第 31 卷 第 4 期
2004 年 4 月

中 国 激 光
CHINESE JOURNAL OF LASERS

Vol. 31, No. 4
April, 2004

文章编号: 0258-7025(2004)04-0417-04

标量 PML-FDTD 算法在弱导光器件仿真中的应用

孔繁敏, 李 康, 刘 新, 吴 涛, 郭毅峰
(山东大学信息科学与工程学院, 山东 济南 250100)

摘要 将标量时域有限差分法(FDTD)应用于弱导光器件的计算机仿真中,实现了标量时域有限差分法的理想匹配层(PML)边界条件,并对平行介质带定向耦合器进行了数值模拟和验证,所得结果与理论值非常一致。对平面光波导计算机辅助设计(CAD)将具有实际意义,可用于分析任意结构的弱导光器件。

关键词 导波光学;理想匹配层;标量时域有限差分法;弱导光器件

中图分类号 TN 252 **文献标识码** A

Application of the Scalar PML-FDTD Method for Simulation of Weakly Guiding Optical Devices

KONG Fan-min, LI Kang, LIU Xin, WU Tao, GUO Yi-feng
(*School of Information Science and Engineering, Shandong University, Jinan, Shandong* 250100, *China*)

Abstract The scalar finite-difference time-domain (FDTD) method is used in the simulation of weakly guiding optical devices. The perfectly matched layer (PML) boundary condition for the scalar FDTD is implemented and verified by the simulation for the parallel-slab directional coupler. It is shown that the result is in good agreement with the exact solutions. This method can be used as a powerful CAD tool in the analysis of weakly guiding optical devices.

Key words guide-wave optics; perfectly matched layer; scalar finite-difference time-domain method; weakly guiding optical devices

1 引 言

建模和仿真对于光波导器件精确性能预测以及最优化设计十分重要。目前,光波导器件通常采用的数值方法为光束传播法(BPM)[1,2]和时域有限差分法(FDTD)[3]。光束传播法方法计算简单、速度快,但由于它采用了菲涅耳近似,使得在常规的光束传播法中,忽略了由于光波导轴向的不均匀性而引起的反射波,而这些反射波在那些作为反射器的光波导器件中是不能被省略的。尽管有些光束传播法做了某些改进,如双向光束传播法考虑了轴向不均匀性造成的反射,但它的新机制是采用不明确的重复计算直至获得满意的自一致解。近年来,直接对麦克斯韦方程求解的时域有限差分算法已被应用于光波导器件的仿真中。矢量时域有限差分法实现起来非常简便,但计算量大,速度慢,它特别适用于那些电磁波和几何结构相互作用强烈的复杂导波结构的建模。事实上,光波导大多为弱导波结构,黄卫平等提出了一种简化的标量时域有限差分法[4],他直接利用时域有限差分方法对标量波动方程求解,得出标量波动方程的时域有限差分算法。数值验证表明,利用该种技术对大多数光波导结构的分析和仿真是满足需要的。

收稿日期:2002-12-12; 收到修改稿日期:2003-03-13

基金项目:山东大学青年基金(编号:11170051310029)资助项目。

作者简介:孔繁敏(1969—),男,博士,副教授,主要从事微波器件、光器件的计算机仿真与设计。E-mail:kongfm@sdu.edu.cn

在应用时域有限差分算法处理电磁问题时，需要人为设置吸收边界条件来截断计算空间。吸收边界的效果直接关系到时域有限差分计算的正确性和精确性，是影响时域有限差分计算品质的决定因素。J. P. Berenger 于 1994 年首先提出了二维理想匹配层(PML)吸收边界条件的概念[5]，与传统的二阶 Mur 吸收边界条件相比[6]，理想匹配层吸收边界条件可提高精度 40 dB 左右，是目前最好的吸收边界条件。理想匹配层吸收边界条件是针对矢量时域有限差分算法提出的，并不能直接用于标量时域有限差分算法。最近，M. A. Alsunaidi 等导出了理想匹配层媒质中波动方程的表达式[7]，但它忽略了电导率是空间坐标的函数。

本文实现了标量时域有限差分算法的理想匹配层边界条件，并对平行介质带定向耦合器进行了数值模拟和验证。所得结果与理论值非常一致，证明了理想匹配层边界条件下标量时域有限差分算法应用于弱导光器件分析的有效性。本文方法对光波导计算机辅助设计(CAD)将具有实际意义，可用于分析任意结构的弱导光器件。

2 标量时域有限差分法

光波导大多为弱导波结构，对许多应用而言，标量分析就能满足要求。

在标量近似下，电场成为线性极化的，它满足标量波动方程

$$\nabla^2 E - \mu\varepsilon \frac{\partial^2}{\partial t^2} E = 0 \tag{1}$$

其中，ε，μ 分别为介质中介电常数和磁导率分布。光波导器件中使用材料一般为低损耗介质，其磁导率 $\mu = \mu_0$。

以下仅讨论适用于平面光波导分析的二维情况。

对于(1)式，在时域和空间都采用具有二阶精度的中心差分法近似，可以得到二维标量时域有限差分法的差分格式

$$E^{n+1}(i,j) = -E^{n-1}(i,j) + 2E^n(i,j) + \frac{\Delta t^2}{\mu_0\varepsilon} \times \left[\frac{E^n(i+1,j) + E^n(i-1,j) - 2E^n(i,j)}{\Delta x^2} + \frac{E^n(i,j+1) + E^n(i,j-1) - 2E^n(i,j)}{\Delta y^2} \right] \tag{2}$$

由(2)式可知，在 $t = (n+1)\Delta t$ 时刻，位于坐标 $(i\Delta x, j\Delta y)$ 的场值可以由该点和其相邻点的前两个时间步的场值明确地表示出来。

在标量时域有限差分法的差分格式中，为了计算每一时间步的电场值，需要前两个时间步的场值，但由于只包含一个未知量，故能大大提高计算效率和节约存储空间。

为了使(2)式达到数值稳定，时间步长 Δt 应满足

$$\Delta t \leqslant \frac{1}{v_{\max}\sqrt{(1/\Delta x)^2 + (1/\Delta y)^2}} \tag{3}$$

其中，$v_{\max}$ 为计算空间中光的最大速度。

3 理想匹配层吸收边界条件

对于光波沿固定方向传播的平面光波导，其侧面的电磁波迅速衰减，可利用 Mur 吸收边界进行简单处理，但在传播方向上的吸收边界必须具有良好的性能，可选用理想匹配层吸收边界条件来截断。

对于时谐场，在伸张坐标系(The Stretched Coordinate)中[8~10]，(1)式可表示为

$$\widetilde{\nabla}_S^2 \widetilde{E} - \mu_0\varepsilon(j\omega)^2 \widetilde{E} = 0 \tag{4}$$

式中，$\widetilde{\nabla}_S = \vec{a}_x \frac{1}{S_x}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{a}_y \frac{1}{S_y}\frac{\partial}{\partial y}$。

对于光波沿 x 方向传播的平面光波导，为了能使端面上的光波被吸收，选取

$$S_x = \frac{1}{1 + \sigma_x/j\omega\varepsilon}, \quad S_y = 1 \tag{5}$$

将式(5)代入式(4)中得

$$\frac{1}{1+\sigma_x/j\omega\varepsilon}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{1+\sigma_x/j\omega\varepsilon}\frac{\partial \widetilde{E}}{\partial x}\right) + \frac{\partial^2 \widetilde{E}}{\partial y^2} = \mu_0\varepsilon(j\omega)^2 \widetilde{E} \tag{6}$$

式(6)为理想匹配层媒质中标量波动方程的频域形式。

为了在时域中表示式(6)，可引入辅助变量 V_1，V_2，其定义为

$$j\omega V_1 = \frac{1}{1+\sigma_x/j\omega\varepsilon}\frac{\partial \widetilde{E}}{\partial x}$$

$$j\omega V_2 = \frac{1}{1+\sigma_x/j\omega\varepsilon}\frac{\partial}{\partial x}(j\omega V_1) \tag{7}$$

将式(7)代入式(6)得

$$j\omega V_2 + \frac{\partial^2 \widetilde{E}}{\partial y^2} = \mu_0\varepsilon(j\omega)^2 \widetilde{E} \tag{8}$$

将式(7)，(8)中的 $j\omega$ 用 $\partial/\partial t$ 代替，则得到理想匹配层媒质中标量波动方程的时域形式

$$\frac{\partial V_1}{\partial t} + \frac{\sigma_x}{\varepsilon}V_1 = \frac{\partial E}{\partial t} \tag{9a}$$

$$\frac{\partial V_2}{\partial t} + \frac{\sigma_x}{\varepsilon}V_2 = \frac{\partial^2 V_1}{\partial x \partial t} \tag{9b}$$

$$\mu_0\varepsilon\frac{\partial^2 E}{\partial t^2}=\frac{\partial V_2}{\partial t}+\frac{\partial^2 E}{\partial y^2} \tag{9c}$$

对于(9)式采用中心差分法进行近似，可以得到理想匹配层媒质中标量波动方程的差分格式

$$V_1^{n+\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2},j\right)=\frac{1-h(i+1/2,j)}{1+h(i+1/2,j)}\times V_1^{n-\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2},j\right)+\frac{\Delta t/\Delta x}{1+h(i+1/2,j)}\times\left[E_Z^n(i+1,j)-E_Z^n(i,j)\right] \tag{10a}$$

$$V_2^{n+\frac{1}{2}}(i,j)=\frac{1-h(i,j)}{1+h(i,j)}\times V_2^{n-\frac{1}{2}}(i,j)+\frac{1/\Delta x}{1+h(i,j)}\times\left[V_1^{n+\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2},j\right)-V_1^{n+\frac{1}{2}}\left(i-\frac{1}{2},j\right)-V_1^{n-\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2},j\right)+V_1^{n-\frac{1}{2}}\left(i-\frac{1}{2},j\right)\right] \tag{10b}$$

$$E^{n+1}(i,j)=-E^{n-1}(i,j)+2E^n(i,j)+\frac{(\Delta t/\Delta y)^2}{\mu_0\varepsilon(i,j)}\times\left[E^n(i,j+1)+E^n(i,j-1)-2E^n(i,j)\right]+\frac{\Delta t}{\mu_0\varepsilon(i,j)}\times\left[V_2^{n+\frac{1}{2}}(i,j)-V_2^{n-\frac{1}{2}}(i,j)\right] \tag{10c}$$

其中，$h(i,j)=\dfrac{\sigma_x(i,j)\times\Delta t}{2\varepsilon(i,j)}$。

实际计算中，理想匹配层需要设置一定的厚度，其电导率 σ 的分布可采用以下形式

$$\sigma(\rho)=\sigma_{\max}(\rho/\delta)^n \tag{11}$$

式中 $\sigma_{\max}$ 为最大电导率，ρ 为相对分界面的理想匹配层分布厚度，δ 为理想匹配层的厚度，n 为电导率分布阶数。$\sigma_{\max}$ 的选取可根据如下经验公式

$$\sigma_{\max}=-\frac{(n+1)\varepsilon c_0\ln[R(0)]}{2\delta} \tag{12}$$

式中 $R(0)$ 为垂直入射时的理论反射系数，c_0 为真空中的光速。

4　数值计算实例

为了验证上述方法，对平行介质带定向耦合器进行了仿真。定向耦合器由两条相同的介质带构成，如图 1 所示，其中，$n_1=2.2$，$n_2=2$，$D=0.35$ μm，$S=0.45$ μm。

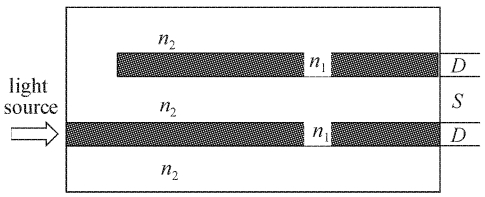

图 1　平行介质带定向耦合器示意图

Fig. 1　Sketch of parallel-slab directional coupler

在计算中使用的网格总数为 960×300 个，空间步长 $\Delta x=\Delta y=\Delta s=0.05$ μm，时间步长 $\Delta t=0.5\Delta s/c_0$。在计算区域的右端面采用理想匹配层吸收边界条件，上、下端面均采用一阶 Mur 近似吸收边界条件。理想匹配层的厚度 $\delta=10\Delta s$，电导率分布阶数 $n=3$，垂直入射时的理论反射系数 $R(0)=0.0001$。激励源采用 TE_0 模，波长 $\lambda=1.5$ μm。

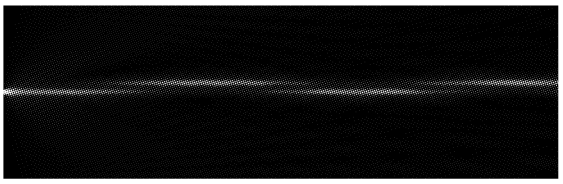

图 2　平行介质带定向耦合器的电场振幅分布

Fig. 2　Field distribution of the parallel-slab directional coupler

图 2 为计算所得电场振幅分布的图形，它清楚地显示出两波导之间的能量交换。在介质带中场幅相邻最大值之间的距离为 27.25 μm，从而求得耦合长度 $L_c=13.625$ μm，这与奇偶相位反转所需的精确解 $L_c=13.632$ μm 相比，误差只有 0.05%，优于文献[4]得到的结果。产生误差的主要原因是数值色散，减少网格步长可进一步提高计算精度。

5　结　论

实现了标量时域有限差分算法的理想匹配层吸收边界条件，并对平行介质带定向耦合器进行了数值模拟和验证，所得结果与理论值非常一致，证明了理想匹配层边界条件下的标量时域有限差分算法应用于弱导光器件分析的有效性。

参　考　文　献

1　J. Van Roey, J. Van der Donk, P. E. Lagasse. Beam propagation method: analysis and assessment [J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1981, **71**(7): 803～810

2 W. Huang, Chenglin Xu, Sai-Tak Chu *et al.*. The finite-difference vector beam propagation method: analysis and assessment [J]. *J. Lightwave Technol.*, 1992, **10**(3):295～305

3 S.-T. Chu, S. K. Chaudhuri. A finite-difference time-domain method for the design and analysis of guided-wave optical structures [J]. *J. Lightwave Technol.*, 1989, **7**(12):2033～2038

4 W. P. Huang, S. T. Chu, A. Goss *et al.*. A scalar finite-difference time-domain approach to guided-wave optics [J]. *IEEE Photon. Technol. Lett.*, 1991, **3**(6):524～526

5 Jean-Pierre Berenger. A perfectly match layer for the absorption of electromagnetic waves [J]. *Journal of Computational Physics*, 1994, **114**:185～200

6 G. Mur. Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic-field equations [J]. *IEEE Trans. EMC*, 1981, **23**(4):377～382

7 M. A. Alsunaidi, W. Elsallal. A PML-FDTD formulation for the simulation of optical structures [J]. *Microw. Opt. Technol. Lett.*, 1999, **22**(5):355～358

8 K. Jung, H. Kim. An efficient formulation of a 1-D model PML for waveguide structures [J]. *Microw. Opt. Technol. Lett.*, 1999, **21**(1):48～51

9 O. Ramadan, A. Y. Oztoprak. An efficient implementation of the PML for truncating FDTD domains [J]. *Microw. Opt. Technol. Lett.*, 2003, **36**(1):55～60

10 D. Zhou, W. P. Huang, C. L. Xu *et al.*. The perfectly matched layer boundary condition for scalar finite-difference time-domain method [J]. *IEEE Photon. Technol. Lett.*, 2001, **13**(5):454～456