3黃色框內的逆散射光譜圖，其中白色亮線即為微米圓球的逆散射光譜（此光譜包含背景雜訊），橫軸對應的是波長，圖4-5為將圖4-4所測得的光譜訊號，經過Eq.4-1的處理之後的結果，在此取波長 $\lambda=400\text{nm}\sim 800\text{nm}$ 的範圍作圖。上述實驗結果，是在CCD與EMCCD的曝光時間分別為100ms與2s，光譜儀中心波長600nm（300groove/mm）的條件下所測得。

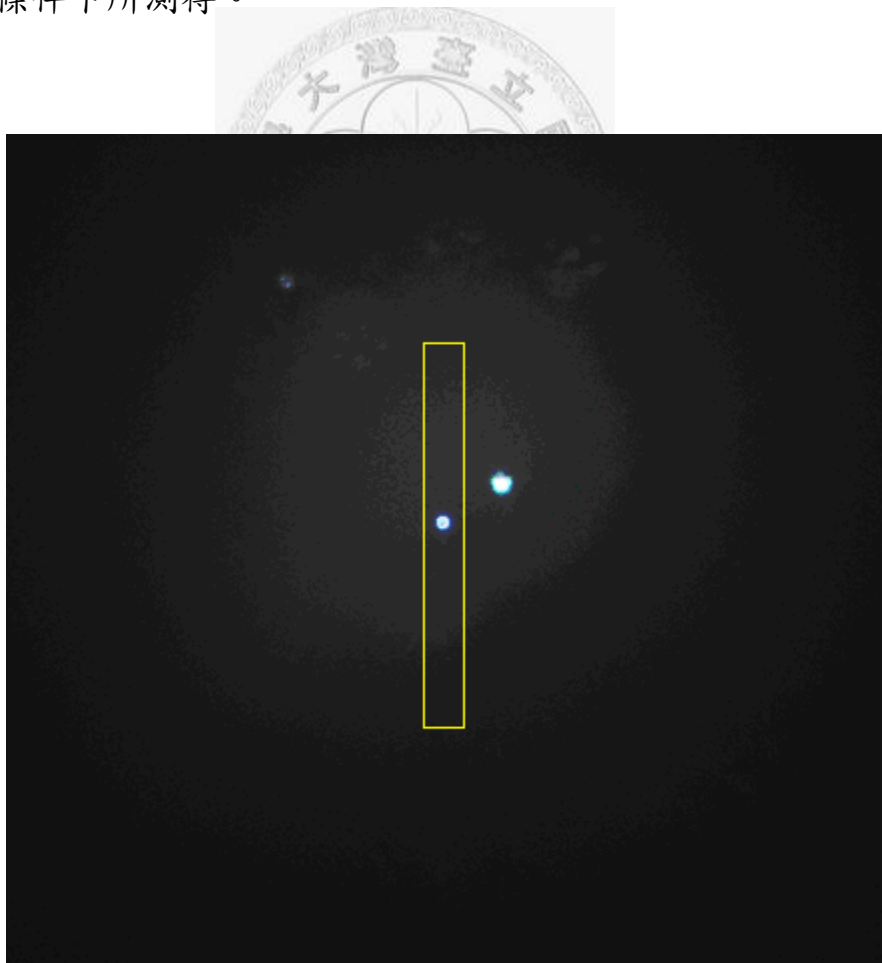


圖4-3 CCD所擷取到的影像，黃色框內的微米圓球為待測物。

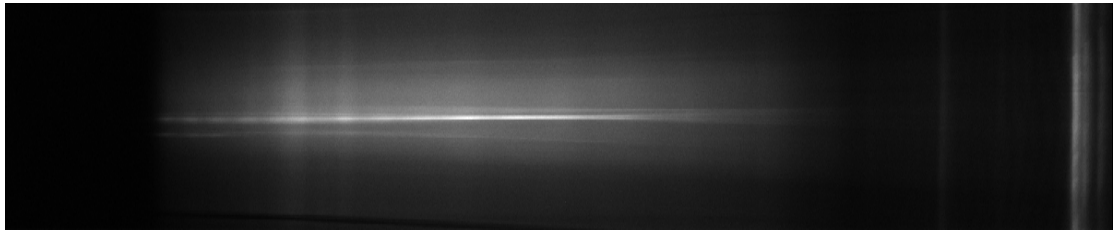


圖4-4 為圖4-3黃色框內的逆散射光譜圖，其中白色亮線即為微米圓球的逆散射光譜（此光譜包含背景雜訊），橫軸對應的是波長。

$$\text{逆散射光譜} = (\text{測量訊號} - \text{背景雜訊}) / \text{光源強度} \quad (4-1)$$

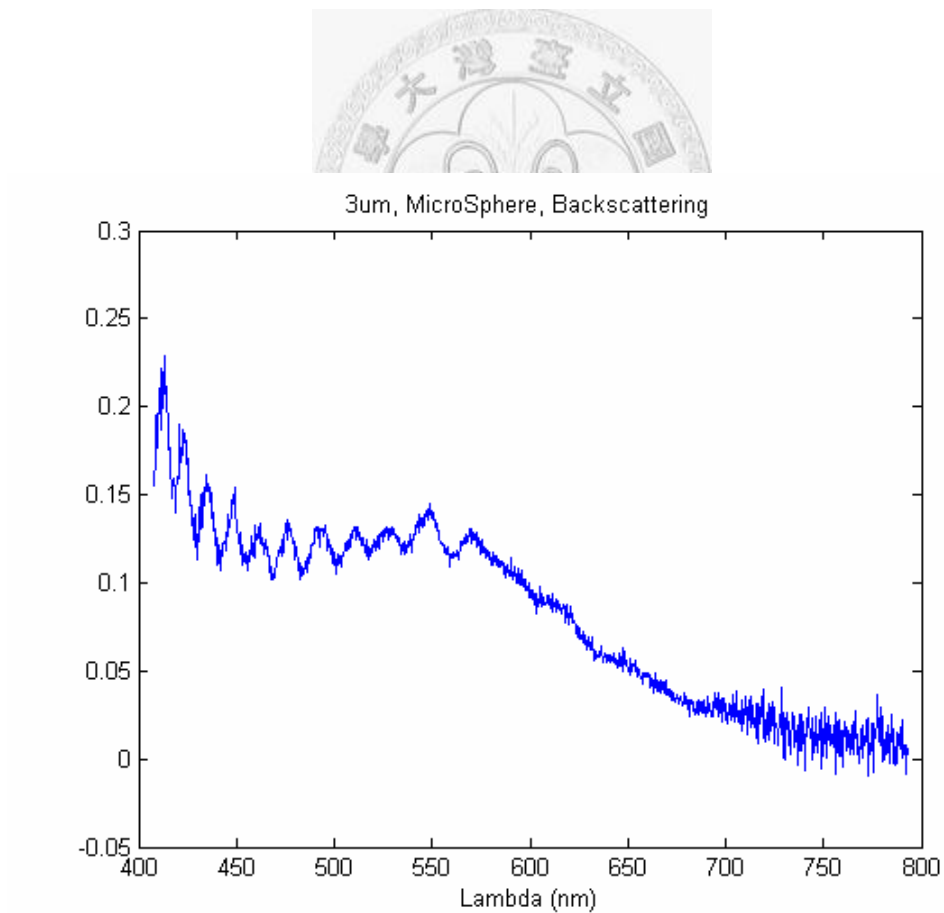


圖4-5 微米圓球的逆散射光譜對波長的作圖。

### 4-3、與模擬結果比較

由於Polystyrene Microsphere的折射率會隨入射光波長改變[13]，且Polystyrene Microsphere為均質圓球，因此，利用Mie theory來計算Polystyrene Microsphere的逆散射光譜。Polystyrene Microsphere折射率與波長的關係如下[13]：

$$n(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4} \quad (4-2)$$

其中， $A=1.5725$ ， $B=0.0031080 \mu m^2$ ， $C=0.00034779 \mu m^4$  [13]，介質折射率1.3313，入射光波長 $\lambda=410nm \sim 510nm$ ，波長增加量 $\Delta\lambda=0.5nm$ ，Polystyrene Microsphere直徑 $3\mu m$ （製造商所提供的大小），利用上述參數模擬Polystyrene Microsphere的逆散射光譜，將每個波長 $158^\circ \sim 180^\circ$ （物鏡收集光的最大範圍約 $22^\circ$ ）的散射場各自加起來，就是逆散射光譜的模擬結果。圖4-6為入射光波長 $\lambda=410nm \sim 510nm$ ，微米圓球逆散射光譜正規化後的實驗結果與模擬結果。

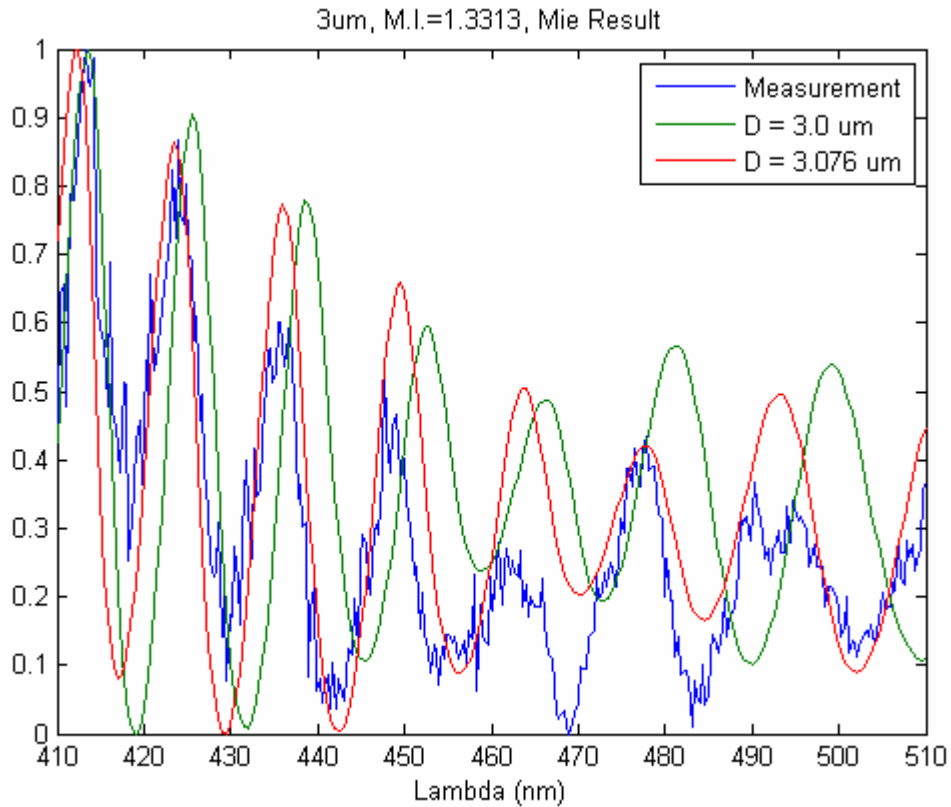


圖4-6 入射光波長 $\lambda=410\text{nm}\sim 510\text{nm}$ ，微米圓球逆散射光譜正規化後的實驗結果與模擬結果。

其中，藍線是實驗結果，綠線是以直徑 $3\mu\text{m}$ （製造商所提供的大小）的模擬結果，雖然藍線與綠線並沒有吻合，但趨勢一樣。而紅線是以直徑 $3.076\mu\text{m}$ 所模擬出來的結果，可以看出紅線與藍線比較吻合。主要原因在於，製造出來的商品通常都會有誤差，此誤差約2.53%，是在合理的範圍。此結果可以證明，我們的光學散射光譜系統，所量測的結果是可信的。

## 五、細胞核散射光譜

圖5-1為細胞核結構示意圖，紅色部分為細胞質，中間為橢圓細胞核，並考慮核染色質叢聚現象。在入射光波長 $\lambda=600\text{nm}\sim 1000\text{nm}$ ，波長增加量 $\Delta\lambda=10\text{nm}$ ，細胞質折射率1.37的條件下，模擬不同情況的細胞核之順向（ $0^\circ\sim 22^\circ$ ）與逆向（ $158^\circ\sim 180^\circ$ ）散射光譜，表5-1為細胞核的模擬條件[2,14]（入射光與PML吸收邊界條件等模擬參數與第三章相同）。

	X軸 ( $\mu\text{m}$ )	Y軸 ( $\mu\text{m}$ )	Z軸 ( $\mu\text{m}$ )	折射率	核染色質叢聚大小 ( $\mu\text{m}$ )
Case a	4	3.5	3	$1.4\pm 0.007$	1
Case b	4	3.5	3	$1.4\pm 0.007$	0.5
Case c	4	3.5	3	$1.4\pm 0.007$	0.2
Case d	4	3.5	3	$1.4\pm 0.014$	0.5
Case e	4	3.5	3	$1.4\pm 0.007$	0.5
Case f	4	3.5	3	$1.4\pm 0.0028$	0.5
Case g	6	3.5	2	$1.4\pm 0.007$	0.5

表5-1 細胞核的模擬條件。

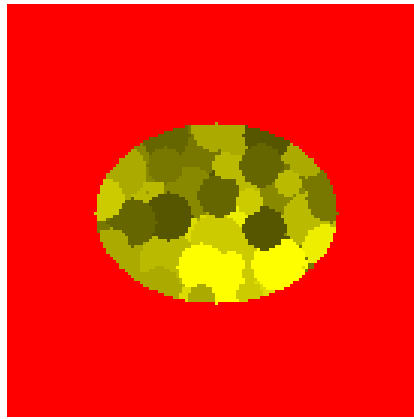


圖5-1 細胞核結構示意圖。

圖5-2為Case b各波長散射場的模擬結果，在角度大於 $90^\circ$ 的地方，與均質圓球的模擬結果比起來，散射場的分布較不規則。

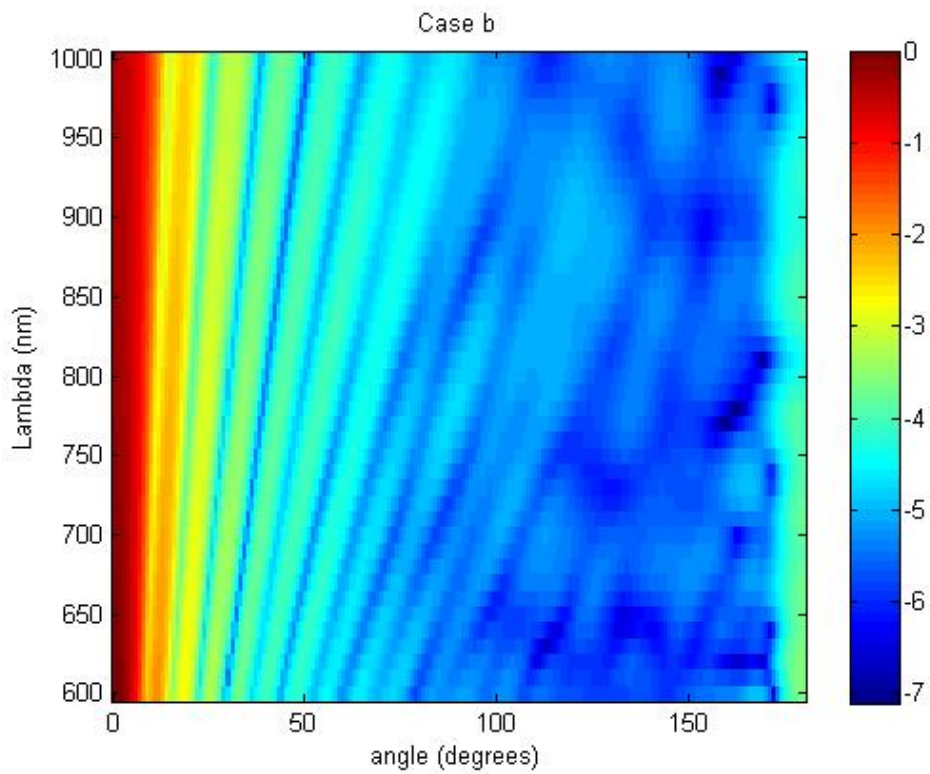
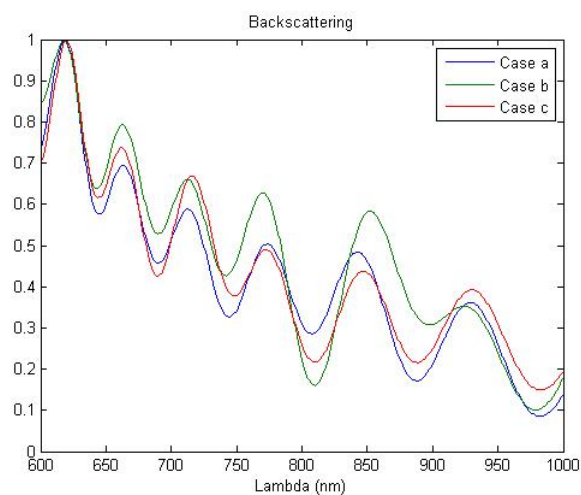
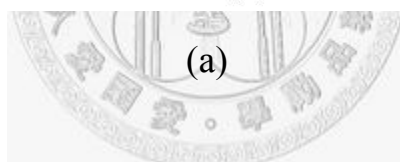
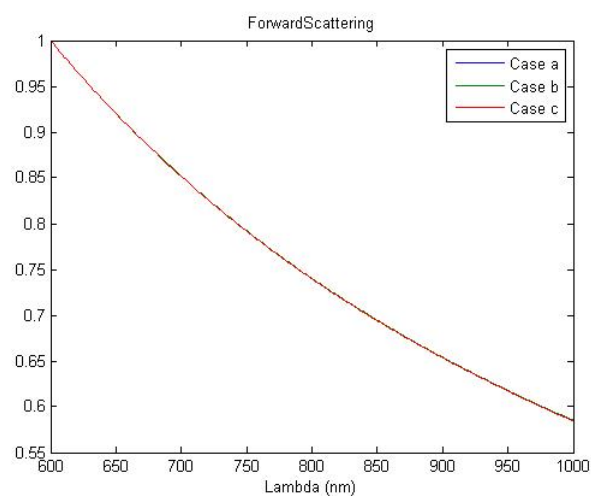


圖5-2 Case b各波長散射場的模擬結果。

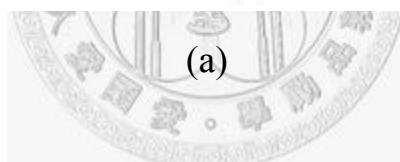
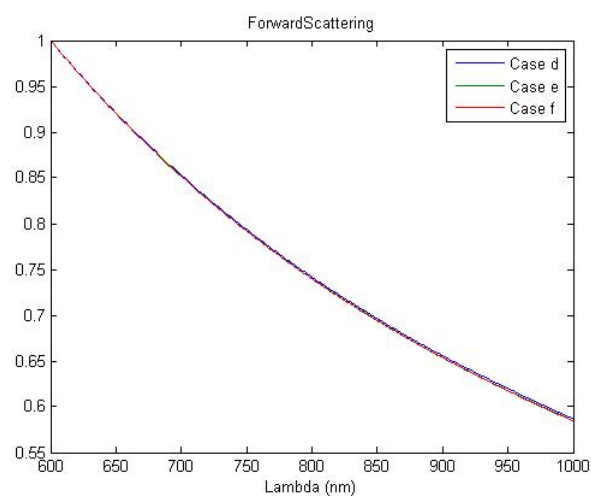
Case a~c主要是考慮不同叢聚大小的核染色質，對於散射光譜的影響，圖5-3為Case a~c順向與逆向散射光譜的模擬結果。可以看出對於順向散射光譜並沒有影響，而逆向散射光譜，雖然沒有吻合，但趨勢是相同的。



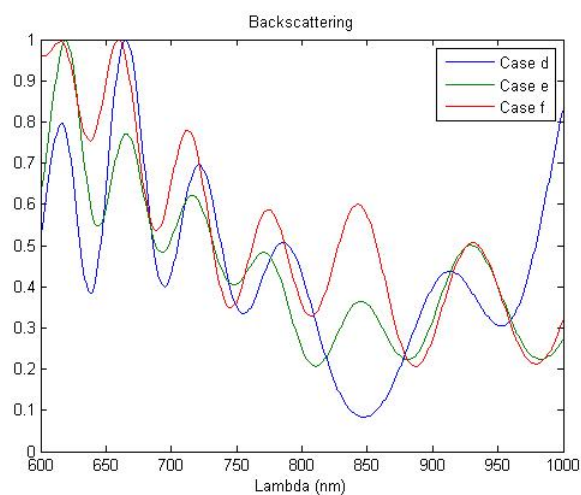
(b)

圖5-3 Case a~c的模擬結果，(a)順向散射光譜，(b) 逆向散射光譜。

Case d~f主要是考慮細胞核折射率的變化量，對於散射光譜的影響，圖5-4為Case d~f順向與逆向散射光譜的模擬結果。對於順向散射光譜並沒有明顯的影響，而逆散射光譜的趨勢，會隨著折射率的變化量越大，光譜間的差異也越大。



(a)

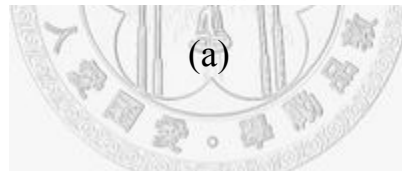
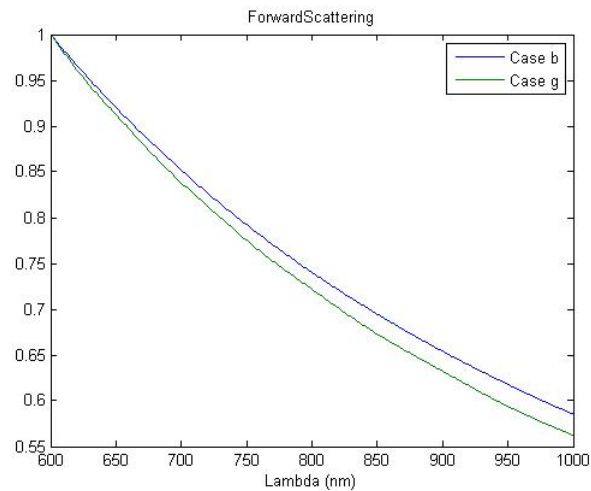


(b)

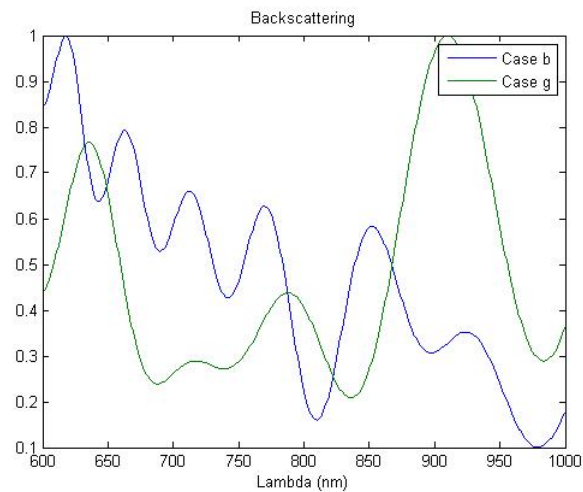
圖5-4 Case d~f的模擬結果，(a)順向散射光譜，(b) 逆向散射光譜。



Case b與g是考慮細胞核大小，對於散射光譜的影響，圖5-5為Case b與g順向與逆向散射光譜的模擬結果。可以看出順向散射光譜的差異並不大，而逆散射光譜的差異卻非常明顯。



(a)



(b)

圖5-5 Case b與g的模擬結果，(a)順向散射光譜，(b) 逆向散射光譜。

## 六、討論

想要利用FDTD來模擬任一物體的散射光譜，就必須要先知道物體的形狀大小與折射率在空間中的分布，以及介質折射率的大小。物體的形狀大小可以用函數表示，或是經由影像處理得到物體在空間中的分布，而物體與介質的折射率可經由實際測量取得，或是參考文獻上的數據。假若想要利用模擬來驗證實驗結果時，上述模擬參數的正確性就相當重要。對於驗證細胞散射光譜的實驗結果而言，最大的問題在於取得所測量細胞的形狀大小與折射率在空間中的分布，如果無法取得正確的模擬參數，可以確定的是，模擬出來的結果較不會與實驗結果吻合，但趨勢也許會一樣，這是在研究細胞結構與逆散射光譜之間的關聯性時，最大的問題。

對於光源的部分，加入弦波作為載波的目的，是為了讓脈衝波在頻率域的中心峰值，移動到所感興趣的頻率位置，以使其振幅較大。圖6-1為有加弦波與沒加弦波的結果，可以看出沒加弦波的模擬結果與Mie theory的結果完全不吻合。主要原因在於，未加弦波的高斯脈衝波，其頻率域的中心峰值是在零赫茲的地方，而模擬的頻率是在 $f=300\text{THz}$  ( $\lambda=1000\text{nm}$ )，在 $w=80*\Delta t$ ， $t_0=4*w$ ， $E_0=1$ 的條件下，頻率 $f=300\text{THz}$ 的正規化（除以脈衝波頻率域最大值）電場強度為

$5.172 \times 10^{-5}$ ，相對的近場散射場在頻率  $f = 300\text{THz}$  的地方，其正規化（除以脈衝波頻率域最大值）電場強度的指數位階就會小於  $10^{-5}$ 。以 C/C++ 單精點浮點運算而言，數值的準確度只到小數點後第六位，也就是之後的值都不保證是正確的。因此，當近場散射場之間的電場強度相差有  $10^6$  時，近場對遠場轉換的運算結果也就不能採信了，這也是為什麼要加入弦波作為載波的原因。

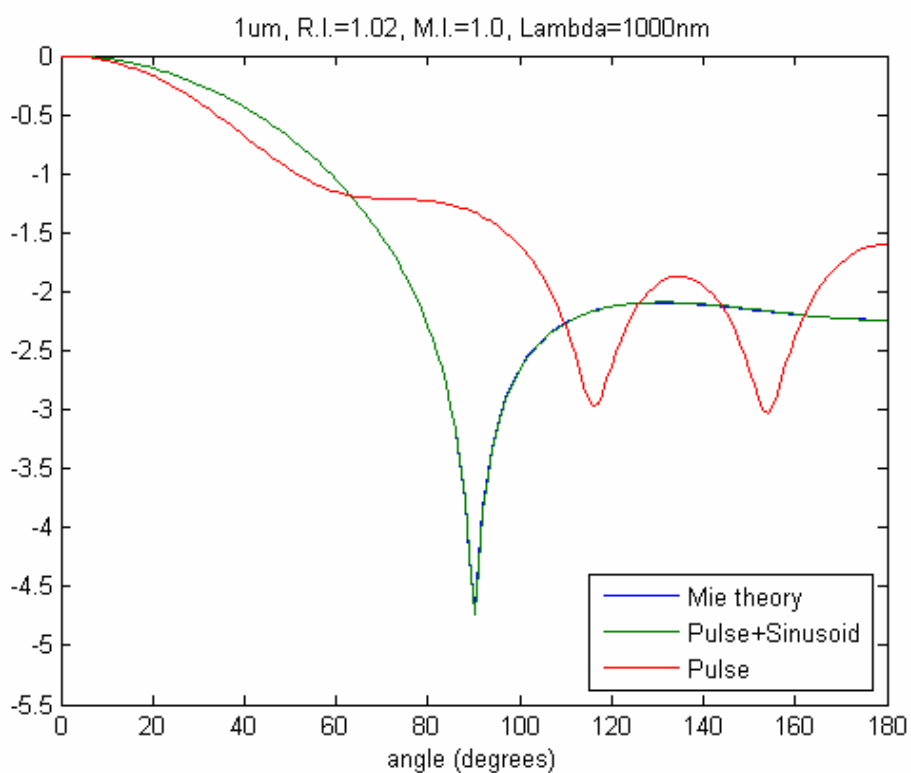


圖6-1 有加弦波與沒加弦波的結果。

對於近場對遠場轉換的誤差問題，近來已有人提出一些解決方法。Xu Li等人所提出的方法[15]，是針對遠場逆散射場的部分，其方法是當近場順向散射場的強度很強（相較於近場逆散射場）時，在計算遠場逆散射場時，忽略近場順向散射場，目的是為了避免近場順向散射場的誤差位階，影響到近場逆散射場的準確位階。實際使用過這方法之後，發現只有在180度的地方有些微的改善，但在其它大角度的範圍（ $> 160^\circ$ ），反而使誤差變大。在Xu Li的文章裡，只是說明這方法的概念與得到的結果，並未詳細提到試用的角度範圍與實際作法。以目前我所希望得到的數據而言（全角度寬波長範圍的數據），此方法不太適用。

Kuniyuki Motojima與Shogo Kozaki所提出的方法[16]，是將近場對遠場轉換的Green's function，改由Helmholtz equation取代，Helmholtz equation是利用漸近線延伸的方式，而非積分轉換的方式，得到遠場散射場的分布，目的也是為了避免離散積分所造成的誤差。上述方法是在球座標系下，而我採用的是卡氏座標系，因此目前無法實際使用這個方法。我覺得這個方法，對於近場對遠場轉換的誤差改進是可行的，由於使用的是球座標，因此，在散射物體的描述上，沒有比卡氏座標來的直覺，或許還需要利用座標轉換來描述散射物。

表6-1顯示利用單波長或寬波長入射光模擬時，所消耗的時間與記憶體的使用量，雖然單波長入射光在模擬時所消耗的時間與記憶體的使用量，比寬波長少很多，但寬波長入射光在一次模擬時，就能得到41個波長的散射場，假如單波長入射光也要得到同樣41個波長的散射場，其所花的時間至少要11.644小時，比寬波長入射光所花的時間還久，因此，在記憶體空間容許之下，利用寬波長入射光來模擬物體寬波長範圍的散射光，反而較省時間。

直徑	空間取樣率 N	波長(nm)	$\Delta\lambda$ (nm)	波長數目	消耗時間(hr)	記憶體使用量(MB)
1 $\mu$ m	30	1000	0	1	0.284	26
1 $\mu$ m	30	600~1000	10	41	1.315	113

表6-1 顯示利用單波長或寬波長入射光模擬時，所消耗的時間與記憶體的使用量。

由第五章的結果可以看出，細胞核的逆散射光譜確實會受到細胞核形狀大小與折射率變化的影響。對於判斷細胞是否癌化，只需要兩個參數，分別是細胞核的形狀大小與折射率平均值，然而在研究細胞核形狀大小以及折射率平均值與逆散射光譜之間的關係時，折射率的變化量會是一個很大的問題，圖6-2為Case b與e順向與逆向散射光譜

的模擬結果，Case b與e的模擬參數都一樣，但逆散射光譜的模擬結果卻不一樣，最主要的原因在於折射率的變化量是隨機分布的。這樣的結果，增加了找出細胞核形狀大小以及折射率平均值與逆散射光譜之間關係的難度。因此，想要實現利用逆散射光譜來檢查細胞是否癌化，就要先解決細胞核的折射率變化量的問題。

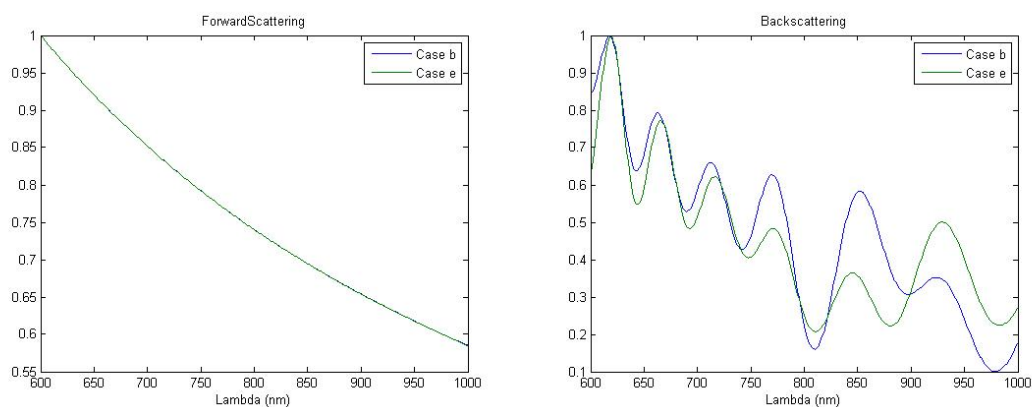


圖6-2 Case b與e順向與逆向散射光譜的模擬結果。

## 七、結論與未來工作

我已利用C/C++來建立三維的FDTD模擬程式，並加入高斯脈衝平面波作為光源，與完美匹配層作為邊界條件。均質圓球的模擬結果與Mie theory吻合。也已實現模擬寬波長範圍的細胞核散射光譜。細胞核的逆散射光譜確實會受到細胞核形狀大小與折射率變化的影響。

未來工作，首先我會先測量上皮細胞或細胞核逆散射光譜，並與模擬結果比較，觀察其趨勢是否相同，目的是為了解在實際測量上，細胞或細胞核逆散射光譜的趨勢與形狀。假如趨勢沒有相同，會試著從兩個方向著手，一是修正模擬時入射光的入射角，使其與實驗上入射角相同，二是利用tomographic phase microscopy[17]的技術以實驗測量細胞核大小與折射率的變化，作為模擬的參數。當模擬的結果與實驗的結果趨勢相同時，就可以進一步的探討細胞內各個結構與逆散射光譜之間的關聯性。

## 參考文獻

1. Tao T. Wu and Jianan Y. Qu, “*Assessment of the relative contribution of cellular components to the acetowhitening effect in cell cultures and suspensions using elastic light-scattering spectroscopy*”, APPLIED OPTICS 46 : 4834 2007
2. Rebekah Drezek, Andrew Dunn, and Rebekah Richards-Kortum, “*Light scattering from cells: finite-difference time-domain simulations and goniometric measurements*”, APPLIED OPTICS Vol. 38, No. 16 (1999).
3. Z. Ge, K. Schomacker, and N. Nishioka, “*Identification of colonic dysplasia and neoplasia by diffuse reflectance spectroscopy and pattern recognition techniques*”, Appl. Spectrosc. **52**, 833-839 (1998).
4. J. Mourant, T. Fuselier, J. Boyer, T. Johnson, and I. Bigio, “*Predictions and measurements of scattering and absorption over broad wavelength ranges in tissue phantoms*”, Appl. Opt. **36**, 949-957 (1997).
5. Judith R. Mourant, James P. Freyer, Andreas H. Hielscher, Angelia A. Eick, Dan Shen, and Tamara M. Johnson, “*Mechanisms of light scattering from biological cells relevant to noninvasive optical-tissue diagnostics*”, APPLIED OPTICS, Vol. 37, No. 16, 1998
6. J. R. Mourant, M. Canpolat, C. Brocker, O. Esponda-Ramos, T. M. Johnson, A. Matanock, K. Stetter, J. P. Freyer, “*Light scattering from cells: the contribution of the nucleus and the effects of proliferative*



- status*”, Journal of Biomedical Optics 5(2), 131–137 (2000)
7. L. Perelman, V. Backman, M. Wallace, G. Zonios, R. Manoharan, A. Nusrat, S. Shields, M. Seiler, C. Lima, T. Hamano, I. Itzkan, J. Van Dam, J. Crawford, and M. Feld, “*Observation of periodic fine structure in reflectance from biological tissue: a new technique for measuring nuclear size distribution*”, Opt. Lett. **80**, 627-630.
  8. V. Backman, R. Gurjar, K. Badizadegan, I. Itzkan, R. Dasari, L. Perelman, and M. Feld, “*Polarized light scattering spectroscopy for quantitative measurement of epithelial structures in situ*”, IEEE J. Sel. Topics Quantum Electron. **5**, (1999).
  9. R. Drezek, A. Dunn and R. Richards-Kortum, “*A Pulsed Finite-Difference Time-Domain (FDTD) Method for Calculating Light Scattering from Biological Cells Over Broad Wavelength Ranges*”, Optics Express 6, 147-157 (2000).
  10. K. YEE, “*Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell’s Equations in Isotropic Media*”, IEEE Transactions on Antennas and Propagation, vol. 14, issue 3, pp. 302-307 (1966).
  11. Taflove, A., “*Advances in Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*”, Artech House, 2005.
  12. J. Berenger, “*A Perfectly Matched Layer for the Absorption of Electromagnetic Waves*”, J. Computational Physics, Volume 114, Issue 2, October 1994, Pages 185-200
  13. Xiaoyan Ma<sup>1</sup>, Jun Q Lu<sup>1</sup>, R Scott Brock<sup>1</sup>, Kenneth M Jacobs<sup>1</sup>, Ping Yang<sup>2</sup> and Xin-Hua Hu<sup>1</sup>, “*Determination of complex refractive index of polystyrene microspheres from 370 to 1610 nm*”, Phys. Med.

Biol. 48 (2003) 4165–4172

14. Arifler D, Guillaud M, Carraro A, Malpica A, Follen M, Richards-Kortum R, “*Light scattering from normal and dysplastic cervical cells at different epithelial depths: finite-difference time-domain modeling with a perfectly matched layer boundary condition*”, Journal of Biomedical Optics 8(3), 484–494 (2003)
15. Xu Li, Allen Taflove, and Vadim Backman, “*Modified FDTD Near-to-Far-Field Transformation for Improved Backscattering Calculation of Strongly Forward-Scattering Objects*”, IEEE ANTENNAS AND WIRELESS PROPAGATION LETTERS, VOL. 4, 2005
16. Kuniyuki Motojima and Shogo Kozaki, “*A HYBRID TECHNIQUE COMBINING FDTD AND SERIES SOLUTION FOR NEAR-TO-FAR-FIELD TRANSFORMATION*”, International Journal of Infrared and Millimeter Waves, Vol. 23, No. 1, 2002
17. Wonshik Choi, Christopher Fang-Yen, Kamran Badizadegan, Seungeun Oh, Niyom Lue, Ramachandra R Dasari & Michael S Feld, “*Tomographic phase microscopy*”, Nature Methods, VOL.4, NO.9, 717 - 719 (2007)