

# 光波导的自洽场计算 一. 通道光波导

高伯龙 金世龙

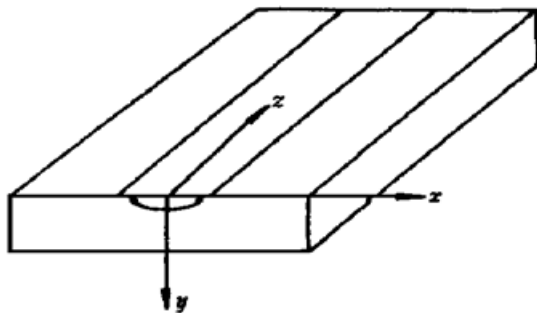
(国防科技大学应用物理系, 长沙 410073)

**摘 要** 用自洽场(SCF)法求通道光波导问题的解, 得到了有 10 位有效数字的传播常数。证明从精度上和机时上, 自洽场法都远较有限元法(FEM)优越, 应该在高级的光波导设计中得到应用。还详细讨论了自洽场法能够高精度而有限元法最终不可能提高精度的原因。

**关键词** 通道光波导, 自洽场, 关联效应。

## 1 扩散型通道波导的自洽场基本公式

文献[1]在波导的横向折射率变化远较波函数变化缓慢的简化假设下, 将扩散型通道波导作准 TE(QTE)和准 TM(QTM)模近似, 得到通道光波导(见图 1)的波函数所满足的方程式



$$\Psi(x, y, z, t) = \Phi(x, y) \exp [i(\beta z - \omega t)] \quad (1)$$

$$H \Phi(x, y) = \beta^2 \Phi(x, y) \quad (2)$$

其中

$$H = \alpha_x^2 \partial^2 / \partial x^2 + \alpha_y^2 \partial^2 / \partial y^2 + k_0^2 n^2(x, y) \quad (3)$$

$$k_0 = 2\pi/\lambda$$

Fig. 1 Channel waveguide with coordinate system

$\lambda$  为光在真空中的波长,  $\omega$  为圆频率,  $\beta$  为传播常数,  $n(x, y)$  为横向折射率分布,  $\alpha_x$ 、 $\alpha_y$  视模式和基底晶体的切割方法而定<sup>[2]</sup>。 $\beta^2$  和  $\Phi(x, y)$  是算符  $H$  在符合边界条件下的本征值和本征函数。

为了与文献<sup>[3]</sup>的结果相比较, 本文的基底取  $x$  切  $y$  传 LiNbO<sub>3</sub> 晶体。对 QTE 模,  $\Psi$  为电场强度的  $x$  分量  $E_x$ , 基片折射率  $n_s = n_e$ ,  $\alpha_x = n_e/n_o$ ,  $\alpha_y = 1$ ; 对 QTM 模,  $\Psi$  为磁场强度的  $x$  分量  $H_x$ ,  $n_s = n_o$ ,  $\alpha_x = \alpha_y = 1$ 。其中  $n_e$ 、 $n_o$  为晶体中 e 光、o 光的折射率。 $n(x, y)$  可写成

$$n^2(x, y) = \begin{cases} n_c^2 = 1, & y < 0; \\ n_s^2 + 2n_s \Delta n_s(x, y), & y \geq 0 \end{cases} \quad (4)$$

$n_c$  为  $y < 0$  的覆盖层的折射率, 实际上该层为空气,  $n_c = 1$ 。在文献[3]中

$$\Delta n(x, y) = \begin{cases} d_e E c(x, y), & \text{QTE 模;} \\ d_o [F c(x, y)]^r, & \text{QTM 模} \end{cases} \quad (5)$$

其中

$$c(x, y) = (c_0/2) \left[ \operatorname{erf} \left[ \frac{W+2x}{2D_x} \right] + \operatorname{erf} \left[ \frac{W-2x}{2D_x} \right] \right] \exp \left[ -\frac{y^2}{D_y^2} \right] \quad (6)$$

为 Ti 原子的密度分布函数。式中  $W = 14 \mu\text{m}$  为扩散前 Ti 条的宽度;  $D_x = 4.007 \mu\text{m}$  和  $D_y = 3.381 \mu\text{m}$  为  $x$ 、 $y$  方向扩散长度;  $c_0 = 1.896 \times 10^{21} \text{cm}^{-3}$  为  $W \rightarrow \infty$  且  $y = 0$  时 Ti 原子的密度;  $E = 1.2 \times 10^{-23} \text{cm}^3$ ,  $F = 1.3 \times 10^{-25} \text{cm}^3$ ,  $r = 0.55$  为三个常数;  $\lambda = 1.52 \mu\text{m}$  为光在真空中的波长;  $d_e = 0.8631$ 、 $d_o = 0.7099$  分别为 e 光(QTE)模、o 光(QTM 模)的色散系数;  $n_e = 2.138$ ,  $n_o = 2.214$ 。引入无量纲变量, 作变量变换

$$X = x/D_x, \quad Y = y/D_y \quad (7)$$

则(3)~(6)式可写成

$$H = \frac{\alpha_x^2}{D_x^2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\alpha_y^2}{D_y^2} \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + k_0^2 N^2(X, Y) \quad (3')$$

$$N^2(X, Y) = \begin{cases} n_s^2 + 2n_s \Delta N_s(X, Y), & Y \geq 0; \\ n_c^2, & Y < 0 \end{cases} \quad (4')$$

$$\Delta N_s(X, Y) = \Delta n g_1(X) g_2(Y) \quad (8)$$

$$\Delta n = \begin{cases} d_e E c_0 \operatorname{erf} [W/2D_x], & \text{QTE 模;} \\ d_o \{F c_0 \operatorname{erf} [W/2D_x]\}' , & \text{QTM 模;} \end{cases} \quad (9)$$

$$g_1(X) = \begin{cases} g(X), & \text{QTE 模;} \\ [g(X)]', & \text{QTM 模,} \end{cases} \quad (10)$$

$$g(X) = \{ \operatorname{erf} [W/2D_x + X] + \operatorname{erf} [W/2D_x - X] \} / \{ 2 \operatorname{erf} [W/2D_x] \}$$

$$g_2(Y) = \begin{cases} \exp(-Y^2), & \text{QTE 模;} \\ \exp(-rY^2), & \text{QTM 模} \end{cases} \quad (11)$$

这里, erf 为误差函数。求  $H$  算符的本征值即求  $H \rangle$  的最大值。  $H \rangle$  为

$$H \rangle = \iint \Phi^*(X, Y) H \Phi(X, Y) dX dY \quad (12)$$

其中  $\Phi(X, Y)$  为满足边界条件、连续性条件并已归一化的任意连续函数。自洽场法限于  $H \rangle$  为下列形式函数给出  $H \rangle$  的最大值, 亦即该形式函数的最佳解:

$$\Phi(X, Y) = \Phi_1(X) \Phi_2(Y) \quad (13)$$

其它限制条件同上。用变分法求  $H \rangle$  的最大值

$$H \rangle = \iint \Phi_1^*(X) \Phi_2^*(Y) H \Phi_1(X) \Phi_2(Y) dX dY \quad (14)$$

其中

$$\int \Phi_1^*(X) \Phi_1(X) dX = 1, \quad \int \Phi_2^*(Y) \Phi_2(Y) dY = 1 \quad (15)$$

(15) 式的限制条件可用乘拉格朗日乘子方法加到(14)式, 变分后得

$$\left[ \frac{\alpha_x^2}{D_x^2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + k_0^2 N_1^2(X) \right] \Phi_1(X) = (E_1 + k_0^2 n_s^2) \Phi_1(X) \quad (16)$$

$$N_1^2(X) = \int |\Phi_2(Y)|^2 N^2(X, Y) dY \quad (17)$$

$$\left[ \frac{\alpha_y^2}{D_y^2} \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + k_0^2 N_2^2(Y) \right] \Phi_2(Y) = (E_2 + k_0^2 n_s^2) \Phi_2(Y) \quad (18)$$

$$N_2^2(Y) = \int |\Phi_1(X)|^2 N^2(X, Y) dX \quad (19)$$

变分时, 拉格朗日乘子写成  $E_1 + k_0^2 n_s^2$  和  $E_2 + k_0^2 n_s^2$  是为了简化以后的结果。

(16) 式、(18) 式各为一维的本征方程, 拉格朗日乘子即是其本征值。每一方程式皆相当于文献[4]所讨论过的平面波导方程。现在不同的是, 两个方程有关联性。 $X$  方向的折射率平方的分布  $N_1^2(X)$  是用  $Y$  变量的波函数  $\Phi_2(Y)$  来求  $N^2(X, Y)$  的平均值而得, 见(17) 式。同样,  $Y$  方向的分布为用  $\Phi_1(X)$  求得, 见(19) 式。 $\Phi_1(X)$ 、 $\Phi_2(X)$  必须同时满足(16)~(19) 式, 称自洽, 其解称自洽场解。实际进行时必须逐次逼近, 采用迭代法。

由于  $H$  算符对  $X$  坐标反演的不变性, 其本征函数对  $X$  坐标有偶宇称或奇宇称, 前者对应的模量子数为偶数(0, 2, 4, ...), 后者对应奇数(1, 3, ...)。因此, 只需计算  $X \geq 0$  区域, 计算时考虑到宇称的对称性就可以了。同样, 对  $Y < 0$  的区域有隐失波的准确解<sup>[4]</sup>, 故数值计算亦只对  $Y \geq 0$  区域即可。先解(18) 式  $Y < 0$  区域的隐失波。从(4') 式和(19) 式、(18) 式得

$$N_2^2(Y) = n_c^2, \quad (Y < 0) \quad (20)$$

$$\Phi_2(Y) = \Phi_2(0) \exp(KY), \quad (Y < 0) \quad (21)$$

$$K = \sqrt{E_2 + k_0^2(n_s^2 - n_c^2) Dy/\alpha_y} \quad (22)$$

对导模,  $K$  应为正实数才能满足  $\Phi_2(-\infty) = 0$  的边界条件。

对于  $Y \geq 0$  的区域, 以(4') 式代入(19) 式得\*

$$N_2^2(Y) = n_s^2 + A_2 g_2(Y) \quad (23)$$

$$A_2 = 2n_s \Delta n \int_0^\infty g_1(X) |\Phi_1(X)|^2 dX \quad (24)$$

(18) 式化为

$$\left[ \frac{\alpha_y^2}{D_y^2} \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + k_0^2 A_2 g_2(Y) \right] \Phi_2(Y) = E_2 \Phi_2(Y) \quad (18')$$

将(4') 式和(21) 式代入(17) 式, 得

$$N_1^2(X) = n_s^2 + A_1 g_1(X) - B_1 \quad (25)$$

$$A_1 = 2n_s \Delta n \int_0^\infty g_2(Y) |\Phi_2(Y)|^2 dY \quad (26)$$

$$B_1 = [|\Phi_1(0)|^2 / 2K] (n_s^2 - n_c^2) \quad (27)$$

于是(16) 式化为

$$\left[ \frac{\alpha_x^2}{D_x^2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + k_0^2 A_1 g_1(X) - k_0^2 B_1 \right] \Phi_1(X) = E_1 \Phi_1(X) \quad (16')$$

(16') 式[和(26)、(27) 式]、(18') 式[和(24) 式]以及隐失波解(21) 式、(22) 式比(16)~(19) 式更具体, 易于逐次近似、迭代操作。下面就以它们作为自洽场的基本方程式, 由此作数值解。在解了这些方程式之后, 就得到波函数  $\Phi_1(X)$ 、 $\Phi_2(Y)$  和本征值  $E_1$ 、 $E_2$ 。从(14) 式, (16)~(19) 式, (23) 式、(24) 式以及(25)~(27) 式, 可得  $\beta^2$ :

$$\beta^2 = H = E_1 + E_2 + k_0^2(n_s^2 + B_1) - k_0^2 A_1 A_2 / (2n_s \Delta n) \quad (28)$$

## 2 自洽场方程式的数值解

原则上, 只要预先给定  $E_1$ 、 $E_2$  的值以及  $A_1$  或  $A_2$  之一的值, 就可以完成一次全程迭代。为肯定起见, 设已给定  $E_1$ 、 $E_2$  和  $A_2$  的数值。从文献[4] 的讨论可知, 如不使用艾特肯

\* 为方便, 在(24) 式和(39) 式皆少了 2 倍, 实际上是在  $X = 0$  到  $\infty$  区域内运算, 不影响结果。

(Aitken) 外推法, 则差分方程法比直接积分法精度高, 因此选定差分方程法。按照同样的作法<sup>[4]</sup>, 取  $X$  变量的最大值为  $X_m$ , 把  $[0, X_m]$  作  $N_1$  等分。同样, 取  $Y$  变量的最大值为  $Y_m$ , 把  $[0, Y_m]$  作  $N_2$  等分。各小段端点为

$$\left. \begin{aligned} X_i &= ih_1, & (i = 0, 1, \dots, N_1); \\ h_1 &= X_m/N_1 \\ Y_i &= ih_2, & (i = 0, 1, \dots, N_2) \\ h_2 &= Y_m/N_2 \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

从(18')式得递推公式

$$\Phi_{2, i+1} = \{2 + [(E_2 - k_0^2 A_{2g_{2,i}}) D_y^2 / \alpha_y^2] h_2^2\} \Phi_{2, i} - \Phi_{2, i-1} \quad (30)$$

$$\text{其中} \quad \Phi_{2, i} = \Phi_2(Y_i), \quad g_{2, i} = g_2(Y_i) \quad (31)$$

连续性条件[从(21)式]和边界条件为

$$\Phi_{2, 1} = \Phi_{2, 0}(1 + Kh_2), \quad \Phi_{2, N_2} = 0 \quad (32)$$

从(30)式便可以得到  $\{\Phi_{2, i}\}$ , 它的  $\Phi_{2, N_2} \neq 0$ 。然后调整  $E_2$  的值进行新的循环,  $\dots$ , 迭代到在误差小于  $10^{-11}$  内符合要求为止。这样, 便得到  $A_2$  为指定值的条件下的正确本征值  $E_2$  和本征函数  $\{\Phi_{2, i}\}$ 。文献[4]已充分论证过, 在不很大的  $Y_m$  (如  $Y_m = 7$ ) 和  $h_2 = 0.01$  (或  $N_2 = 700$ ) 的取法下, 可得到  $E_2$  的 4~5 位有效数字的精度, 迭代次数约 10 次, 用 IBM 586PC 计算机约需 0.02 秒。较大的  $Y_m$  和更小的  $h_2$  可保证更高精度。当使用艾特肯外推法时, 可得到 10~11 位有效数字的精度。有了  $\{\Phi_{2, i}\}$ , 应该使之归一化。用辛普森(Simpson)近似, 得

$$S_2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\Phi_2(Y)|^2 dY = |\Phi_{2, 0}|^2 / 2K + \frac{1}{2} (|\Phi_{2, 0}|^2 + |\Phi_{2, N_2}|^2) h_2 + \sum_{i=1}^{N_2-1} |\Phi_{2, i}|^2 h_2 \quad (33)$$

然后把  $\Phi_{2, i} / \sqrt{S_2}$  记为  $\Phi_{2, i}$ , 便完成了归一化。有了归一化的  $\{\Phi_{2, i}\}$ , 代入(26)式便可得  $A_1$ ,

$$A_1 = 2n_s \Delta n \left[ \frac{1}{2} (g_{2, 0} |\Phi_{2, 0}|^2 + g_{2, N_2} |\Phi_{2, N_2}|^2) + \sum_{i=1}^{N_2-1} g_{2, i} |\Phi_{2, i}|^2 \right] h_2 \quad (34)$$

从(27)式可得  $B_1$ , 这样, 便可如法求(16')式的本征解。从(16')式得的递推公式为

$$\Phi_{1, i+1} = \{2 + [(E_1 + k_0^2 B_1 - k_0^2 A_{1g_{1,i}}) D_x^2 / \alpha_x^2] h_1^2\} \Phi_{1, i} - \Phi_{1, i-1} \quad (35)$$

边界条件为

$$\Phi_{1, N_1} = 0 \quad (36)$$

对偶宇称模的对称性条件为

$$\Phi_{1, -1} = \Phi_{1, 1}$$

因而从(35)式有

$$\Phi_{1, 1} = \{2 + [(E_1 + k_0^2 B_1 - k_0^2 A_{1g_{1,0}}) D_x^2 / \alpha_x^2] h_1^2\} \Phi_{1, 0} / 2 \quad (37)$$

对奇宇称模则有

$$\Phi_{1, 0} = 0 \quad (38)$$

有了(36)式以及(37)式或(38)式, 便可依法迭代数次, 求出本次循环的准确的本征值  $E_1$  和本征函数  $\{\Phi_{1, i}\}$ 。归一化因子  $1/\sqrt{S_1}$  的  $S_1$  为

$$S_1 = \frac{1}{2} (|\Phi_{1, 0}|^2 + |\Phi_{1, N_1}|^2) h_1 + \sum_{i=1}^{N_1-1} |\Phi_{1, i}|^2 h_1 \quad (39)$$

这样, 便完成了自洽场求解的第一循环。第二循环以第一循环所求得的  $E_1$ 、 $E_2$  值为依据, 然

后由该循环求得的归一化后的 $\{\Phi_{1,i}\}$ , 代入(24)式求得新的 $A_2$

$$A_2 = 2n_s \Delta n \left[ \frac{1}{2} (g_{1,0} |\Phi_{1,0}|^2 + g_{1,N_1} |\Phi_{1,N_1}|^2) + \sum_{i=1}^{N_1-1} g_{1,i} |\Phi_{1,i}|^2 \right] h_1 \quad (40)$$

有了 $E_1$ 、 $E_2$ 、 $A_2$ 这三个值, 就可和第一循环一样进行, 求得新的 $E_1$ 、 $E_2$ 、 $\{\Phi_{2,i}\}$ 、 $\{\Phi_{1,i}\}$ 、 $A_1$ 、 $B_1$ 和更新的 $A_2$ 。这样一直进行下去, 直到下面判据得到满足为止, 最后的 $E_1$ 、 $E_2$ 、 $\{\Phi_{2,i}\}$ 、 $\{\Phi_{1,i}\}$ 、 $A_1$ 、 $B_1$ 、 $A_2$ 就是最终结果。把这些值代入(28)式便得本征值 $\beta^2$ 。终止循环的判据为

$$\left. \begin{aligned} E_r(E_1) < 10^{-11}, & \quad E_r(E_2) < 10^{-11}, & \quad |\Phi_{1,N_1}| < 10^{-11}, \\ |\Phi_{2,N_2}| < 10^{-11}, & \quad E_r(c) < 10^{-11} \end{aligned} \right\} \quad (41)$$

前四项是循环中迭代求 $E_2$ 、 $E_1$ 终结的判据,  $E_r(E_1)$ 、 $E_r(E_2)$ 指相邻两次迭代中 $E_1$ 之差和 $E_2$ 之差绝对值。最后一项是指两个相邻循环之间的关系,  $\Delta E_1$ 、 $\Delta E_2$ 为它们求出的 $E_1$ 、 $E_2$ 之差, 而

$$E_r(c) = \sqrt{(\Delta E_1)^2 + (\Delta E_2)^2} \quad (42)$$

这样的循环叠加, 其收敛的快慢及收敛与否与初始所取的 $E_1$ 、 $E_2$ 、 $A_2$ 值有关。如起始值与最终准确值相差得少, 则收敛快, 相差越小则收敛越快。如起始值与准确值相差过大, 则可能不收敛, 或收敛到所不希望的结果, 例如, 本希望求 $QTE_{00}$ 模, 但结果接近 $QTE_{20}$ 模(由于它和 $QTE_{00}$ 模不交, 故并非严格意义的 $QTE_{20}$ 模)。计算经验表明, 并不期望起始的 $E_1$ 、 $E_2$ 、 $A_2$ 值过高, 在相当大范围内都能较迅速收敛。用IBM 586 PC 计算机作计算, 求一组值通常约0.2秒。

$QTE_{00}$ 或 $QTM_{00}$ 模是偶宇称的最低阶模。 $QTE_{10}$ 或 $QTM_{10}$ 模是奇宇称的最低阶模。它们可用上面的方法直接求解。至于高阶模, 如 $QTE_{20}$ 模, 对它的波函数选择必须加上与 $QTE_{00}$ 模波函数正交这样一个限制条件, 变分时多了一拉格朗日乘子, 此乘子在求解时起保证与 $QTE_{00}$ 模正交的作用。这样循环迭代增加了复杂性。从实用角度, 最重要的是“00”、“10”模, 暂时没有必要作较复杂的推广。

### 3 用厄米-高斯函数作为初始波函数

起始的 $E_1$ 、 $E_2$ 、 $A_2$ 值有较大的可适应范围。因此, 多次用不同的 $(E_1, E_2, A_2)$ 数据组作试探, 可以找到收敛到所希望的结果的起始值。这是一种方法。本文介绍更有规律的方法, 即起始时用近似波函数法。

从文献[4], 由于覆盖层折射率 $n_c = 1$ , 波导中光波的传播常数大(相当于表面的入射角大), 隐失波不强, 因此, 作为初步近似, 起始波函数在 $Y \leq 0$ 可取为0。由于对初始的取法要求不高, 故厄米-高斯波函数是一方便的取法。

对“00”模( $QTE_{00}$ 或 $QTM_{00}$ ), 或“10”模, 可取

$$\Phi_1(X) = \begin{cases} (\sqrt{2}/\sqrt{\sigma_x \pi^{1/4}}) \exp(-X^2/2\sigma_x^2), & \text{“00”模} \\ (2/\sqrt{\sigma_x \pi^{1/4}}) [\exp(-X^2/2\sigma_x^2)] X/\sigma_x, & \text{“10”模} \end{cases} \quad (43)$$

$$\Phi_2(Y) = (2/\sqrt{\sigma_y \pi^{1/4}}) [\exp(-Y^2/2\sigma_y^2)] Y/\sigma_y \quad (44)$$

这里, 和对(24)式和(39)式的注解一样,  $X$ 运算范围限于0到 $\infty$ , 故(43)式亦对此范围归一化。用(43)式和(44)式, 代入(24)、(26)、(27)式, 可得 $A_1$ 、 $B_1$ 、 $A_2$ 。积分时可取数值积分, 只要固定取 $\sigma_x$ 、 $\sigma_y$ 就可以用辛普森法求出。再根据(16')式和(18')式, 可求得 $E_1$ 、 $E_2$ :

$$E_1 = \int_0^\infty \Phi_1(X) \left[ \frac{\alpha_c^2}{D_x^2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + k_0^2 A_1 g_1(X) - k_0^2 B_1 \right] \Phi_1(X) dX \quad (45)$$

$$E_2 = \int_0^{\infty} \Phi_2(Y) \left[ \frac{\alpha_y^2}{D_y^2} \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + k_0^2 A_2 g_2(Y) \right] \Phi_2(Y) dY \quad (46)$$

有了  $E_1$ 、 $E_2$ 、 $A_1$ 、 $A_2$ 、 $B_1$ ，代入(28)式，便可求得  $H$ ，它是  $\sigma_x$ 、 $\sigma_y$  的函数。所有这些积分，全可使用辛普森数值法。

对  $\sigma_x$ 、 $\sigma_y$  作微量改变再求  $H$ ，可得  $\partial H / \partial \sigma_x$  和  $\partial H / \partial \sigma_y$ 。使用推广后的牛顿法可求得  $H$  的极大值和相应的  $\sigma_x$ 、 $\sigma_y$  值。此时的  $E_1$ 、 $E_2$ 、 $A_1$  值便可作为所选择的起始值，开始自洽场的数字循环迭代计算。只要开始时使用的  $\sigma_x$ 、 $\sigma_y$  相差不太大，用推广牛顿法求解计算迅速，在 IBM 586 PC 机上一一般需时不超过 0.2 秒。

对于 QTE 模，根据(10)式，可把  $E_1$ 、 $E_2$ 、 $A_1$ 、 $A_2$  表达成解析式子，

$$A_1 = 2n_s \Delta n / (1 + \sigma_y^2)^{3/2} \quad (47)$$

对 QTE<sub>00</sub>模:

$$A_2 = 2n_s \Delta n \operatorname{erf}[W / (2D_x \sqrt{1 + \sigma_x^2})] / \operatorname{erf}(W / 2D_x) \quad (48)$$

$$E_1 = -\alpha_x^2 / 2D_x^2 \sigma_x^2 + k_0^2 A_1 A_2 / 2n_s \Delta n \quad (49)$$

$$E_2 = -3\alpha_y^2 / 2D_y^2 \sigma_y^2 + k_0^2 A_1 A_2 / 2n_s \Delta n \quad (50)$$

对 QTE<sub>10</sub>模:

$$A_2 = 2n_s \Delta n \left[ \operatorname{erf} \left[ \frac{W}{2D_x \sqrt{1 + \sigma_x^2}} \right] - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{W \sigma_x^2}{2D_x (1 + \sigma_x^2)^{3/2}} \exp \left[ -\frac{W^2}{4D_x^2 (1 + \sigma_x^2)} \right] \right] / \operatorname{erf} \left[ \frac{W}{2D_x} \right] \quad (51)$$

$$E_1 = -3\alpha_x^2 / 2D_x^2 \sigma_x^2 + k_0^2 A_1 A_2 / 2n_s \Delta n \quad (52)$$

$$E_2 = -3\alpha_y^2 / 2D_y^2 \sigma_y^2 + k_0^2 A_1 A_2 / 2n_s \Delta n \quad (53)$$

对 QTM 模，用(10)式的  $g_1(X)$  不能得到解析公式，只能作数值计算。由于计算速度很快，并不一定要用解析公式。用厄米-高斯函数作为近似波函数去算初始的  $E_1$ 、 $E_2$ 、 $A_2$  值是有成效的。

## 4 数值解的结果及与有限元法的比较和讨论

必须把自洽场方法与其它方法作比较才能判定其优劣，尤其必须和文献上流行的、评价最高的有限元法比较。文献[3]的原始参数齐全[见(4)式前和(6)式后]，所给出的4个数字结果正合用，本文使用这些参量作计算后比较。

计算结果见表1。表中“SCF”列是用自洽场法，取足够大的  $X_m$ 、 $Y_m$ ，分段长度  $h_1 = h_2 = 0.02/2^n$ ，( $n = 0, 1, \dots, 6$ )，然后用艾特肯外插法处理，可认为是自洽场法无计算误差的准确结果(见文献[4]的论述)。“SSCF”列是简单自洽场法的结果，它用  $h_1 = h_2 = 0.01$ ， $X_m$  和  $Y_m$  见表1最后4列。“FEM”列是文献[3]的结果，“BPM”列是该文用传统的 BPM 计算的结果。

从变分法得知限于(13)式形式的  $\Phi(x, y)$ ，其结果  $H$  (即  $\beta^2$ ) 比使用一般  $\Phi(x, y)$  的准确值要小。所以，准确的  $\beta - k_0 n_s$  (并不确知) 应比表1的自洽场结果大一些。从数学角度，通常的计算方法都与变分法有直接的或间接的关系，所以，除非作非正常的近似，所得结果都应该比准确值小。文献[3]即是根据此，从有限元法比光束传播法的  $\beta - k_0 n_s$  大而断定前者比后者精确度高的。用同样理由，从表1可知，自洽场比有限元法和光束传播法都明显地精确。即使简单自洽场，由于考虑计算速度， $N_1$  和  $N_2$  取得较小，亦比有限元法精度高2个量级(当以自洽场的结果为准)。

自洽场是量子力学 30 年代即已出现的有效方法, 由于  $x$ 、 $y$  方向的传播都是在对方(对  $x$  为  $y$ , 对  $y$  为  $x$ ) 所造成的平均折射率分布中传播, 没有考虑两者的关联, 所以  $\beta$  中少了与关联有关的“关联项”而比正确值要小。正如氦原子的两个电子绕核旋转, 自洽场法是把每一电子看作是绕另一电子绕运动所造成的平均中心力场中运动, 而没有考虑两电子坐标的关联。显然, 如  $A$  电子在空间某点,  $B$  电子受库伦斥力影响靠近该点的机会就应减少, 这种关联是自洽场所未能考虑的。其结果, 自洽场计算出的氦原子结合能为  $5.75 \text{ Rhc}$  ( $\text{Rhc}$  为光谱能量单位), 比实验值少  $0.06 \text{ Rhc}$ , 而用含两电子相对坐标  $r_{12}$  和 15 个变分参量的波函数可得到  $5.80748 \text{ Rhc}$ , 与实验值  $5.80736 \text{ Rhc}$  相差很小<sup>[6]</sup>。这  $0.06 \text{ Rhc}$  叫作“关联能量”, 它约占氦原子总结合能的 1%。氦原子中两电子的库伦斥力引起的关联还是比较明显的, 但因有固定的核库仑力场为主, 辅以其中一个电子运动的平均中心力场, 因而关联能量仅占 1%。在光通道波导的情形, 以  $N^2(X, Y)$  为主, 一传播方向对另一传播方向的平均效应为辅, 两方向传播之间并不存在电子间库伦斥力那样强的关联, 因而可以预期“关联项”对  $\beta - k_{0n_s}$  的贡献将远小于 1%。这样就可以解释为什么没有考虑  $X$  与  $Y$  的关联效应的自洽场法, 其结果比原则上已考虑关联效应的有限元法要大 2~12% 的原因(见表 1)。

Table 1.  $\beta - k_{0n_s}$  Values (in  $10^{-3} \mu\text{m}^{-1}$ ) by different methods

mode	SCF	SSCF	FEM	BPM	$X_m$	$N_1$	$Y_m$	$N_2$
QTE <sub>00</sub>	27.62987504	27.6308	27.1	25.2	5	500	6	600
QTE <sub>10</sub>	17.72425003	17.7252	17.3	15.6	4	400	3.6	360
QTM <sub>00</sub>	7.085304071	7.08547	6.7	6.5	10	1000	10	1000
QTM <sub>10</sub>	2.374825439	2.37499	2.1	2.0	10	1000	10	1000

因此, 可以认为, 自洽场法的精度远优于其它方法, 其结果与实际值之差可预期远小于 1%。简单自洽场法在实用中也足够准确, 远优于其它方法。

为了说明有限元法的误差何以不小, 有必要简述有限元法求解的全过程。设共划分  $N$  个有限元, 共有  $N_p$  个网络点, 其中中间有  $N_0$  个, 边界上有  $N_p - N_0$  个。通常用得最多的是三角形元, 每个元中的波函数展开成  $X$ 、 $Y$  的线性函数, 由三角形三个顶点的函数值来定标<sup>[7]</sup>。有限元法的基础仍是变分法, (12) 式的积分由  $N$  个元的积分相加。对用每个元的波函数(已展开成  $X$ 、 $Y$  的线性函数)的积分可近似求得, 文献[7]中介绍了两种近似法。经过综合后, (12) 式的积分为  $N_p \times N_p$  的  $H$  矩阵对  $N_p$  维波(函数)矩阵  $\Phi$  的平均值。进行  $\Phi$  的变分, 制约条件为  $\Phi$  的归一化, 于是得  $H$  的本征方程,  $\beta^2$  为本征值,  $\Phi$  为本征函数。这个  $H$  矩阵是稀疏的, 除一网点的对角元素外, 一行中只有与此网点相邻的网点相应的列元素才不为 0, 例如, 行中有 6 个非对角元素不为 0。如果边界条件为: 波函数在边界上为 0, 则  $H$  矩阵可约简为  $N_0 \times N_0$ 。

从上面叙述中可看出, 有限元法的工作量是惊人的,  $H$  的维数也是惊人的。文献[3]用了  $60 \times 67$  个一阶元, 即  $N = 4020$ ,  $N_p > N$ ,  $N_0 \cong N$ , 就是说,  $H$  约为  $4000 \times 4000$ 。尽管是“稀疏”矩阵, 有现成软件包可调用, 但维数这么大, 计算的工作量和计算机的累积误差都是可观的。不管软件包解本征方程用迭代法或其它方法, 这么高维数的作法绝非自洽场法介绍的简单递推公式(30)式、(35)式所能比拟的。 $60 \times 67$  个一阶元是否够多了呢? 显然是远远不够的。文献[4]中介绍了文献[5]中平面波导的计算和结果, 用了 800 个一阶有限元, 所得结果与真值相差较大, 现在每一方向仅用 60 和 67 个元, 差得更远了。而且, 对于  $n_c = 1$  的覆盖

层亦得设元, 更使  $60 \times 67$  嫌不足。文献[7]中说, 若剖分三角形时最大的边长为  $h$ , 则计算出波函数的误差为  $O(h^2)$ 。显然计算出  $H$  或  $\beta^2$  的误差亦为  $O(h^2)$ 。这样, 有限元法的误差大, 除了  $H$  矩阵维数大产生的计算机积累误差大外, 还有  $h$  小不下来的误差。如果有限元法按表 1 所列简单自洽场法在单方向取的元数, 则总元数约  $N_1 \times N_2 = 1.5 \times 10^5 \sim 1 \times 10^6$ , 那么计算机的内存和机时将增了  $40^2 \sim 250^2$  倍! 按  $60 \times 67$  的元数目, 本文作者在 IBM PS12-80 计算机上的计算时间已经是每组数 10 分钟了。何况  $h$  小后(元数正比于  $1/h^2$ ) 计算机的积累误差亦将增加好几个数量级。所以一阶有限元法只能是较低精度的方法。

有限元法还可以稍加改变, 如矩形元、四边形元, 每个元的波函数还可展开为  $X$ 、 $Y$  变量的二阶式甚至多阶式(后者亦称近似解析解)。但阶数越高, 则(12)式积分中对每一单元的处理越复杂, 二阶元就比一阶元复杂得多。由于计算机内存和机时的原因, 元的阶数越高所取的元数得越少, 误差的( $h^2$ ) 效应使高阶元并不比低阶元的结果精确<sup>[5, 8]</sup>。

简单自洽场每组数所需机时小于 0.4 秒, 为有限元法的 1/1500。如果计算曲线, 每个点的参量只改变不大的量, 则只有算第一点时才使用厄米-高斯函数去定初始的  $E_1$ 、 $E_2$  和  $A_2$  值, 作第二点计算时可用上面得出的  $E_1$ 、 $E_2$ 、 $A_2$ , 则每组数仅需时约 0.2 秒。从机时说, 自洽场法亦远优于有限元法。

本文介绍的自洽场法只能算“00”、“10”模, 在实际的高级设计中已经够了。文献[2, 3, 5, 8]的有限元法亦只能算这两者。算“01”、“20”...等要增加拉格朗日乘子, 增加复杂性。

结论是: 自洽场法是目前精度较高的方法, 并且程序较简单, 使用的机时少, 最适合通道光波导的计算和推广。有限元法的应用范围很广, 但它不适合在平面光波导和通道光波导上应用。无论从精度上或机时上说, 两者都有好几个数量级的差别。

表 1 中 QTE<sub>00</sub>、QTE<sub>10</sub>、QTM<sub>00</sub>、QTM<sub>10</sub> 四个结果的波函数  $\Phi_1(X)$ 、 $\Phi_2(Y)$  的平方即“光强”, 已绘于图 2 和图 3。对比文献[3]的结果, 大致差不多, 有一点是明显的, 就是自洽场法的宽度较小, 这和  $\beta - k_{0ns}$  较大是一致的。图中  $I_1(x)$ 、 $I_2(y)$  为归一化光强,  $I_{xm}$ 、 $I_{ym}$  为其最大值。

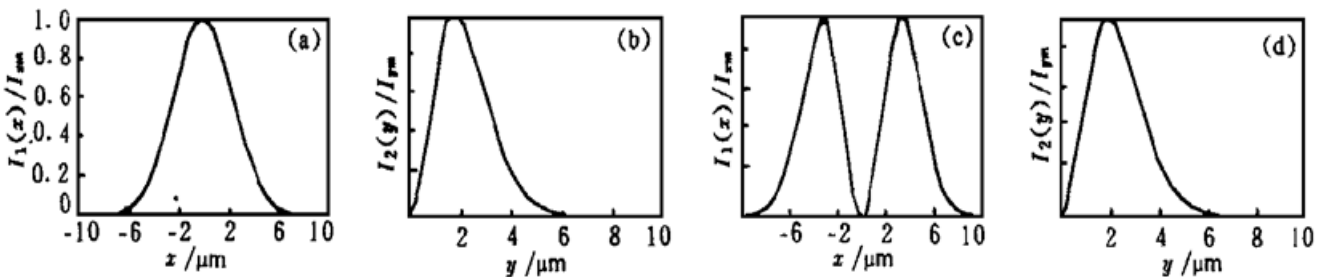


Fig. 2 Normalized field intensity distributions: QTE<sub>00</sub> mode:  $I_{xm} = 0.1669$ ,  $I_{ym} = 0.3879$ ; QTE<sub>10</sub> mode:  $I_{xm} = 0.1307$ ,  $I_{ym} = 0.3718$

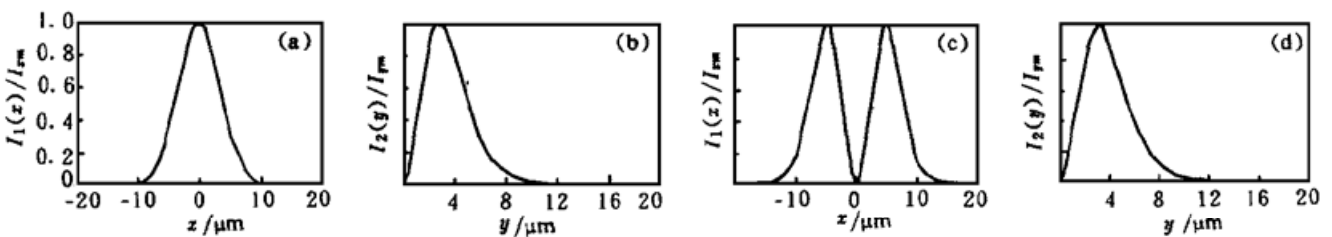


Fig. 3 Normalized field intensity distributions: QTE<sub>00</sub> mode:  $I_{xm} = 0.1168$ ,  $I_{ym} = 0.2445$ , QTE<sub>10</sub> mode:  $I_{xm} = 0.08648$ ,  $I_{ym} = 0.2237$



另外, 本文的方法适用范围广, 只要折射率分布满足(4)式就能用, 如再满足(8)式则更可以直接照搬所有结果。扩散型  $\text{Ti} \cdot \text{LiNbO}_3$ 、质子交换退火扩散以及阶梯型波导均适用。

衷心感谢冯莹副教授提供的技术资料 and 为本文打印、作图。

### 参 考 文 献

- [1] Suhara T, Handa Y, Nishihara H *et al.*. Analysis of optical channel waveguides and directional couplers with graded-index profile. *J. Opt. Soc. Am.*, 1979, **69**(9) : 807~ 815
- [2] Strake E, Bava G P, Montrosset I. Guided modes of  $\text{Ti} \cdot \text{LiNbO}_3$  channel waveguides: A novel quasi-analytical technique in comparison with the scalar finite-element method. *J. Light Wave Technol.*, 1988, **6**(6) : 1126~ 1134
- [3] Bersiner L, Hempelmann U, Strake E. Numerical analysis of passive integrated-optical polarization splitters: Comparison of finite-element method and beam-propagation method results. *J. Opt. Soc. Am. (B)*, 1991, **8**(2) : 422~ 433
- [4] 高伯龙. 光波导的自洽场计算 I. 扩散型平面波导. 光学光报, 1999, **19**(5) : 626~ 632
- [5] Katstriku F A, Rahman B M A, Thomas K *et al.*. Finite element analysis of diffused anisotropic optical waveguides. *J. Light Wave Technol.*, 1996, **14**(5) : 780~ 786
- [6] Pauling L, Wilson E B. *Introduction to Quantum Mechanics*. 北京: 龙门联合书局, 1951
- [7] 况蕙荪, 蒋伯诚, 张树发. 计算物理引论, 长沙: 湖南科学技术出版社, 1987. 278~ 304
- [8] Koshiha M. *Optical Waveguide Analysis*. New York: McGraw-Hill, 1992

## Self Consistant Field Calculation of Light Waveguide — Channel Optical Waveguide

Gao Bolong      Jin Shilong

(Department of Applied Physics, National University of Defense Technology, Changsha 410073)

(Received 1 December 1997; revised 4 May 1998)

**Abstract** Using the self consistant field (SCF) method, the channel light waveguide problem was solved and the propagation constants with 10 significant figures were obtained. It proves that a simple SCF method for this problem is superior very much to the finite element method (FEM) and the others, both in accuracy and in calculating time, and that it should be used in the advanced light waveguide design. Moreover, the causes why the SCF method can reach high accuracy and the FEM can't be improved ultimately are discussed in detail.

**Key words** channel waveguide, self consistant field, correlation effect.