

# 三维有限差分波束传输法: 用于 $\text{Ti} : \text{LiNbO}_3$ 方向耦合器的模拟

严朝军 许政权 陈益新

(上海交通大学应用物理系, 上海 200240)

**摘要** 提出求解三维傍轴近似波动方程的交替方向隐式差分格式, 并用它模拟  $\text{Ti} : \text{LiNbO}_3$  方向耦合器。

**关键词** 有限差分, 波导, 交替方向隐式格式, 方向耦合器, 波束传输法

## 1 引 言

随着光波导技术的发展, 用于光波导中的快速、精确的数字模拟技术越来越重要。特别是实际广泛应用的复杂三维器件对数字模拟技术是个极大的挑战。传统的快速傅里叶变换波束传输(FFT-BPM)技术<sup>[1]</sup>通常只用于二维问题, 或者将三维问题用有效折射率法简化为二维问题加以处理。但是对于诸如弯曲波导、多模波导或者折射率变化较大的三维问题, 用快速傅里叶变换-波束传输技术处理是比较困难的。基于有限差分技术的波束传输法(FD-BPM)是求解傍轴近似波动方程的另一类方法<sup>[2, 3]</sup>, 这种简明方法不仅保留波束传输方法的直观性, 更重要的是它比较适合处理快速傅里叶变换波束传输难于处理的问题。

现有的关于有限差分波束传输文献中, 大部分只讨论二维问题, 鲜见三维问题的处理。文献[4]报道了一种三维问题的显式算法, 限于稳定性的要求, 其传播步长很小, 计算时间较长。交替方向隐式格式(P-R 格式)<sup>[5]</sup>是求解多维扩散方程的有效算法, 本文利用此格式求解傍轴近似三维波动方程, 给出具体的格式, 并用此格式模拟  $\text{Ti} : \text{LiNbO}_3$  方向耦合器。

## 2 三维有限差分波束传输法

### 2.1 标量波动方程的傍轴近似

时间因子  $\exp(i\omega t)$  表示下的波动方程为

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \omega^2 n^2(x, y, z) \phi = 0 \quad (1)$$

其中  $x, y$  为横向坐标,  $z$  为波导传播的纵向坐标。 $\omega$  为光角频率, 折射率函数为  $n(x, y, z)$ 。记自由空间波数为  $k_0, k(x, y, z) = k_0 n(x, y, z)$  为依赖于空间坐标的波数。令

$$\psi(x, y, z) = u(x, y, z) \exp(ik_z z) \quad (2)$$

其中  $k_r$  为任意常数, 要求它的选择使  $u(x, y, z)$  是  $z$  的缓变函数, 一般均将它选择为  $n_b k_0$ ,  $n_b$  为衬底折射率。将(2)式代入(1)式, 忽略  $u$  关于  $z$  的二阶偏导数, 得到傍轴近似标量亥姆霍茨 (Helmholtz) 方程

$$2ik_r u_z + u_{xx} + u_{yy} + (k^2 - k_r^2) u = 0 \quad (3)$$

其中  $u_z$  和  $u_{xx}$  及  $u_{yy}$  分别是  $u$  关于  $z$  的一阶偏导和关于  $x$  和  $y$  的二阶偏导。

## 2.2 求解方程的交替方向隐式格式

为了求得(3)式的差分格式, 把(3)式改写为:

$$u_z = A(u_{xx} + u_{yy}) + B(x, y, z)u \quad (4)$$

其中  $A = i/2k_r$ ,  $B = i(k^2 - k_r^2)/2k_r$ 。离散  $u(x, y, z)$  时使用记号  $u_{m,n}^r = u(x_m, y_n, z_r)$ , 设  $(a_x, b_x)$  和  $(a_y, b_y)$  分别表示  $x$  方向和  $y$  方向窗口范围,  $m$  和  $n$  分别为  $x$  方向和  $y$  方向节点标号,  $N_x$  和  $N_y$  分别表示  $x$  方向和  $y$  方向节点总数,  $dx = (b_x - a_x)/N_x$  和  $dy = (b_y - a_y)/N_y$  分别表示  $x$  方向和  $y$  方向节点间距, 则坐标  $x_m = a_x + m dx$ ,  $y_n = a_y + n dy$ ;  $z$  方向上节点标号为  $r$ ,  $z_r = rdz$ ,  $r = 0, 1, \dots$ ;  $dz$  为纵向步长。

(4)式类似于二维热扩散方程。通常的隐式差分格式尽管容易写出, 却因为所得矩阵方程求解困难而难于实现<sup>[5]</sup>。P-R 差分格式每一个纵向步 ( $z_r \rightarrow z_{r+1}$ ) 分成两小步完成 ( $z_r \rightarrow z_{r+\frac{1}{2}} \rightarrow z_{r+1}$ ), 每一小步仅对一个横向空间方向( $x$  或  $y$ ) 采用隐式, 这样每一小步得到的矩阵方程均是易于求解的三对角形, 即用二次追赶法可完成一个纵向步的计算。定义算子:

$$\delta_x^2 u_{m,n}^r = u_{m+1,n}^r - 2u_{m,n}^r + u_{m-1,n}^r \quad (5)$$

$$\delta_y^2 u_{m,n}^r = u_{m+1,n}^r - 2u_{m,n}^r + u_{m-1,n}^r \quad (6)$$

差分替代微分的方程如下:

$$\frac{u_{m,n}^{r+\frac{1}{2}} - u_{m,n}^r}{dz/2} = \frac{A}{h^2} (\delta_x^2 u_{m,n}^{r+\frac{1}{2}} + \delta_y^2 u_{m,n}^{r+\frac{1}{2}}) + \frac{1}{2} B_{m,n}^{r+\frac{1}{2}} (u_{m,n}^r + u_{m,n}^{r+\frac{1}{2}}) \quad (7)$$

$$\frac{u_{m,n}^{r+1} - u_{m,n}^{r+\frac{1}{2}}}{dz/2} = \frac{A}{h^2} (\delta_x^2 u_{m,n}^{r+1} + \delta_y^2 u_{m,n}^{r+1}) + \frac{1}{2} B_{m,n}^{r+\frac{1}{2}} (u_{m,n}^{r+1} + u_{m,n}^{r+\frac{1}{2}}) \quad (8)$$

值得注意的是(4)式中  $B(x, y, z)u$  项的离散, 从  $r$  到  $r+1$  这一步中只用  $B_{m,n}^{r+\frac{1}{2}}$  来代替  $B(x, y, z)$ , 这是因为关于稳定性的分析<sup>[5]</sup>表明非此不能保证格式的无条件稳定。对于折射率不随  $z$  轴变化的问题, 这当然不影响解的精度, 而对于折射率随  $z$  轴变化的问题它限制了步长不能取得太大。(7)式或(8)式中, 每半步均可用效率极高的追赶法求解一个三对角方程, 这样在初始值给定的情况下, 就可以一步一步地求得传播场。而无条件稳定的隐式格式, 又使得步长可以取得较大, 以节约运算时间。

## 2.3 边界条件

计算窗口的有限截断会引起边界上波的反射, 边界条件的选取至关重要。本文采用 TBC 边界条件<sup>[6]</sup>, 它近似认为在边界附近满足平面波方程。为了编制程序的方便, 更进一步假设, 在每一小步中平面波波矢仅具有一个横向分量。

例如假设第一小步对  $x$  坐标采用隐式, 那么在  $x$  方向窗口一边假设下面关系成立:

$$u_{N_x,n}^{r+\frac{1}{2}} = u_{N_x-1,n}^{r+\frac{1}{2}} \exp [ik_x(dx)] \quad (9)$$

其中  $k_x$  暂时未知, 它可由下式求出:

$$u_{N_x,n}^r / u_{N_x-1,n}^r = u_{N_x-1,n}^r / u_{N_x-2,n}^r = \exp [ik_x(dx)] \quad (10)$$

对于窗口的另一端也有类似的关系。应用过程中, 由(10)式求得  $k_x$  后应强迫其实部为正, 再

代入(9)式中, 以保证场是向外辐射的。

第二小步对  $y$  坐标采用隐式, 则类似(9)和(10)的式子为:

$$u_{m,N_y}^{r+1} = u_{m,N_y-1}^{r+1} \exp [ik_y(dy)] \quad (11)$$

$$u_{m,N_y}^{r+\frac{1}{2}} / u_{m,N_y-1}^{r+\frac{1}{2}} = u_{m,N_y-1}^{r+\frac{1}{2}} / u_{m,N_y-2}^{r+\frac{1}{2}} = \exp [ik_y(dy)] \quad (12)$$

这种出于编程目的的多少有点随意性的边界条件的假设, 只是为了吸收辐射波, 避免反射波, 对于吸收的具体方式并不精密要求与实际情况一致, 以后将看到这种边界条件假设效果良好。

### 3 作为算例的 Ti : LiNbO<sub>3</sub> 方向耦合器模拟

考虑 Ti 扩散单模 LiNbO<sub>3</sub> 波导。波导制备参数及折射率分布形式等同于文献[7]。尽管完整的方向耦合器还包含波导弯曲部分, 本文只考虑形状完全相同的两个直波导间 TE-TE 模的耦合。采用前面的方法模拟耦合过程, 求出耦合长度。

首先要知道单模直波导的模分布图。任给一初始场, 通过三维有限差分波束传输法传输足够大的距离, 非本征场将在传输过程中辐射出波导, 最后得到的稳定场分布可以认为即是基模分布图。采用的网格参数为  $N_x = N_y = 50$ ,  $a_x = a_y = -20$ ,  $b_x = b_y = 20$ , 平面  $y_0 = 8.4$  为空气与波导的分界面,  $x$  方向扩散中心  $x_0 = -2.0$ 。初始场为  $\exp \{-[(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2]/100\}$ ,  $z$  方向传播步长  $dz = 5$  (所有长度单位均为微米), 传播 8000 步。图 1 显示了在不同的传播距离场的空间分布(取复数场模值)。约经过 3.0 cm 距离之后波导中只有基模存在。

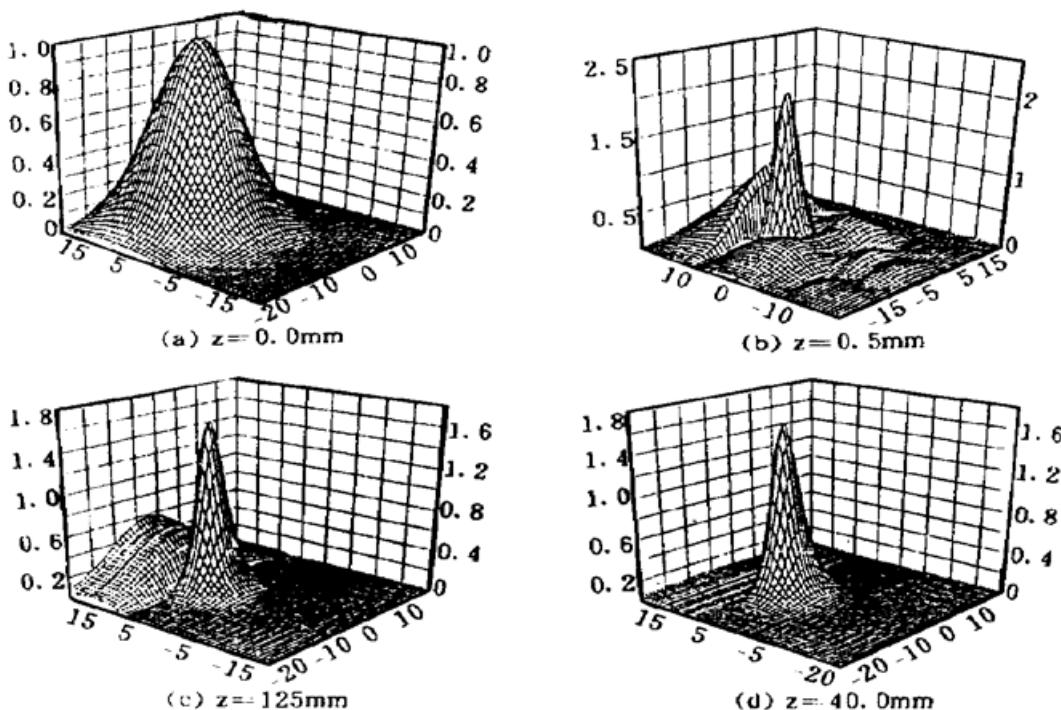


Fig. 1 The distribution of optical field at different distances. Vertical axis represents field module value, unit is free.  $x-y$  plane is computing window, the extents are  $x(-20, 20)$ ,  $y(-20, 20)$ , respectively. Diffusing center is located at  $(-2, 8.4)$ . All length units are  $\mu\text{m}$

模拟耦合过程时使用同一形状的网格, 这样可以避免抽样点误差。另一直波导的扩散中心可取不同值以调整波导间距。波导中的能量通过积分  $\left| \iint E^*(x, y, z) u(x, y, z) dx dy \right|^2$  求

出。其中  $E(x, y, z)$  是光场,  $u(x, y, z)$  是本征模场。

图 2 给出了耦合过程图, 它以等值线的形式作出。数字模拟中发现, 100% 的耦合是很难

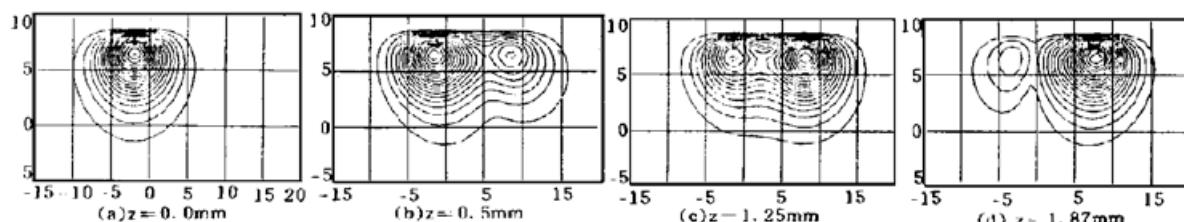


Fig. 2 Isointensity contours for coupling. The gap between waveguides is  $3.95 \mu\text{m}$ . The diffusing centers of the two straight waveguides are located at  $(-2, 8, 4)$  and  $(8.25, 8.4)$ , respectively. The contours for different propagating distances are depicted in (a), (b), (c), (d), respectively

实现的。图 3 对于不同的波导间距得出耦合长度, 比较符合文献[7]的实验结果。

**结 论** 本文尝试利用 P-R 隐式差分算法求解三维傍轴近似波动方程, 并实验应用于 Ti 扩散单模 LiNbO<sub>3</sub> 波导方向耦合器。实践证明这种新方法效果良好, 此种格式是无条件稳定的, 使得可以以较大的纵向空间步长计算, 节省运算时间, 本文所有计算均用微机实现。此外选取的边界条件效果较好, 可以以较小的计算窗口实现算法。它的成功为参考的器件模拟打下基础。

- [1] J. Van Roey, J. Van der Donk, P. E. Lagasse, Beam propagation method: analysis and assessment. *J. Opt. Soc. Am.*, 1981, **71**(7) : 803~ 810
- [2] R. Scarmozzino, R. M. Osgood, Jr., Comparison of finite-difference and Fourier transform solutions of the parabolic wave equation with emphasis on applications. *J. Opt. Soc. Am.*, 1991, **8**(5) : 724~ 731
- [3] R. Accornero, Finite difference methods for the analysis of integrated optical waveguides. *Electron. Lett.*, 1990, **26**(23) : 1959~ 1960
- [4] Y. Chung, N. Dagli, Explicit finite difference beam propagation: Application to semiconductor rib waveguide Y-Junction analysis. *Electron. Lett.*, 1990, **26**(11) : 711~ 713
- [5] 陆金甫, 关治, 偏微分方程数值解法。北京, 清华大学出版社, 1980
- [6] G. R. Hadley, Transparent boundary condition for beam propagation. *Opt. Lett.*, 1991, **16**(9) : 624~ 626
- [7] M. D. Feit, J. A. Fleck, Jr L. McCaughan, Comparison of calculated and measured performance of difused channel-waveguide couplers. *J. Opt. Soc. Am.*, 1983, **73**(10) : 1296~ 1304

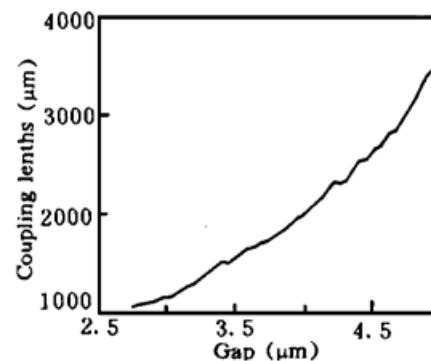


Fig. 3 The coupling lengths as a function of gap between waveguides

## Three Dimension Finite Difference Beam Propagation Method: Application to Ti : LiNbO<sub>3</sub> Directional Coupler Modeling

Yan Chaojun Xu Zhengquan Chen Yixin

(Department of Applied Physics, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200240)  
(Received 2 June 1996)

**Abstract** The P-R scheme is used to solve three dimension parabolic wave equation, a modeling example for Ti diffused channel-waveguide coupler is presented.

**Key words** finite difference, waveguide, Peaceman-Rachford(P-R) scheme, directional coupler, beam propagation method.