arXiv:2302.04203v1 [physics.optics] 8 Feb 2023

高效后处理电磁平面波仿真，以模拟入射到轴对称结构上的任意结构化光束

J. J. Kingsley-Smith 与 F. J. Rodr´ıguez-Fortu˜no伦敦国王学院
物理系及伦敦纳米技术中心，英国伦敦 Strand，WC2R 2LS

电子邮箱：francisco.rodriguez fortuno@kcl.ac.uk

2023年2月

摘要。
光束与材料结构相互作用的研究是纳米光子学的基础。计算电磁求解器能够快速计算任意几何形状和复杂程度的材料结构所产生的散射，但在采用结构化激励场时效率有限。我们开发了一种后处理方法及软件包，可高效计算任意光束入射到至少具有一条连续旋转对称轴的粒子或结构上时的完整三维电场和磁场；这类物体称为轴对称体（例如球体、圆柱体、圆锥体、圆环面或表面）。只需预先完成一批平面波模拟，该开源软件包便可通过角谱表示，以后处理的方式整合计算电磁求解器的数据，从而生成任意结构化光束，包括矢量涡旋光束。所有可能的入射光束都可以由这批初始平面波模拟生成，无需进行额外模拟。因此，可以高效地进行参数扫描，例如改变照明角或调整粒子相对于光束的位置，所有操作均可通过后处理完成，无需耗时地进行额外模拟。我们通过数值计算展示了若干应用：分别为紧聚焦高斯光束中的球形等离激元纳米粒子和方位偏振光束中的等离激元纳米锥绘制光力与力矩图，并计算非傍轴拉盖尔–高斯涡旋光束在多层表面反射时的场。我们认为，这款名为 BEAMS 的软件包是一个有价值的工具，可快速量化传统解析方法无法处理的电磁系统。

关键词：光束物理学、纳米粒子、散射、表面、对称性、光力、光学力矩

1. 引言

自二十世纪中叶激光发明以来，波前工程领域取得了巨大进展。光束的精确设计与操控已应用于科学的大多数领域，包括物理学、生物学、化学、电信、量子计算和医学[1–16]。准直电磁场蕴藏着巨大潜力，因为它们可以通过多种方式进行塑造和生成。场强度可以呈现为高阶高斯模式，例如拉盖尔-高斯模式和厄米–高斯模式；仅凭这些模式就能引发轨道角动量等复杂现象 [17–21]。除了强度变化之外，还可以使光束的偏振态呈现非均匀分布，从而形成所谓的矢量涡旋光束 [22, 23]。如今，这些光束在实验室条件下已能轻易复现 [24–33] ，并为物质与光场相互作用提供了令人振奋的新途径。它们的结构已在许多新颖应用中得到运用，包括粒子取向分析、磁场局域化，以及诱导各向同性粒子发生轨道运动 [33–35]。

为了探索未知效应和未来技术，将复杂的涡旋光束与复杂的材料结构结合起来，是很自然的选择。现代纳米制造技术已使各种各样的纳米结构得以实现，每种结构都具有可用于药物递送、传感、纳米化学和光催化的特性 [36–42]。研究这些结构及其与光的相互作用，对于优化和进一步发展至关重要。尽管米氏理论 [43,44] 和多极子格林方法 [45–47]等分析方法确实可用于计算简单情形，但许多结构无法通过这些方法准确描述，通常需要数值有限元解。当存在强相互作用的基底时，这一点尤其重要，而这种情况在实验测量中十分常见。然而，许多商业求解器要么不支持模拟复杂的光学照明场，要么需要繁琐的步骤和庞大的仿真区域。相比之下，平面波模拟始终快速、高效且简单。这一局限通常会大幅减缓对紧聚焦区域及其中迷人物理现象的研究。

本文展示了一种数值方法，可用于求解纳米光子学中常见的多种系统，同时允许照明特性完全自由设定。该方法的优势在于，复杂光束完全通过平面波模拟生成，作为后处理步骤完成。我们将有限元求解器的通用性与对称性的优势相结合，生成全场三维解，随后可用于计算所需的任意光学量，例如光学力、光力矩、功率流、自旋密度、螺旋度和动量流。唯一的限制是系统必须轴对称；物质的几何结构必须具有一条连续旋转对称轴。否则，该方法仍然有效，但效率可能不高。我们采用此方法分析了核壳粒子、等离激元纳米锥和多层反射问题等示例

以展示该方法的通用性；这些示例均采用结构各异的聚焦光束进行照明。

2. 方法

本节首先介绍角谱方法及其形式化表达。我们解释如何利用该方法表示任意光束，随后直接纳入球形粒子的散射。接着将其扩展到散射轴对称体，最后给出结果部分所使用的光力和光学力矩的一些表达式。

2.1. 将结构散射加入角谱

我们方法背后的第一项原理是角频率为 ω 的电磁场的角谱方法，其可表示为:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi} \mathcal{A}(\mathbf{k})\, e^{i\,\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)} \underbrace{\sin(\theta)\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi}_{\mathrm{d}\Omega_k}, \tag{1}$$

其中，$\mathbf{E}$ 是位置 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ 处的电场，$\mathbf{r}_0$ 决定了光场的相位中心‡； $\mathcal{A}$ 是取决于波矢 $\mathbf{k} = k\big(\sin(\theta)\cos(\phi), \sin(\theta)\sin(\phi), \cos(\theta)\big)$ 的电场角谱，Ω_k 是由 $\mathbf{k}$ 的所有可能取向定义的 $\mathbf{k}$ 球面的立体角。

角表示表明，任意单色电磁场分布都可以分解为具有不同空间频率的平面波的线性组合。可以确定的是，平面波的任意线性组合都会形成麦克斯韦方程组的另一个精确解；反之，麦克斯韦方程组的任意精确解（在线性材料中）都可以表示为平面波的叠加。我们还可以将自由空间中任意光束的角谱概念化为一组平面波，通过某些三维旋转，这些平面波都可以映射到同一个共同传播的平面波上。角谱还可用于在旋转各个平面波时改变其相位和幅度，从而完善这一映射。除了分解已知光束的场分布之外，也可以执行逆向过程：从单个平面波出发，将其复制多次，再按照前文所述的映射对这些副本进行旋转和调制。将所有平面波积分后，所得的线性组合便等于所需的光束。

如果在光束系统中加入球形粒子，散射会扰动场。不过，如果我们再次考虑单个平面波，这次让它入射到球形粒子上，并旋转总矢量场（包括球体的散射），我们知道，由于粒子具有旋转对称性，旋转后的解在物理上与未旋转的解完全相同。因此，只需模拟单个

‡ 当光场为光束时，$\mathbf{r}_0$ 就是光束的焦点。

入射到球形粒子上的平面波，我们就可以重复旋转场并将结果映射到光束角谱的过程，从而将这个平面波散射系统转换为入射到球形粒子上的光束场分布。由此，我们得出了一个引人注目的普遍结论：只需对入射平面波照射下的球形粒子进行一次模拟，就能通过简单的后处理步骤，将平面波转换为任意所需的光学照明。系统的旋转对称性将所需的平面波模拟（PWS）次数从无穷多次减少到仅一次。这是我们方法背后的第二个原理。虽然仅凭这一点就能有效模拟许多常见的光子系统，但我们还可以将这一原理进一步扩展到圆柱体、圆锥体、环面，以及任何具有连续旋转对称性的其他粒子形状（即任何轴对称体 [48]），具体如下。

我们采用如下约定：粒子的取向使其一条旋转对称轴沿着 z 轴（$\theta = 0$），平面波以方位角 ϕ 和相对于 z 轴的夹角 θ 入射。整个系统可以绕 z 轴旋转（即改变方位角 ϕ），而在物理上仍保持不变。不过，改变 θ 不符合系统中的任何对称性，因此散射也会不同。这表明每个 θ 值都需要进行一次新的模拟，而所有具有相同 θ 值的平面波彼此之间只相差绕 ϕ 的简单旋转。因此，我们需要对多个不同的 θ 值进行采样，以准确提取散射行为随 θ 变化的情况。与粒子完全不具备对称性、需要大量平面波谱的常见情形相比，我们仍能显著减少所需的模拟次数，因为旋转对称性有效地降低了问题的维数。

在应用对称性论证来简化问题之前，我们必须先能够通过角谱方法将粒子散射纳入光束的场中。我们可以通过先将 $\mathcal{A}$ 展开到一个正交基中，在数学上对公式（1）应用这一方法。我们采用球面偏振基，并使用表面光学中常见的 p/s 命名约定。$\hat{\mathbf{e}}_p$ 和 $\hat{\mathbf{e}}_s$ 单位向量分别对应球坐标中的 θ 和 ϕ单位向量。关于这种偏振基分解的详细信息见补充信息第 4 节。 $\mathcal{A}$ 随后分解为 $A_p(\mathbf{k})\,\hat{\mathbf{e}}_p + A_s(\mathbf{k})\,\hat{\mathbf{e}}_s$，公式（1）变为，

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \iint \Big[A_p(\mathbf{k}) \underbrace{\hat{\mathbf{e}}_p\, e^{i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}_{\text{plane wave}} + A_s(\mathbf{k}) \underbrace{\hat{\mathbf{e}}_s\, e^{i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}_{\text{plane wave}} \Big] e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0} \sin(\theta)\, \mathrm{d}\theta\, \mathrm{d}\phi, \tag{2}$$

标量函数 A_p 和 A_s 是通过点积由 $\mathcal{A}$ 推导得出的，使得 $A_p = \mathcal{A}\cdot\hat{\mathbf{e}}_p$和 $A_s = \mathcal{A}\cdot\hat{\mathbf{e}}_s$。式（2）明确指出了哪些项对应于各偏振态的平面波，因为这些项正是平面波谱场可通过代换替换的项，从而将粒子散射纳入光束场$\mathbf{E(r)}$。也就是说，当 $\hat{\mathbf{e}}_{p,s}\, e^{i\,\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)} \to \mathbf{E}^{\mathrm{PWS}}_{p\,s}\mathbf{(r)}$ 时，$\mathbf{E(r)}$ 会从自由空间光束转变为入射到散射结构上的光束。矢量场$\mathbf{E}^{\mathrm{PWS}}_{p\,s}\mathbf{(r)}$ 随 θ和 ϕ 变化，因为它表示受到所有可能方向的平面波照射的材料结构

。随后可以将对称性论证应用于$\mathbf{E}^{\mathrm{PWS}}_{p\,s}$,**(r)**，大幅减少所需的模拟次数，并改为采用一系列计算成本低廉的三维旋转，将少量模拟映射到所有可能的$\mathbf{E}^{\mathrm{PWS}}_{p\,s}$,**(r)**。

数值实现前的最后一步是将 θ 和 ϕ 上的连续积分离散化为有限求和，由此得到数值生成入射于材料结构上的任意结构化光束的场的基本表达式，

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) \approx \sum_{p,s} \sum_{\theta} \sum_{\phi} A_{p,s}(\mathbf{k})\, \mathbf{E}^{\mathrm{PWS}}_{p,s}(\mathbf{r})\, e^{-i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0} \sin(\theta)\, \Delta\theta\, \Delta\phi. \tag{3}$$

三重求和中的第一重表示对两种偏振态 p 和s求和。后两重表示在球坐标中对平面波取向求和。

在某些情况下，我们希望模拟对称粒子未位于光束焦点处的情形。甜甜圈光束就是一个常见例子，因为其焦点处的电场强度较低。在这种情况下，由电场强度产生的光学力在远离光束焦点处可能更强。 $e^{-i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0}$ 项允许通过改变不同平面波谱分量的相对相位来平移光束焦点，而无需重新计算$\mathbf{E}^{\mathrm{PWS}}_{p\,s}$,**(r)**。这样便能以高效的后处理方式创建有信息量的图表，例如力分布图，其中光力被绘制为光束内粒子位置的函数。这一点将在第3.2节中演示。

2.2. 非傍轴光束的角谱

该方法的一项关键优势在于，能够利用同一组数值模拟数据文件快速计算多种照明类型。如果数值求解器能够以复杂的光束结构（而非单个平面波）照射物体，那么任何光束参数的变化，例如入射角、焦点位置、光束腰和偏振，都必然需要重新进行一次全新的模拟，而且成本可能很高。因此，任何参数扫描都会带来较大的计算开销。我们的方法只需预先进行少量平面波数值模拟，随后对这些最少量的数据进行处理，即可实现任意照明结构。至关重要的是，这使得我们能够通过对同一组初始平面波模拟进行后处理，高效地完成诸如改变照明角或移动光束焦点等参数扫描。

现在，我们将讨论如何用角谱表示入射光束的场，并在我们的方法中加以实现；但我们强调，角谱表示并不局限于光束结构：任何入射到物体上的电磁场，都可以用公式（1）所示的角谱方法表示。为简化计算，光束通常采用傍轴近似形式表示 [49] ，但这样做会失去麦克斯韦方程组的精确解，以及一些与聚焦相关的物理属性，例如纵向场分量 [50–56]。我们不希望我们的方法受到这些限制。为

解决这一问题，可以先用角谱方法从傍轴方程出发，再确定纵向分量，从而生成在所有条件下、整个空间中均遵循电磁学定律的三维场分布。这是可行的，因为角谱是平面波解的线性组合，而每个平面波都是麦克斯韦方程组的精确解。为此，我们采用以下步骤。

2.2.1. 积分一个傍轴光束我们从传播轴记为 ˆ 的傍轴光束的场开始。为展开论述，先将传播限制在 ˆ z 轴（即 $\mathbf{K} \parallel \hat{\mathbf{z}}$），并且只要求焦平面上的场，我们将其指定为 $z = 0$。因此，近轴场表示为 $\mathbf{E}_{\perp}^{\hat{\mathbf{K}}\|\hat{\mathbf{z}}}(x, y, 0)$，其中 $\perp$ 符号表示场仅在垂直于传播方向的平面内偏振。光束的场可用笛卡尔坐标定义，因此将公式（1）改写为笛卡尔基形式较为方便，其中 $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$，

$$\mathbf{E}_{\perp}^{\hat{\mathbf{K}}\|\hat{\mathbf{z}}}(x, y, 0) = \iint\limits_{k_x^2+k_y^2 \le k^2} \mathcal{F}_{\perp}^{\hat{\mathbf{K}}\|\hat{\mathbf{z}}}(k_x, k_y)\, e^{i(k_x\, x + k_y\, y)}\, \mathrm{d}k_x\, \mathrm{d}k_y. \tag{4}$$

这里，$\mathcal{F}$ 表示角谱，但其定义在二维 $z = 0$ 平面上，而非由 θ 和 ϕ 决定的球面上（更多详情请参阅补充信息）。在此过程稍后，我们将 $\mathcal{F}$ 与公式（1）中出现的 $\mathcal{A}$ 联系起来。该傅里叶变换的逆变换为，

$$\mathcal{F}_{\perp}^{\hat{\mathbf{K}}\|\hat{\mathbf{z}}}(k_x, k_y) = \frac{1}{4\pi^2} \iint\limits_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}_{\perp}^{\hat{\mathbf{K}}\|\hat{\mathbf{z}}}(x, y, 0)\, e^{-i(k_x\, x + k_y\, y)}\, \mathrm{d}x\, \mathrm{d}y. \tag{5}$$

对于以原点为中心的简单傍轴高斯光束，$\mathbf{E}_{\perp}^{\hat{\mathbf{K}}\|\hat{\mathbf{z}}}(x, y, 0) = (E_x, E_y, 0)\; e^{-\frac{x^2+y^2}{w^2}}$，其中 w 为光束腰，E_x 和 E_y 是复标量，用于确定光束横向场 [46, 57–60]的相位、振幅和偏振。相应的角谱为 $\mathcal{F}_{\perp}^{\hat{\mathbf{K}}\|\hat{\mathbf{z}}}(k_x, k_y) = (E_x, E_y, 0)\; w^2\, e^{-\frac{w^2}{4}(k_x^2+k_y^2)}$。通过查阅《补充信息》第 3 节中的表格，可以简化这一步；该表列出了若干常见光束模式对应的 $\mathcal{F}_{\perp}^{\hat{\mathbf{K}}\|\hat{\mathbf{z}}}$ 形式。

2.2.2. 从焦平面扩展到整个空间 为了将式（4）中的 $z = 0$ 平面上的场扩展到整个空间，我们规定，精确场 $\mathbf{E}$（即最终希望计算的场）必须满足波动方程 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = k^2$，并且只包含传播分量（$k_x^2 + k_y^2 \le k^2$）。由此得到传播子 $e^{ik_z z}$，其中 $k_z = \sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2}$ 且 $k_z > 0$。因此，可以通过该传播子将场扩展到整个空间，即

$$\mathbf{E}_{\perp}^{\hat{\mathbf{K}}\|\hat{\mathbf{z}}}(\mathbf{r}) = \iint\limits_{k_x^2+k_y^2 \le k^2} \mathcal{F}_{\perp}^{\hat{\mathbf{K}}\|\hat{\mathbf{z}}}(k_x, k_y)\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\, \mathrm{d}k_x\, \mathrm{d}k_y. \tag{6}$$

2.2.3. 对纵向场进行修正 $\mathcal{F}_{\perp}^{\mathbf{K}\|\hat{\mathbf{z}}}$ 在横向平面上仅具有（$\mathcal{F}_x, \mathcal{F}_y, 0$）分量，并且缺少纵向场分量，这是因为它是由近轴场推导得到的。现在考虑以下场：

$$\mathbf{E}^{\mathbf{K}\|\hat{\mathbf{z}}}(\mathbf{r}) = \iint_{k_x^2+k_y^2\le k^2} \mathcal{F}^{\mathbf{K}\|\hat{\mathbf{z}}}(k_x,k_y)\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\, \mathrm{d}k_x\, \mathrm{d}k_y. \tag{7}$$

这是完整且精确的麦克斯韦场，包含纵向分量，不作任何近似；唯一的条件是其横向分量与$\mathbf{E}_{\perp}^{\mathbf{K}\|\hat{\mathbf{z}}}(\mathbf{r})$相匹配。具体而言，$\mathcal{F} = \mathcal{F}_x\hat{\mathbf{x}} + \mathcal{F}_y\hat{\mathbf{y}} + \mathcal{F}_z\hat{\mathbf{z}}$而 $\mathcal{F}_{\perp} = \mathcal{F}_x\hat{\mathbf{x}} + \mathcal{F}_y\hat{\mathbf{y}}$。缺失的分量可通过调用麦克斯韦方程 $\nabla\cdot\mathbf{E} = 0$ 并将其应用于式（7）来求得，从而得到条件$\mathbf{k}\cdot\mathbf{E}$ {v32>。此条件明确表明$k_x\mathcal{F}_x + k_y\mathcal{F}_y + k_z\mathcal{F}_z = 0$，因此，

$$\mathcal{F}_z = -\frac{\mathcal{F}_x\,k_x + \mathcal{F}_y\,k_y}{k_z}. \tag{8}$$

也就是说，当已知横向平面内的场时，可以利用这个简单的方程轻松重建纵向场，并得到 $\mathcal{F}_{\perp}^{\mathbf{K}\|\hat{\mathbf{z}}} \to \mathcal{F}^{\mathbf{K}\|\hat{\mathbf{z}}}$。对于高斯光束示例，这将得到 $\mathcal{F}^{\mathbf{K}\|\hat{\mathbf{z}}}(k_x,k_y) = (E_x, E_y, E_z)\, w^2\, e^{-\frac{w^2}{4}(k_x^2+k_y^2)}$，其中 $E_z = -\frac{E_x\,k_x + E_y\,k_y}{k_z}$。

2.2.4. 定义分段角谱由于式（2）计算的是$\mathcal{A}$ 在三维球面表面上的积分，而当$k_z > 0$时，式（7）计算的是 $\mathcal{F}$ 在二维 $z = 0$ 平面上的积分，因此必须通过分段映射将 $\mathcal{F}$ 与 $\mathcal{A}$ 关联起来，并在积分中考虑不同的雅可比行列式。微分立体角 $\mathrm{d}\Omega = \sin(\theta)\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi = \frac{1}{k\,k_z}\,\mathrm{d}k_x\,\mathrm{d}k_y$[46]，结果为，

$$\mathcal{A}^{\mathbf{K}\|\hat{\mathbf{z}}}(\mathbf{k}) = \begin{cases} k\,k_z\,\mathcal{F}^{\mathbf{K}\|\hat{\mathbf{z}}}(k_x,k_y), & \text{if } k_z > 0 \\ 0, & \text{if } k_z \le 0 \end{cases} \tag{9}$$

对于简单的高斯光束示例，这表明 $\mathcal{A}^{\mathbf{K}\|\hat{\mathbf{z}}}(\mathbf{k}) = (E_x,\ E_y,\ E_z)\ k\,k_z\,w^2\,e^{-\frac{w^2}{4}(k_x^2+k_y^2)}$。

2.2.5. 光束轴的旋转 公式（5）要求傍轴光束的传播方向平行于 z 轴，否则积分将不收敛。不过，通过使用传统的三维旋转矩阵（详情见补充信息第 2 节），可以将 $\mathcal{A}^{\mathbf{K}\|\hat{\mathbf{z}}}$ 映射为任意取向、但其他方面相同的光束。在这一步中，$\mathcal{A}$ 比 $\mathcal{F}$ 更方便，因为它定义在球体表面上，因此可以轻松旋转，无需额外修正。这样，只需简单旋转即可改变光束轴和偏振态，以匹配所需的任何配置，使得 $\mathcal{A}^{\mathbf{K}\|\hat{\mathbf{z}}} \to \mathcal{A}$。

2.2.6. 获取非傍轴三维场 现在可以按照第 2.1 节所述，将旋转角谱 $\mathcal{A}$ 分解为 A_p、$_s$，并使用公式（3）生成所需光束的场，其中包含插入粒子产生的任何散射。更多详情请参阅补充信息。此时，只需从 $\mathrm{E}_{\perp}^{\hat{\mathbf{K}}\|\hat{\mathbf{z}}}(x, y, 0)$ 开始，即可获得具有任意 ˆK 的非傍轴光束 E(r) 的场。对于沿 ˆz 传播的高斯光束示例，非傍轴电场的形式为 E(r) $= \int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi/2}(E_x, E_y, E_z)\ k\, k_z\, w^2\, e^{-\frac{w^2}{4}(k_x^2+k_y^2)}\, e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)}\sin(\theta)\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi$，其中 (k_x, k_y, k_z) $\equiv k\big(\sin(\theta)\cos(\phi), \sin(\theta)\sin(\phi), \cos(\theta)\big)$。 —

我们注意到，尽管本文重点讨论电场，但同样的方法也适用于磁场；结构化光束的磁场分量会在结果部分计算并使用。

2.3. 光力与力矩

当光束照射到粒子上时，光学力和光力矩可以改变粒子的位置和朝向。这些现象分别由光束向粒子传递线动量和角动量所驱动，并且可以利用麦克斯韦应力张量↔(MST)方法，根据三维电磁场数据轻松计算得出。麦克斯韦应力张量记作**T**，表示场中的动量流，可表示为 [46],

$$\langle\overleftrightarrow{\mathbf{T}}\rangle = \frac{1}{2}\mathfrak{Re}\left\{\varepsilon\mathbf{E}\otimes\mathbf{E}^* + \mu\mathbf{H}\otimes\mathbf{H}^* - \frac{1}{2}\big(\varepsilon|\mathbf{E}|^2 + \mu|\mathbf{H}|^2\big)\overleftrightarrow{\mathbf{I}}\right\}, \tag{10}$$

其中**E** 和**H** 分别为总电场和磁场，$\otimes$ 表示两个向量的外积↔，星号表示复共轭，**I** 为 3×3 恒等矩阵，而 ε 和 μ 分别为介质的介电常数和磁导率。尖括号表示时间平均量。当作用力的物体内存在净动量流入或流出时，就会产生力；该力可通过通量面积分 [46],进行量化。

$$\langle\mathbf{F}\rangle = \int_S \langle\overleftrightarrow{\mathbf{T}}\rangle\cdot\hat{\mathbf{n}}\,\mathrm{d}S, \tag{11}$$

其中，**F** 是光力，ˆ**n** 是包围该物体的任意闭合表面的外法向量 S。同样，力矩可通过叉积形式的角动量定义计算，即:

$$\langle\mathbf{N}\rangle = \int_S \left(\mathbf{r}\times\left\langle\overleftrightarrow{\mathbf{T}}\right\rangle\right)\cdot\hat{\mathbf{n}}\,\mathrm{d}S, \tag{12}$$

其中，**N** 是光学力矩，**r** 是从旋转轴指向外部的位置矢量。括号中的整体叉积项有时称为角动量通量张量 $[61, 62]$。利用这些表达式，无论粒子具有何种

性质，都可以立即确定由电磁学引起的粒子动力学。根据式（11）和（12）计算力和力矩，唯一需要的量是入射光束在粒子上发生散射时的完整电磁场（包括电场和磁场），而我们的方法能够提供这些量。

3. 结果

我们方法的优势在于其高度的通用性和适用性。为展示这一点，我们分析了三种不同的纳米光子学系统。平面波谱是在*CST Microwave Studio*中进行的。

3.1. 聚焦高斯光束中的核壳粒子

当需要对粒子的散射/吸收特性进行设计时，多层球形粒子是一种常见的解决方案。这类粒子可以采用现代纳米制造技术制备 [63] ，并已被提出用于包括光催化、纳米激光器、自发辐射增强以及作为非线性现象基础在内的应用。作为示例，我们采用 Feng 等人提出的金核硅壳设计 [64] ，该设计在波长为$\lambda = 1.3\,\mu m$时表现出纯磁偶极共振。因此，这种核壳粒子能够探测任意入射光束的磁场。核半径为 62 nm，壳层半径为 180 nm。该几何结构的旋转对称性意味着，只需使用两个平面波谱（每种偏振一个），即可计算多层球体与任意结构光束之间的相互作用。

图 1b 展示了系统示意图，其中光束沿 z 轴正方向传播。光束腰 w 设为 0.5λ ，其中 $\lambda = 1.3\,\mu m$，周围介质的 $n = 1$。在 CST Microwave Studio 中快速完成两次平面波模拟，模拟平面波在粒子上的散射后，我们对结果应用了后处理代码。输出结果是圆偏振紧聚焦高斯光束入射并在核壳粒子上发生散射时的完整场。该照明的角谱可通过软件包的解析工作簿方便地获得。图 1c 展示了 $|\mathbf{E}|$ 在 $y = 0$ 平面上的截面，粒子以黑色虚线勾勒。图像下半部分清晰可见入射光束与粒子散射之间的干涉。我们利用这一三维电磁场分布，通过麦克斯韦应力张量法计算粒子受到的光力和力矩。选取包围粒子的立方体表面作为积分表面。原则上，只要立方体包围粒子，其尺寸任意都应得到相同的力和力矩。然而在数值计算中，结果总会有所变化，因此需要改变积分表面的尺寸，以检查结果的一致性并获得这些量的统计精确值（见图 1d）。图 1d 展示了在一系列积分立方体尺寸下计算得到的力和力矩的笛卡尔分量，平坦的曲线表示结果可靠。黄色区域（$a < 360$ nm）表示积分表面过小并与粒子相交，从而导致结果不准确

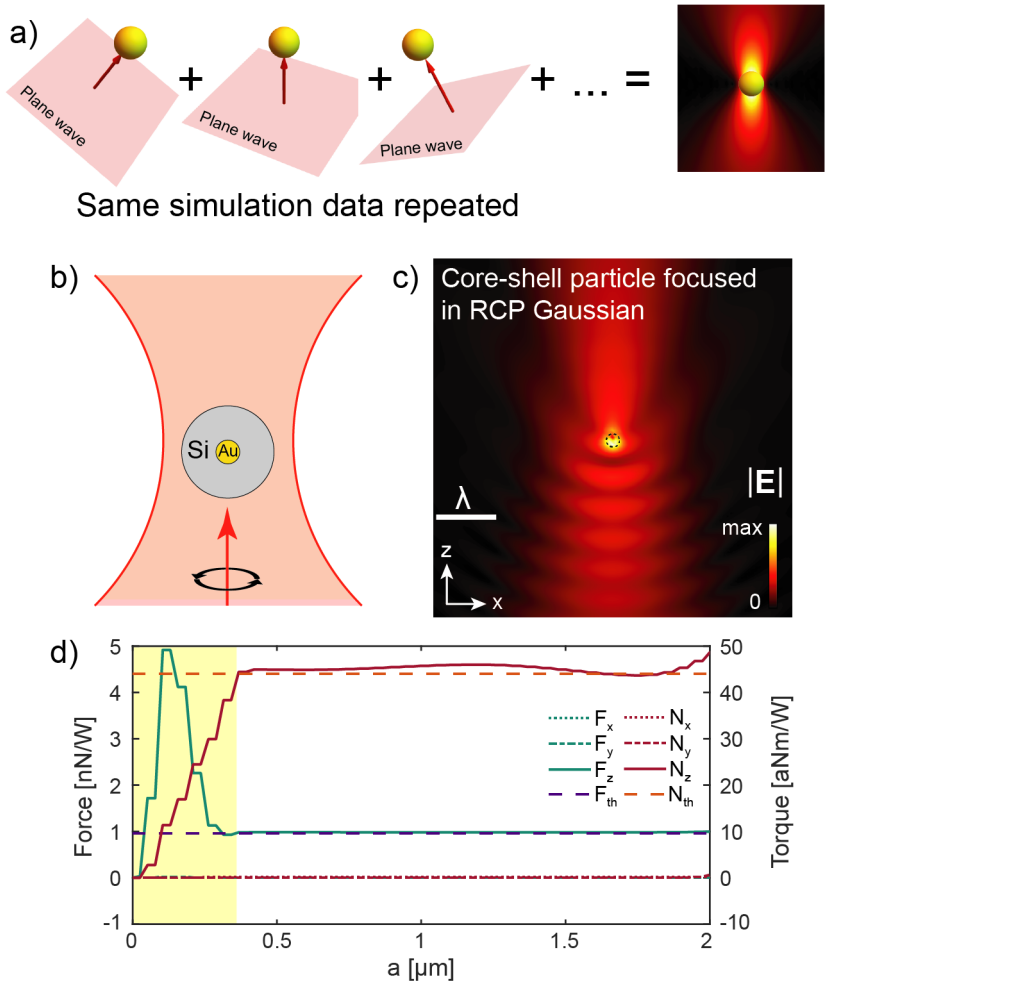


图1. a) 将平面波模拟数据纳入角谱并利用系统的对称性，即可通过单个模拟数据集计算粒子在任意结构化光束中的散射。b) 金核硅壳粒子受到右旋圆偏振（RCP）的聚焦高斯光束照射。示意图未按比例绘制。c) $|\mathbf{E}|$ 在光束与粒子所在 $y = 0$ 平面上的截面。粒子的外边界以黑色虚线表示。d) 位于焦点处的粒子所受时间平均力和力矩随积分表面尺寸 a 的变化，并以光束功率归一化。平直线表示结果稳定可靠。黄色区域表示积分表面与粒子相交，因此这些结果无效并被忽略。紫色和橙色虚线分别表示通过米氏理论计算得到的力和力矩理论值。

的结果。

球形粒子是散射问题中的一个特殊情形，因为米氏理论为该问题提供了精确解析解。因此，我们可以通过将数值结果与米氏理论得出的结果进行比较，来评估数值方法的准确性。这些解析计算的详情见补充信息，力和力矩的理论值（分别记为 F_{th} 和 N_{th}）以蓝色和橙色虚线绘制于图 1d 中。我们观察到

理论结果与数值结果高度吻合，表明数值计算可靠。

如上文所述，我们现在可以改变该光束的任意参数（束腰、尺寸、焦点位置、光束类型等），然后只需对同一组平面波谱执行后处理步骤，即可获得新的场、力和力矩。

3.2. 方位偏振光束中的等离激元纳米锥

本演示的下一阶段是采用更复杂、难以求解的结构。由于不存在球对称性，米氏理论等解析方法无法再直接给出散射问题的答案。在纳米光子学中，圆柱体十分常见 [41]，但圆柱对称性适用于远比圆柱体更广泛的几何结构；圆锥体 [65, 66], 、环面/圆环 [67–70],、管和核壳圆柱体 [38] 都是这类结构的例子。在这些结构中，圆锥几何结构或许最难计算，因为它缺少横截面镜面对称性，而这种对称性原本可以进一步将平面波谱的数量从 $0 \leq \theta \leq \pi$ 减少到$0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$。因此，下一个示例将采用纳米锥。

–

金纳米锥在实验上已具有可行性，其等离激元特性能够增强散射 [65]。此外，选择聚焦方位偏振涡旋光束，使照明光束更加复杂，以突出各种光束选项的可能性。进一步地，将入射角设为 $45°$，以表明光束轴可以独立于圆柱对称轴进行选择。波长设为 532 nm，以匹配金的等离激元共振范围；光束腰设为 0.8 λ。同样，我们使用 CST Microwave Studio 对以不同入射角入射到纳米锥上的平面波进行了平面波谱计算 θ （但始终保持 $\phi = 0$）。随后，使用我们的代码对这些平面波谱数据进行后处理，从而获得所需入射条件下的完整场分布。

图 2a 展示了光束在自由空间中的 $y = 0$ 截面上电场分布，图 2b 则将金纳米锥置于光强最高处，引入光束中。纳米锥高 240 nm，最大半径为 50 nm。与图 1b 类似，我们清楚地观察到纳米锥的散射与入射光束发生干涉，并且还能看到圆锥体底部的一个热点。该热点与文献中的先前结果一致 [65]，其中使用相同材料和相近波长时观察到了类似的激发。图 2c 展示了作用于纳米锥的光力和力矩，与图 1c 类似。力沿光束传播方向，因此可以解释为作用于纳米锥的简单辐射压力。 F_z 也略大于 F_x，这表明纳米锥的热点正被推向光束强度最大处。沿 $-y$ 方向的力矩表明，从图 2b 的视角看，纳米锥将逆时针旋转。还可以进行进一步的迭代计算，以确定达到转动平衡的方向。

最后， 为了凸显该方法的强大之处，同时无需额外 1

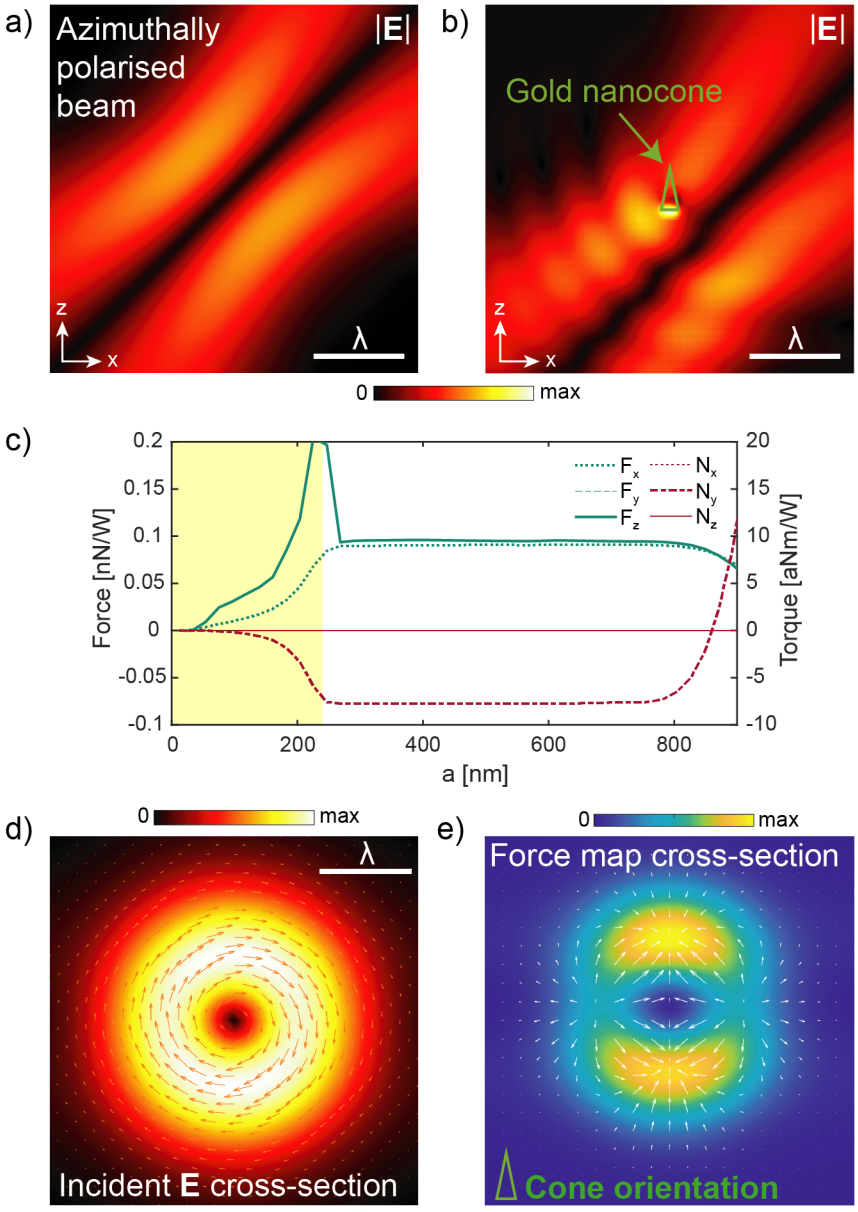


图2. a）方位偏振光束在自由空间中沿 (1,0,1) 方向传播，波长为 $\lambda = 532$ nm，且 $w = 0.8\lambda$。b）将同一方位偏振光束向下平移 300 nm、向右平移 150 nm，并引入金纳米锥。其高度为 240 nm，底面半径为 50 nm。c）绘制 b）中的光力和力矩随麦克斯韦应力张量积分立方体边长的变化，以确认结果稳定。黄色区域表示积分立方体与纳米锥相交的部分，这些结果可以忽略。d）a）中方位偏振光束的截面，展示电场偏振。e）金纳米锥在与 d）相同截面上的力分布图。箭头表示截面内时间平均力的分量，颜色表示力的总大小。

对于平面波模拟，我们通过改变公式 (3) 中的$\mathbf{r}_0$，使用后处理代码扫描纳米锥在光束中的位置，并计算出图 2e 所示的力分布图。图中的每个箭头都代表一次完整的后处理模拟，其中包括对粒子周围立方体进行麦克斯韦应力张量积分。如果需要针对每个纳米锥位置分别进行数值模拟，绘制力分布图将是一项繁琐的工作；但使用我们的方法，只需在标准台式电脑上花费几分钟，就能利用同一组平面波谱生成这样的图。

3.3. 涡旋光束反射

前面的示例聚焦于独立粒子，但这种计算方法同样适用于涉及平面结构的配置。平面界面天然具有轴对称性，因此围绕表面法线轴的旋转会产生物理上相同的结果，从而可以利用这一点降低问题的维数。多层结构或分层结构只是这一问题的扩展，可以采用与前面示例类似的方式计算，同时应用成熟的传递矩阵法 [71]。

我们以一个p偏振聚焦涡旋光束（拉盖尔-高斯光束，具有 $l = 1$和 $m = 0$）照射玻璃-金多层结构并发生反射为例进行说明，所得电场分布如图3所示。该光束的波长为 808 nm，聚焦于原点，光束腰为 0.75λ。玻璃的折射率为 1.5，厚度为 $1\ \mu$m，其下方放置半无限金 [72] 。入射光的偏振奇点沿着 $z = -x$ 线清晰可见，空气-玻璃界面附近则观察到了干涉图样。

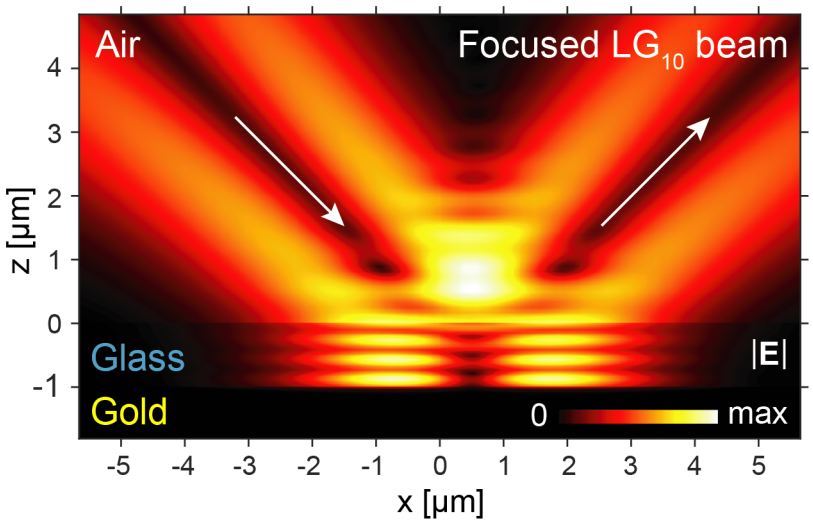


图 3. $45°$ 聚焦于带有厚金基底的玻璃板上的p偏振拉盖尔-高斯涡旋光束的电场分布，其中$\lambda = 808$ nm，且 $w = 0.75\lambda$。白色箭头表示入射和反射光束的传播方向。

图3中的三维电磁场是通过两种方法计算得到的：一种是采用具有周期性 Floquet 边界条件的商用频域数值求解器，另一种是对平面波多层散射进行解析计算。后者计算速度自然更快，但仅适用于均匀分层系统。数值求解器能够计算更复杂的轴对称结构，例如基底上的孤立纳米棒或纳米锥，或类似孤立纳米孔的凹陷结构。虽然这些结构常见于紧密排列的周期性超材料中，但孤立结构的结果仍能提供有关复杂光束照明下结构共振行为以及基底如何增强这些特性的宝贵信息。因此，我们预计，本软件包将成为实验团队的宝贵工具，帮助他们深入了解由这些组成部分构成、在复杂光束照射下的实验纳米材料。如果棒、锥或孔之间的间距足够大，使相邻元件间的相互作用可以忽略不计，那么这种轴对称角谱方法将能给出近似的定量结果。

4. 讨论

本文提出了一种理论光束生成方法，其优势在于普适性，并且适用范围不限于本文所讨论的情形。其中一个例子是光脉冲。本文的示例均为单色光束，但这只是为了简化问题，并不表明该方法存在局限性。若要将其扩展到光脉冲，光脉冲的角谱必须额外包含一个关于时间频率的积分。随后，可将光脉冲的频谱代入被积函数中，而关于电磁场的方程同样成立。

上一节中的演示仅采用单束传播光束照射目标物体，但没有任何因素阻止在这些系统中加入额外的光束。多束入射光束既可以通过将单束光束系统的场相加来计算，也可以通过组合各光束的角谱来计算。悬浮光力学等领域通常会采用反向传播的光束，将粒子捕获在驻波 [73–75]内部。利用我们的方法，可以对这类系统进行详细分析。同样，光学晶格系统也可以通过在角谱中定义离散对称性来计算。

最后，该方法天生适用于各向异性系统。图2和图3展示了散射物体几何形状各向异性的情形，即材料尺寸在各个笛卡尔方向上的延伸各不相同。不过，只要材料各向异性符合绕 z 轴的旋转对称性，也可以考虑折射率等材料固有属性本身具有各向异性的情形。在这种情况下，即使是球形粒子也可能成为一个棘手的问题。几何各向异性与材料各向异性的结合会导致复杂的近场和远场散射，在光学的一些领域可能具有研究价值。

电磁场与物质之间的相互作用是无数技术的核心，而对这些场进行全波三维计算则是光子学中一个持续存在的难题。我们展示了一种完整的方法，可计算任意复杂的入射光束与旋转对称结构之间的相互作用，且具有高度普适性；该方法只需预先进行平面波入射模拟，这是一种简单、快速的计算，所有电磁求解器软件包均可执行。即使在紧聚焦极限下，也无需额外近似，极大地拓宽了数值求解器能够计算的系统范围。该方法能够准确构建亚波长和近场散射，并利用所得复场数据可靠地计算光学力和力矩。如今纳米光子学中使用的许多结构，包括球体、棒、管和圆锥体，都适用于该方法，因此只需少量数值求解器并高效利用它们，就能对这些结构开展多种类型的分析。我们相信，这将成为许多研究人员的宝贵工具，因此提供了一个名为 $BEAMS$ （通过电磁轴对称多层结构实现光束散射）的开源软件包，其中以 MATLAB 实现了这一后处理方法，软件见参考文献 [76]。

致谢

J. J. Kingsley-Smith 感谢 M. F.Picardi 博士就软件设计提供的宝贵建议。本研究获得了欧洲研究理事会起始资助项目 ERC-2016- STG-714151-PSINFONI 的支持。

参考文献

[1] B. P. Abbott等。双黑洞并合产生引力波的观测。*PhysicalReview Letters*，116(6):061102，2016年2月。[2] Jeffrey R. Moffitt、Yann R. Chemla、Steven B. Smith 和 Carlos Bustamante。光镊的最新进展。*Annual Review of Biochemistry*，77(1):205–228，2008年6月。[3] M. Righini、P. Ghenuche、S. Cherukulappurath、V. Myroshnychenko、F. J. Garc´ıa de Abajo 和 R. Quidant。利用共振光学天线对瑞利粒子和大肠杆菌进行纳米光学捕获。《纳米快报》，9(10):3387–3391，2009年10月。[4] Alice C. N. Brown、Stephane Oddos、Ian M. Dobbie、Juha-Matti Alakoskela、Richard M. Parton、Philipp Eissmann、Mark A. A. Neil、Christopher Dunsby、Paul M. W. French、Ilan Davis 和 Daniel M. Davis。超分辨显微镜揭示自然杀伤细胞免疫突触处溶细胞颗粒停靠位置的皮质肌动蛋白重塑。《公共科学图书馆·生物学》，9(9):e1001152，2011年9月。[5] K Svoboda 和S M Block。光学力的生物学应用。《生物物理学与生物分子结构年度评论》，23(1):247–285，1994年6月。[6] Scot C. Kuo。利用光学测量生物力与力学性质。*Traffic*，2(11):757–763，2001年11月。[7] Mathieu L Juan、Maurizio Righini 和 Romain Quidant。等离激元纳米光镊。*NaturePhotonics*，5(6):349–356，2011年6月。

[8] Karl Otto Greulich。利用激光微束剪刀和光镊操控细胞：综述。Reports on Progress in Physics，80(2):026601，2017年2月。[9]Hongbao Xin 和 Baojun Li。基于光纤的光学捕获与操控。Frontiers of Optoelectronics，12(1):97–110，2019年3月。[10] Carlos Bustamante、Lisa Alexander、Kevin Maciuba 和 Christian M. Kaiser。利用光镊进行蛋白质折叠的单分子研究。Annual Review of Biochemistry，89(1):443–470，2020年6月。[11] David G. Grier。光学操控领域的一场革命。Nature，424(6950):810–816，2003年8月。[12] A. Ashkin。小型中性粒子、原子和分子的光学捕获与操控史。IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics，6(6):841–856，2000年11月。[13] Onofrio M. Marag`ò、Philip H. Jones、Pietro G. Gucciardi、Giovanni Volpe 和 Andrea C. Ferrari。纳米结构的光学捕获与操控。Nature Nanotechnology，8(11):807–819，2013年11月。[14] Yatao Ren、Qin Chen、Mingjian He、Xiangzhi Zhang、Hong Qi 和 Yuying Yan。用于粒子操控的等离激元光镊：原理、方法与应用。ACS Nano，15(4):6105–6128，2021年4月。[15] HongLian Guo 和 ZhiYuan Li。光镊技术及其应用。Science China Physics, Mechanics and Astronomy，56(12):2351–2360，2013年12月。[16] Mohamed Babiker、David L Andrews 和 Vassilis E Lembessis。复杂扭曲光中的原子。Journal of Optics，21(1):013001，2019年1月。[17] L. Allen、M.J. Padgett 和 M. Babiker。IV 光的轨道角动量。载于 Progress in Optics，第4章，第291–372页。Elsevier，1999年。[18]Alison M. Yao 和 Miles J. Padgett。轨道角动量：起源、行为与应用。Advances in Optics and Photonics，3(2):161，2011年6月。[19] Jennifer E. Curtis 和 David G. Grier。光学涡旋的结构。Physical Review Letters, 90(13):133901，2003年4月。[20] Miles Padgett 和 Richard Bowman。带有扭转的光镊。Nature Photonics，5(6):343–348，2011年6月。[21] Yijie Shen、Xuejiao Wang、Zhenwei Xie、Changjun Min、Xing Fu、Qiang Liu、Mali Gong 和 Xiaocong Yuan。光学涡旋三十年：从拓扑荷到多重奇点的轨道角动量操控。Light: Science & Applications，8(1):90，2019年12月。[22] Qiwen Zhan。柱矢量光束：从数学概念到应用。Advances in Optics and Photonics，1(1):1，2009年1月。[23] Mina Hanifeh、Mohammad Albooyeh 和 Filippo Capolino。最优手性光：用于纳米尺度物质手性检测的结构光螺旋度密度上限。ACS Photonics，第 acsphotonics.0c00304 页，2020年9月。[24] Xuewen Wang、Zhongquan Nie、Yao Liang、Jian Wang、Tao Li 和 Baohua Jia。光学涡旋生成的最新进展。Nanophotonics，7(9):1533–1556，2018年8月。[25] Peipei Wang、Junmin Liu、Yanliang He、Jun Liu、Xinxing Zhou、Huapeng Ye、Ying Li、Shuqing Chen 和 Dianyuan Fan。利用交叉偏振调制生成任意柱矢量光束。IEEE Photonics Technology Letters，31(11):873–876，2019年6月。[26]Long Zhu 和 Jian Wang。多重光学涡旋生成综述：方法与应用。Frontiers of Optoelectronics，12(1):52–68，2019年3月。[27] Steve C. Tidwell、Gerald H. Kim 和 Wayne D. Kimura。利用双干涉仪高效生成径向偏振激光束。Applied Optics, 32(27):5222，1993年9月。[28]Shiyao Fu、Chunqing Gao、Tonglu Wang、Shikun Zhang 和 Yanwang Zhai。在多个衍射级次中同时生成具有选择性空间态的多个完美偏振涡旋。Optics Letters，41(23):5454，2016年12月。[29] Filippo Cardano、Ebrahim Karimi、Sergei Slussarenko、Lorenzo Marrucci、Corrado de Lisio 和 Enrico Santamato。由具有不同拓扑荷的q板生成的矢量涡旋光束偏振图样。Applied Optics，51(10):C1，2012年4月。

[30]Jinna He、Mingli Wan、Xiaopeng Zhang、Shuqing Yuan、Liufang Zhang 和 Junqiao Wang。利用高效率宽带介电超表面生成紫外完美涡旋光束。《光学快报》，30(4):4806，2022年2月。[31] Arabinda Mandal、Satyajit Maji 和 Maruthi M. Brundavanam。任意阶稳定柱面完美矢量涡旋光束的共路生成。《光学通信》，469:125807，2020年8月。[32] Gilad M. Lerman、Liron Stern 和 Uriel Levy。混合偏振矢量光束的生成与紧聚焦。《光学快报》，18(26):27650，2010年12月。[33] Mark Kasperczyk、Steven Person、Duarte Ananias、Luis D. Carlos 和 Lukas Novotny。光学频率下磁偶极跃迁的激发。《物理评论快报》，114(16):163903，2015年4月。[34] L. Novotny、M. R. Beversluis、K. S. Youngworth 和 T. G. Brown。利用单分子探测纵向场模。《物理评论快报》，86(23):5251–5254，2001年6月。[35] Xi-Lin Wang、Jing Chen、Yongnan Li、Jianping Ding、Cheng-Shan Guo 和 Hui-Tian Wang。由偏振旋度产生光学轨道角动量。《物理评论快报》，105(25):253602，2010年12月。[36] Rajesh Singh 和 James W. Lillard。基于纳米颗粒的靶向药物递送。《实验与分子病理学》，86(3):215–223，2009年6月。[37] John McPhillips、Antony Murphy、Magnus P. Jonsson、William R. Hendren、Ronald Atkinson、Fredrik H¨o¨ok、Anatoly V. Zayats 和 Robert J. Pollard。利用等离激元纳米管阵列实现高性能生物传感。ACS Nano，4(4):2210–2216，2010年4月。[38] Francesco De Angelis、Mario Malerba、Maddalena Patrini、Ermanno Miele、Gobind Das、Andrea Toma、Remo Proietti Zaccaria 和 Enzo Di Fabrizio。三维中空纳米结构：多功能等离激元学的构建模块。《纳米快报》，13(8):3553–3558，2013年8月。[39] Bin Sheng Wong、Sia Lee Yoong、Anna Jagusiak、Tomasz Panczyk、Han Kiat Ho、Wee Han Ang 和 Giorgia Pastorin。用于递送小分子药物的碳纳米管。《高级药物递送评论》，65(15):1964–2015，2013年12月。[40] S. R. Sershen、S. L. Westcott、N. J. Halas 和 J. L. West。用于光热调控药物递送的温敏聚合物-纳米壳复合材料。《生物医学材料研究杂志》，51(3):293–298，2000年6月。[41] Pan Wang、Mazhar E. Nasir、Alexey V. Krasavin、Wayne Dickson、Yunlu Jiang 和 Anatoly V. Zayats。用于纳米化学与传感的等离激元超材料。《化学研究综述》，52(11):3018–3028，2019年11月。[42] Matthew J. Kale、Talin Avanesian 和 Phillip Christopher。等离激元纳米结构的直接光催化。《ACS催化》，4(1):116–128，2014年1月。[43] Craig F. Bohren 和 Donald R. Huffman。小颗粒对光的吸收与散射。Wiley，纽约，Wiley专业版，1998年。[44] H. C. van der Hulst。小颗粒的光散射。Dover Publications Inc，纽约，2003年。[45] J. E. Sipe。表面光学的新格林函数形式主义。《美国光学学会杂志B辑》，4(4):481，1987年4月。[46] Lukas Novotny 和 Bert Hecht。《纳米光学原理》。剑桥大学出版社，纽约，第1版，2006年。[47] J. Enrique V´azquez-Lozano、Alejandro Mart´ınez 和 Francisco J. Rodr´ıguez-Fortu˜no。超越偶极近似的近场方向性：电四极矩与高阶多极角谱。《物理评论应用》，12(2):024065，2019年8月。[48] Andrew F. Peterson、Scott L. Ray 和 Raj Mittra。电磁学计算方法。IEEE，1997年。[49] B. E. A. Saleh 和 M. C. Teich。《光子学基础》。约翰·威立父子公司，霍博肯，新泽西州，第2版，2007年。[50] K. Y. Bliokh、F. J. Rodr´ıguez-Fortu˜no、F. Nori 和 A. V. Zayats。光的自旋-轨道相互作用。Nature Photonics，9(12):796–808，2015年12月。

[51] Timo A Nieminen、Alexander B Stilgoe、Norman R Heckenberg 和 Halina Rubinsztein-Dunlop。强聚焦高斯光束的角动量。Journal of Optics A: Pure and Applied Optics，10(11):115005，2008年11月。[52] K. T. Gahagan 和 G. A. Swartzlander。粒子的光学涡旋捕获。Optics Letters，21(11):827，1996年6月。[53] Yiqiong Zhao、J. Scott Edgar、Gavin D. M. Jeffries、David McGloin 和 Daniel T. Chiu。强聚焦光束中的自旋到轨道角动量转换。《物理评论快报》，99(7):073901，2007年8月。[54] J. S. Eismann、L. H. Nicholls、D. J. Roth、M. A. Alonso、P. Banzer、F. J. Rodr´ıguez-Fortu˜no、A. V. Zayats、F. Nori 和 K. Y. Bliokh。非偏振光的横向自旋。Nature Photonics，15(2):156–161，2021年2月。[55] Kun Li、Nathaniel J. Hogan、Matthew J. Kale、Naomi J. Halas、Peter Nordlander 和 Phillip Christopher。平衡近场增强、吸收与散射，实现高效天线–反应器等离激元光催化。《纳米快报》，17(6):3710–3717，2017年6月。[56] Xingguang Liu、Junqing Li、Qiang Zhang 和 Mamo Gebeyehu Dirbeba。紧聚焦矢量偏振空心光束诱导的光学力和力矩实现手性对映体分离。Physical Chemistry Chemical Physics，21(28):15339–15345，2019年。[57]Akhlesh Lakhtakia。由各向异性阻抗平面界定的半空间的格林函数与布儒斯特条件。International Journal of Infrared and Millimeter Waves，13(2):161–170，1992年2月。[58] N. Rotenberg、M. Spasenovi´c、T. L. Krijger、B. le Feber、F. J. Garc´ıa de Abajo 和 L. Kuipers。亚波长孔的等离激元散射。《物理评论快报》，108(12):127402，2012年3月。[59] Michela F. Picardi、Alejandro Manjavacas、Anatoly V. Zayats 和 Francisco J. Rodr´ıguez-Fortu˜no。圆偏振电偶极子和磁偶极子产生的单向倏逝波耦合：角谱方法。《物理评论B》，95(24):245416，2017年6月。[60]Jack J. Kingsley-Smith、Michela F. Picardi、Lei Wei、Anatoly V. Zayats 和 Francisco J. Rodr´ıguez-Fortu˜no。来自近场方向性的平面结构中的光学力。《物理评论B》，99(23):235410，2019年6月。[61]Stephen M Barnett。光学角动量通量*。Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics，4(2):S7–S16，2002年4月。[62] Jun Chen、Jack Ng、Kun Ding、Kin Hung Fung、Zhifang Lin 和 C. T. Chan。负光学力矩。Scientific Reports，4(1):6386，2015年5月。[63] Pan Wang、Alexey V. Krasavin、Francesco N. Viscomi、Ali M. Adawi、Jean-Sebastien G. Bouillard、Lei Zhang、Diane J. Roth、Limin Tong 和 Anatoly V. Zayats。超粒子：以双曲涂层修饰纳米物体。Laser & Photonics Reviews，12(11):1800179，2018年11月。[64]Tianhua Feng、Yi Xu、Wei Zhang 和 Andrey E. Miroshnichenko。理想磁偶极散射。《物理评论快报》，118(17):173901，2017年4月。[65] R Margoth C´ordova-Castro、Alexey V Krasavin、Mazhar E Nasir、Anatoly V Zayats 和 Wayne Dickson。基于纳米锥的等离激元超材料。Nanotechnology，30(5):055301，2019年2月。[66] Andrey B. Evlyukhin、Carsten Reinhardt 和 Boris N. Chichkov。离散偶极子近似中非球形纳米粒子的多极光散射。《物理评论B》，84(23):235429，2011年12月。[67] J. Aizpurua、P. Hanarp、D. S. Sutherland、M. K¨all、Garnett W. Bryant 和 F. J. Garc´ıa de Abajo。金纳米环的光学性质。《物理评论快报》，90(5):057401，2003年2月。[68] A. Mary、D. M. Koller、A. Hohenau、J. R. Krenn、A. Bouhelier 和 A. Dereux。可见光范围内环面形金属纳米粒子的光学吸收。《物理评论B》，76(24):245422，2007年12月。[69]Chizuko M. Dutta、Tamer A. Ali、Daniel W. Brandl、Tae-Ho Park 和 Peter Nordlander。金属环面的等离激元性质。《化学物理学杂志》，129(8):084706，2008年8月。

[70] Hua Yu Feng、Feng Luo、Renata Kekesi、Daniel Granados、David Meneses-Rodr´ıguez、Jorge M. Garc´ıa、Antonio Garc´ıa-Mart´ın、Gaspar Armelles 和 Alfonso Cebollada。《宽波长范围内具有可调磁光活性的新型架构：磁等离激元纳米环》。《先进光学材料》，2(7):612–617，2014年7月。[71]马克斯·玻恩和埃米尔·沃尔夫。《光学原理：光的电磁理论、传播、干涉与衍射》。培格曼出版社，牛津，第6版，1980年。[72] P. B. Johnson 和 R. W. Christy。贵金属的光学常数。*Physical Review B*，6(12):4370–4379，1972年12月。[73] James Millen、Tania S Monteiro、Robert Pettit 和 A Nick Vamivakas。悬浮粒子的光力学。*Reports on Progress in Physics*，83(2):026401，2020年2月。[74] Stefan Kuhn、Alon Kosloff、Benjamin A. Stickler、Fernando Patolsky、Klaus Hornberger、Markus Arndt 和 James Millen。悬浮硅纳米棒的完全旋转控制。《*Optica*》，4(3):356，2017年3月。[75] Benjamin A Stickler、Birthe Papendell、Stefan Kuhn、Bj¨orn Schrinski、James Millen、Markus Arndt 和 Klaus Hornberger。利用纳米转子探测宏观量子叠加态。《新物理学杂志》，20(12):122001，2018年12月。[76] BEAMS软件包，链接见 *https://doi.org/10.18742/21975998*，2023年。

补充信息

开发我们的软件包需要处理许多编程技术细节，以确保结果准确并提升性能。正文中的方法部分介绍了整体流程，而本文档第1至第4节则详细说明了所考虑的各种技术问题。第5节定义了本文中使用的偏振基矢量。第6节补充说明了主论文中核壳粒子结果所涉及的理论力和力矩的计算方法。

在第 1—3 节中，我们将讨论构建该软件包时遇到的各种技术问题，以及这些问题的解决方法。我们相信，对于任何希望采用我们的方法创建自己的软件的读者而言，这些信息可能会有所帮助。在第 4 节中，我们将进一步介绍主论文中核壳粒子结果所涉及的理论力和力矩的计算方法。

1. k空间网格

角谱方法本质上是对平面波分量进行求和，而每个分量都具有不同的波矢、偏振、振幅和相位。在单色情况下，且不存在倏逝场时，三维空间中平面波的所有可能传播方向（波矢）都可以映射到一个球体的表面上（我们称之为 k 球面）。

为了根据平面波模拟（PWS）生成入射到轴对称结构上的光束，必须对光束的角谱进行离散采样。采样采用规则的球面网格，如图 S1 所示，因为这可以降低特定方向上由于欠采样而产生伪影的可能性。波矢分量（k_x，k_y，k_z）根据球面网格坐标（ρ，θ，ϕ）计算，其中 ρ 保持固定，角度定义为：

$$\theta = \cos^{-1}\left(\frac{k_z}{k}\right),$$
$$\phi = \tan^{-1}\left(\frac{k_y}{k_x}\right). \tag{S1}$$

θ 和 ϕ 中的等间距采样点数量分别定义为 N_θ 和 N_ϕ，它们是用户定义的输入参数。

建立此采样网格后，可以进行优化以加快计算速度。如果光束的角谱高度集中在 k_x-k_y 平面上的一个小区域内，可能需要为 N_θ 和 N_ϕ 设置较大的值，才能充分解析该光束；但这也会导致在角谱强度接近零的区域产生大量采样点。每个采样点都会增加计算时间，但这些近零采样点对最终结果的贡献微乎其微，因此可以安全地跳过。跳过这些可忽略不计的

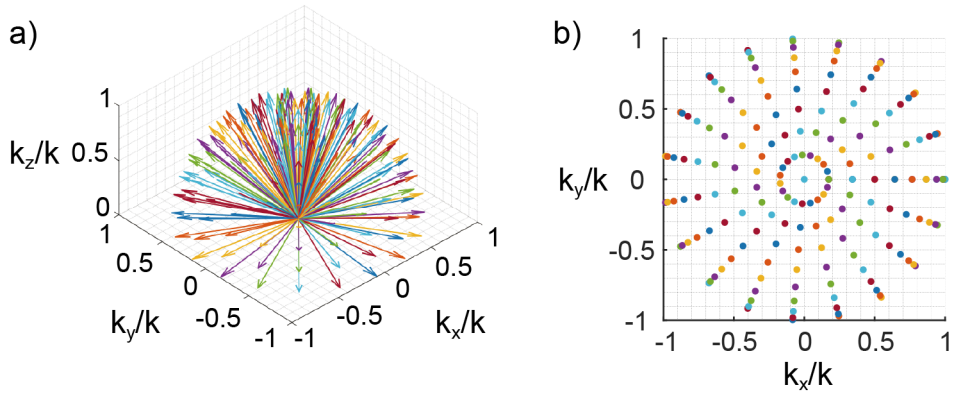


图 S1。 a）使用球面网格对平面波取向进行规则采样。箭头勾勒出 k 球面的（上半球）表面。箭头采用随机颜色以提供对比。b）将同一个球面网格映射到k_x-k_y 平面上。

采样点的做法是：为 $MATLAB$ 软件包新增一个可选输入裁剪参数 C，其取值为 $0 \leq C < 1$。对于角谱 $\mathcal{A}$，采样点可表示为 $\mathcal{A}_{ij}$。随后可使用逻辑 if 语句检查是否应跳过 $\mathcal{A}_{ij}$，方法是计算以下不等式：

$$\frac{\mathcal{A}_{ij}}{\max\{|\mathcal{A}|\}} \geq C. \tag{S2}$$

如果该陈述为假，则认为 $\mathcal{A}_{ij}$ 可以忽略并跳过。如果为真，则将 $\mathcal{A}_{ij}$纳入 $\mathcal{A}$的积分中。换言之，$C = 0.01$ 意味着角谱中所有数值小于峰值 1% 的点都将被跳过。如果 $C = 0$, 则 k 空间网格中的所有点都会被纳入。

2. 角谱的旋转

从具有 z-传播方向的光束开始，随后可以旋转角谱，使其匹配所需的光束传播方向；这一过程等效于旋转↔k 球面。我们使用众所周知的矩阵 $\mathbf{R}$，围绕给定的归一化旋转轴 $\hat{\mathbf{u}} = (u_x, u_y, u_z)$进行三维旋转，旋转角的一般表示为 Θ,

$$\overleftrightarrow{\mathbf{R}} = \begin{pmatrix} \cos(\Theta) + u_x^2 g(\Theta) & u_x u_y g(\Theta) - u_z \sin(\Theta) & u_x u_z g(\Theta) + u_y \sin(\Theta) \\ u_y u_x g(\Theta) + u_z \sin(\Theta) & \cos(\Theta) + u_y^2 g(\Theta) & u_y u_z g(\Theta) - u_x \sin(\Theta) \\ u_z u_x g(\Theta) - u_y \sin(\Theta) & u_z u_y g(\Theta) + u_x \sin(\Theta) & \cos(\Theta) + u_z^2 g(\Theta) \end{pmatrix} \tag{S3}$$

其中 $g(\Theta) = (1 - \cos(\Theta))$，以及旋转一般矢量场的恒等式,

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}) = \overleftrightarrow{\mathbf{R}}\, \mathbf{V}^{\hat{\mathbf{K}} \| \hat{\mathbf{z}}} \left(\overleftrightarrow{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{r} \right), \tag{S4}$$

其中，$\mathbf{V}^{\hat{\mathbf{K}} \| \hat{\mathbf{z}}}$ 是沿 z轴传播、由实空间坐标$\mathbf{r}$描述的矢量场，而$\mathbf{V}$ 是所需的矢量场。

计算入射到散射结构上的光束所产生的场时，角谱 $\mathcal{A}$ 会被数值采样为一组离散点。 $\mathcal{A}$中的每个点都对应一个具有特定入射$\mathbf{k}$的平面波谱。因此，必须将每个点映射到相关仿真数据$\mathbf{E}_{\mathrm{PWS}}$中入射平面波的$\mathbf{k}$ 。这种映射通过两次矢量场旋转实现，同时保持仿真的偏振态不变。采用以下约定可简化这些旋转：所有数值平面波谱原始数据中的入射平面波都位于 xz平面内，并且仿真中的任何材料结构都必须绕 z轴具有连续旋转对称性。因此，对于 θ 旋转（结构为球形时），旋转轴为 y轴；随后，对于 ϕ 旋转，旋转轴为轴对称的 z轴。如果结构不具备球对称性，则必须针对θ 的所有取值对平面波进行仿真，然后将所有结果绕 z轴旋转，以匹配所需的ϕ 取值并完成$\mathbf{k}$空间中的积分。

3. 光束类别的角谱

由于我们求取光束角谱的方法总是从光束沿着 z传播开始，因此预先计算光学中常用的几类光束的角谱会很方便。这些角谱见表S1。横向平面内具有均匀偏振的光束，其偏振表示为 $\boldsymbol{\eta}_{\perp} = \eta_x \hat{\mathbf{x}} + \eta_y \hat{\mathbf{y}}$。光束腰为 w，函数 $H_l(x)$ 和$L_m^l(x)$ 分别对应厄米多项式和拉盖尔多项式，其自变量为 x，阶数分别为 l 和 m。这些表达式的推导

表S1。 由公式（5）得到的各种傍轴光束在焦平面内的横向电场分布及其对应的角谱。光束轴用$\mathbf{K}$表示，sgn(l) 是 l 的符号函数（即，当 $l>1$时，sgn(l) $=+1$；当 $l<1$时，sgn(l) $=-1$。拉盖尔-高斯角谱的表达式在 $l<0$ 和 $m>0$时无效。

光束类型	$\mathbf{E}_{\perp}^{\hat{\mathbf{K}}\parallel\hat{\mathbf{z}}}$	$\mathcal{F}_{\perp}^{\hat{\mathbf{K}}\parallel\hat{\mathbf{z}}}$
高斯光束	$\boldsymbol{\eta}_{\perp} e^{-\frac{x^2+y^2}{w^2}}$	$\boldsymbol{\eta}_{\perp} \frac{w^2}{4\pi} e^{-\frac{w^2(k_x^2+k_y^2)}{4}}$
厄米-高斯光束	$\boldsymbol{\eta}_{\perp} H_l\left(\frac{\sqrt{2}x}{w}\right) H_m\left(\frac{\sqrt{2}y}{w}\right) e^{-\frac{x^2+y^2}{w^2}}$	$\boldsymbol{\eta}_{\perp} \frac{w^2}{4\pi} H_l\left(\frac{k_x w}{\sqrt{2}}\right) H_m\left(\frac{k_y w}{\sqrt{2}}\right) e^{-\frac{i\pi}{2}(l+m)} e^{-\frac{w^2(k_x^2+k_y^2)}{4}}$
拉盖尔-高斯	$\boldsymbol{\eta}_{\perp} \left(\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{w}\right)^{\lvert l\rvert} L_m^l\left(\frac{2(x^2+y^2)}{w^2}\right) e^{il\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right)} e^{-\frac{x^2+y^2}{w^2}}$	$\boldsymbol{\eta}_{\perp} \frac{w^2}{4\pi} L_m^l\left(\frac{w^2(k_x^2+k_y^2)}{2}\right) (-1)^m \left(-\frac{iw}{2}(k_x + \mathrm{sgn}(l)\, ik_y)\right)^l e^{-\frac{w^2(k_x^2+k_y^2)}{4}}$
方位角	$\frac{2\sqrt{2}}{w} e^{-\frac{x^2+y^2}{w^2}} (y\hat{\mathbf{x}} - x\hat{\mathbf{y}})$	$-\frac{iw^3}{2\sqrt{2}\pi} e^{-\frac{w^2(k_x^2+k_y^2)}{4}} (k_y\hat{\mathbf{x}} - k_x\hat{\mathbf{y}})$
径向	$\frac{2\sqrt{2}}{w} e^{-\frac{x^2+y^2}{w^2}} (x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}})$	$-\frac{iw^3}{2\sqrt{2}\pi} e^{-\frac{w^2(k_x^2+k_y^2)}{4}} (k_x\hat{\mathbf{x}} + k_y\hat{\mathbf{y}})$

请注意，所有这些角谱 $\mathcal{F}_{\perp}^{\hat{\mathbf{K}}\parallel\hat{\mathbf{z}}}$ 之后都可以转换为分段角谱 $\mathcal{A}$，并用于主文中的公式（1）来计算非傍轴场。对于所有这些光束，都可以使用主文中的公式（7）重构纵向场。

4. 偏振基分解

主文中的公式（2）展示了如何将光束的角谱分解为具有两种正交偏振态的平面波。此步骤使用了正交的p 和 s 偏振基单位矢量 $\hat{\mathbf{e}}_p$ 和 $\hat{\mathbf{e}}_s$，其定义如下：

$$\hat{\mathbf{e}}_p = \begin{pmatrix} \cos(\theta)\cos(\phi) \\ \cos(\theta)\sin(\phi) \\ \sin(\theta) \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{k\,k_t} \begin{pmatrix} k_x\,k_z \\ k_y\,k_z \\ -k_t^2 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\mathbf{e}}_s = \begin{pmatrix} -\sin(\phi) \\ \cos(\phi) \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{k_t} \begin{pmatrix} -k_y \\ k_x \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{S5}$$

这些是球坐标中的常用极向和方位角单位向量。在我们的方法中，这些向量用于将三维矢量场 $\mathcal{A}$ 分解为主文公式（2）中出现的复标量场 A_p 和 A_s。具体计算通过点积完成：$A_p = \mathcal{A} \cdot \hat{\mathbf{e}}_p$ 和 $A_s = \mathcal{A} \cdot \hat{\mathbf{e}}_s$。请注意，$\mathcal{A}$ 必须是包含纵向分量的完整三维角谱。如果缺少纵向分量，那么对于强聚焦光束，A_p, A_s 将不准确。

5. 实空间网格

在数值模拟（例如平面波谱）中，电磁场通常由离散实空间立方网格采样。我们的方法需要旋转该场，并最终将该场的多个旋转版本相加。对于离散矢量场，这些旋转并不简单，因为如果将立方网格旋转一个小角度，大多数网格点都无法与原有点对齐。这意味着离散场无法相加，因为xyz 坐标会不匹配。要对主文公式（3）中的角谱进行积分，就必须进行这种求和。从本质上说，所有旋转后的电磁场数据都必须定义在同一个坐标网格上。

我们的方法是沿矢量场旋转方向的相反方向，旋转原始实空间网格$\mathbf{r}_{\mathrm{PWS}}$，

$$\mathbf{r}^{\mathrm{R}} = \overleftrightarrow{\mathbf{R}}_{\phi}(-\phi)\,\overleftrightarrow{\mathbf{R}}_{\theta}(-\theta)\,\mathbf{r}_{\mathrm{PWS}}. \tag{S6}$$

需要注意的是，必须选择旋转轴和旋转顺序，以保持任何旋转后场的偏振态（即，必须保持极角单位矢量 $\hat{\mathbf{e}}_p$ 和方位角单位矢量 $\hat{\mathbf{e}}_s$ 不变）。对于接收平面波谱数据且平面波沿 z 入射的软件包，首先绕负 y 轴进行 θ 旋转，随后绕 z 轴进行 ϕ 旋转。然后，将原始未旋转的矢量场 $\mathbf{E}_{\mathrm{PWS}}$ 插值到这个反向旋转后的网格 $\mathbf{r}^{\mathrm{R}}$上，使得 $\mathbf{E}_{\mathrm{PWS}}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{E}_{\mathrm{PWS}}(\mathbf{r}^{\mathrm{R}})$。只要网格分辨率足够达到亚波长级别，研究发现线性回归能够提供足够准确的插值结果。随后，将插值后的场和新网格正向旋转到所需方向。这样可确保最终网格与原始平面波谱网格完全相同，从而能够对所有各种旋转后的场进行积分。

这些实空间旋转还会带来另一个问题。由于模拟场是在具有给定尺寸的模拟盒上计算的，网格角落附近的一些数据点旋转后可能会落到原始网格边界之外。这可能导致插值算法在该区域进行不准确的外推，并使这些数据点产生较大误差。为弥补这一问题，最终积分场所用的网格必须小于模拟网格，以确保较小网格经过任何旋转后仍落在模拟网格范围内。用户提供其希望用于光束的坐标（即光束网格），软件包则利用模拟数据（定义在模拟网格上）生成光束。这两个网格彼此无关，而线性插值则在两者之间起到桥梁作用。

由于旋转始终围绕网格中心进行，立方体上的点到旋转轴的最远距离出现在该点位于顶点处时。若光束的网格是边长为 d_{beam} 的立方体，而仿真网格是边长为 d_{PWS} 的立方体，则必须满足以下不等式，

$$d_{\mathrm{PWS}} \geq \sqrt{3}\, d_{\mathrm{beam}}. \tag{S7}$$

这对应于立方体顶点在所有可能的三维旋转下描绘出的球面轨迹。如果不满足这一关系，光束场分布的顶点就容易出现较大的误差。

6. 核壳粒子上的理论力和力矩

正文中的图 1d 展示了采用我们的光束生成方法可以获得的一些光力和力矩结果。由于所研究的粒子是具有球对称性的亚波长物体，因此采用米氏理论作为替代计算方法，以便比较并评估结果的可靠性。米氏理论是一种广泛用于散射问题的技术，通过一系列电米氏系数和磁米氏系数来描述球体的散射行为， a_n 和 b_n分别对应电米氏系数和磁米氏系数 [43,44]。当粒子的尺寸为亚波长时（如图 1d 所示），一阶偶极系数 a_1 和 b_1 占主导地位。电偶极极化率和磁偶极极化率 α_e 和 α_m 分别与米氏系数的关系为，

$$\alpha_e = a_1 \frac{i6\pi\varepsilon}{k^3}, \qquad \alpha_m = b_1 \frac{i6\pi}{k^3}. \tag{S8}$$

根据极化率，可以分别使用以下公式计算电偶极矩$\mathbf{p}$ 和$\mathbf{m}$ 磁偶极矩，

$$\mathbf{p} = \alpha_e \mathbf{E}, \qquad \mathbf{m} = \alpha_m \mathbf{H}. \tag{S9}$$

在本节中，$\mathbf{E}$ 和$\mathbf{H}$ 严格指入射到粒子上的场，而不是包含粒子散射在内的总场。

随后可使用以下方程计算正文图 1 所示球形粒子所受的理论力和力矩，分别记为 $\mathbf{F}_{\mathrm{th}}$ 和$\mathbf{N}_{\mathrm{th}}$ ，

$$\langle \mathbf{F}_{\mathrm{th}} \rangle = \frac{1}{2}\mathfrak{Re}\left\{ (\nabla \otimes \mathbf{E})\mathbf{p}^* + \mu(\nabla \otimes \mathbf{H})\mathbf{m}^* - \frac{k^4}{6\pi\varepsilon c}(\mathbf{p} \times \mathbf{m}^*) \right\}, \tag{S10}$$

$$\langle \mathbf{N}_{\mathrm{th}} \rangle = \frac{1}{2}\mathfrak{Re}\left\{ \left(\mathbf{p}^* \times \mathbf{E} + \mu\mathbf{m}^* \times \mathbf{H}\right) - \frac{k^3}{6\pi}\left(\frac{1}{\varepsilon}\mathfrak{Im}\{\mathbf{p}^* \times \mathbf{p}\} + \mu\mathfrak{Im}\{\mathbf{m}^* \times \mathbf{m}\} \right) \right\}. \tag{S11}$$

在这种情况下，$\mathbf{F}_{\mathrm{th}}$ 和$\mathbf{N}_{\mathrm{th}}$ 唯一非零的分量是$\hat{\mathbf{z}}$分量，其大小分别为 $F_{\mathrm{th}} = 0.959$ nN/W 和 $N_{\mathrm{th}} = 44.0$ aNm/W（按光束功率归一化后）。