第 55 卷 第 3 期 2006 年 3 月
1000-3290/2006/55(03)/1023-06
物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA
Vol.55,No.3,March,2006

一种模拟倾斜折射率界面光波导的新方法*

余和军 夏金松 余金中

(中国科学院半导体研究所集成光电子学国家重点联合实验室,北京 100083)

(2005 年 7 月 1 日收到;2005 年 8 月 1 日收到修改稿)

针对传统离散格式下,束传播方法(BPM)模拟倾斜折射率界面出现的问题,提出了一种简明且易于编程实现的改进方案.在横向上,通过坐标系变换和插值处理,以新颖的 7 点差分格式代替传统的 5 点差分方式;在纵向上,以四阶显式 Runge-Kutta 方法(RKBPM)代替二阶 Crank-Nicholson 算法(CNBPM),避免了求解不规则矩阵方程,从而使计算效率显著提高.

关键词:束传播方法,Runge-Kutta 方法,光波导,脊形波导

PACC:0340K,4280L,8760F

1. 引 言

在各种模拟光波导器件的数值方法中[1—4],有限差分束传播方法(FD-BPM)是相对简单有效的一种,因而在集成光学中得到了广泛应用.但是,大多数 BPM 的离散格式都只是针对垂直或平行于坐标系的折射率界面.当折射率界面相对坐标轴倾斜时,普通离散格式等效的阶梯状折射率界面和真实界面完全不同,即不能准确表述实际波导边界,因此在解模时计算精度降低甚至会出现数值发散.

针对这个问题,文献[5,6]给出了改进表达式,但都不能从根本上解决问题;文献[7]采用类似于有限时域差分(FDTD)的 Yee 元胞离散方式.这种方法本质上属于 FDTD 算法的范畴,不能用于常规 BPM 算法中;Chiang 等人提出的方法[8]虽然功能强大,但需在每个界面点处求解一个 18×18 复矩阵的逆,计算效率因此下降约 20%;为此,本文提出一种改进的 BPM 算法,并通过计算实例证明了该方法的高效性与可靠性.

2. 理论推导

2.1. 横向离散:七点差分格式

如图 1 所示,假定倾斜界面左、右两边介质的折射率分别为 n_1 和 n_2,整数对(i,j)表示离散点在计算窗口中的位置.根据图 1 所示几何关系,可以设定 X 方向和 Y 方向的离散步长 Δx 和 Δy 满足关系

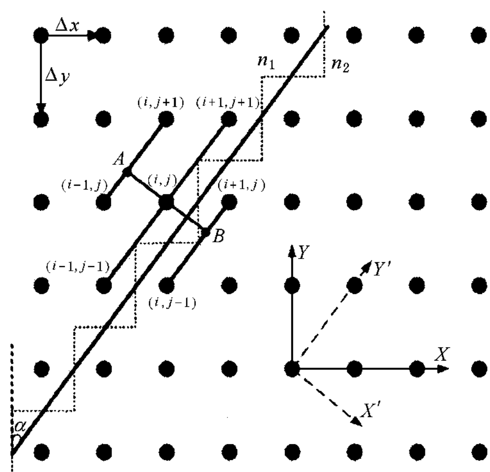

图 1 倾斜折射率界面的 7 点差分格式示意图

$$\Delta x = \Delta y\tan(\alpha). \tag{1}$$

在传统的差分格式中,某点(i,j)的场量可由其上$(i,j+1)$、下$(i,j-1)$、左$(i-1,j)$、右$(i+1,j)$四点的场值表示,其等效的折射率界面如图 1 中阶梯状的虚线所示,该界面与实际界面有很大差别,是造成图 2 所示解模时数值发散的主要原因.为此,新提出的差分格式额外引入了对角点$(i-1,j-1)$和$(i+1,j+1)$,同时,基于倾斜的折射率界面建立新坐标系 $X'Y'$,则新旧坐标系下剖分网格的大小具有

* 国家高技术研究发展计划(批准号:2002AA312060),国家重点基础研究发展计划(批准号:G20000366)资助的课题.

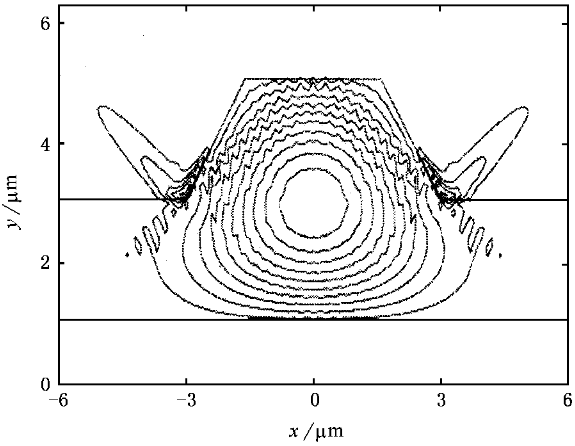

图 2 传统离散格式模拟梯形截面波导数值发散的情况

如下关系：

$$(\Delta y')^2 = \Delta x^2 + \Delta y^2, \tag{2}$$

$$\Delta x'\Delta y' = \Delta x\Delta y. \tag{3}$$

对 TE 模,其二阶偏微分在不同的坐标系下分别表示为

$$\nabla_t^2 E_x = \frac{\partial^2 E_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} = \frac{\partial E_x}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial y'^2}. \tag{4}$$

对上式右侧两项进行离散,离散时 A,B 两点的电场值分别用其斜上、下两个点的电场进行插值,并利用(2),(3)两式给出的坐标关系,最终推导出[9]

$$\begin{aligned}\nabla_t^2 E_x &= aE_x(i-1,j-1) + bE_x(i-1,j)\\ &\quad + cE_x(i,j-1) + dE_x(i,j) + eE_x(i,j+1)\\ &\quad + fE_x(i+1,j) + gE_x(i+1,j+1),\end{aligned} \tag{5}$$

式中各项系数分别为

$$a = \frac{1}{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2},$$

$$b = \frac{1}{(\Delta y)^2}\left(\frac{n_1^2\sin^2\alpha + n_2^2\cos^2\alpha + n_2^2}{n_1^2 + n_2^2}\right),$$

$$c = \frac{1}{(\Delta x)^2},$$

$$\begin{aligned}d &= \frac{-2}{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2} - \frac{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2}{(\Delta x\Delta y)^2}\\ &\quad \times\left(\frac{2n_1^2 + n_2^2 + n_1^2\cos^2\alpha + n_2^2\sin^2\alpha}{n_1^2 + n_2^2}\right),\end{aligned}$$

$$e = \frac{1}{(\Delta x)^2}\left(\frac{n_1^2\sin^2\alpha + n_2^2\cos^2\alpha + n_2^2}{n_1^2 + n_2^2}\right),$$

$$f = \frac{1}{(\Delta y)^2},$$

$$g = \frac{1}{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2}.$$

(5)式表达 7 点差分格式描述的折射率界面与实际界面完全符合,从而解决了传统差分格式模拟非四方波导时出现的数值发散等问题.

2.2. 纵向离散:四阶 Rung-Kutta 算法

传统 BPM 在纵向上采用二阶精度的 CN 离散格式[10],把连续的光传输方程转化为规则的线性方程组,然后用高效的交替方向法(ADI)[3]求解. 但在新的 7 点差分格式下,采用 CN 格式得到的线性方程组系数不再是块状三对角矩阵,需采用迭代法求解,这将在一定程度上降低计算效率. 因此,在纵向上进行算法改进将有助于提高计算效率.

Runge-Kutta 方法是求解常微分方程的常用数值算法[11],它间接使用 Taylor 展开式构造各阶精度的隐式、半隐式或显式表达式,但最常见的是四阶显格式. 比如,对常微分方程

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = f(x,y), f(x_0) = y_0, \tag{6}$$

采用经典四级四阶显式 Runge-Kutta 算法的求解公式为[11]

$$\begin{aligned}y_{n+1} &= y_n + h(R_1 + 2R_2 + 2R_3 + R_4)/6 + o(h^4),\\ R_1 &= f(x_n, y_n),\\ R_2 &= f(x_n + h/2, y_n + hR_1/2),\\ R_3 &= f(x_n + h/2, y_n + hR_2/2),\\ R_4 &= f(x_n + h, y_n + hR_3).\end{aligned} \tag{7}$$

本文将根据上式构造光电场的纵向离散格式,这与文献[12]实际上是异曲同工的,因为后者把电场的二阶微分项直接用 Taylor 公式展开到 $o(x^4)$,从而提高计算精度. 作为一种间接的 Taylor 展开方法,RK 方法可以达到相同的精度且意义更为明显,计算效率也更高,这正是新 7 点格式下以 RKBPM 取代 CNBPM 的依据.

对于傍轴传输和缓变包络近似下的半矢量 BPM 方程(标量和全矢量方程的推导同理)

$$\frac{\partial}{\partial z}\begin{pmatrix}\tilde{E}_x\\ \tilde{E}_y\end{pmatrix} = \frac{-j}{2n_0k_0}\begin{pmatrix}P_{xx} & 0\\ 0 & P_{yy}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\tilde{E}_x\\ \tilde{E}_y\end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned}P_{xx}\tilde{E}_x &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{n^2}\frac{\partial}{\partial x}(n^2\tilde{E}_x)\right)\\ &\quad + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\tilde{E}_x + (n^2 - n_0^2)k_0^2\tilde{E}_x,\\ P_{yy}\tilde{E}_y &= \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{n^2}\frac{\partial}{\partial y}(n^2\tilde{E}_y)\right)\\ &\quad + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\tilde{E}_y + (n^2 - n_0^2)k_0^2\tilde{E}_y.\end{aligned} \tag{8}$$

根据 Runge-Kutta 算法思想，光传播方向上第 k 步的光电场 $\Phi(i,j,k)$（Φ 可以是 E_x 或 E_y）和第 $k+1$ 步的光电场 $\Phi(i,j,k+1)$ 满足如下关系：

$$\Phi(i,j,k+1)=\Phi(i,j,k)+\frac{1}{6}[R_1(i,j,k)+2R_2(i,j,k)+2R_3(i,j,k)+R_4(i,j,k)], \tag{9}$$

$$\begin{aligned}R_1(i,j,k)=\frac{\Delta z}{2jn_0k_0}\Big\{&a\Phi(i-1,j-1,k)+b\Phi(i-1,j,k)+c\Phi(i,j-1,k)+d\Phi(i,j,k)\\&+e\Phi(i,j+1,k)+f\Phi(i+1,j,k)+g\Phi(i+1,j+1,k)\\&+[n^2(i,j,k)-n_0^2]k_0^2\Phi(i,j,k)\Big\},\end{aligned} \tag{10}$$

$$\begin{aligned}R_2(i,j,k)=\frac{\Delta z}{2jn_0k_0}\Big\{&a\Big[\Phi(i-1,j-1,k)+\frac{1}{2}R_1(i-1,j-1,k)\Big]\\&+b\Big[\Phi(i-1,j,k)+\frac{1}{2}R_1(i-1,j,k)\Big]+c\Big[\Phi(i,j-1,k)+\frac{1}{2}R_1(i,j-1,k)\Big]\\&+d\Big[\Phi(i,j,k)+\frac{1}{2}R_1(i,j,k)\Big]+e\Big[\Phi(i,j+1,k)+\frac{1}{2}R_1(i,j+1,k)\Big]\\&+f\Big[\Phi(i+1,j,k)+\frac{1}{2}R_1(i+1,j,k)\Big]+g\Big[\Phi(i+1,j+1,k)+\frac{1}{2}R_1(i+1,j+1,k)\Big]\\&+[n^2(i,j,k)-n_0^2]k_0^2\Big[\Phi(i,j,k)+\frac{1}{2}R_1(i,j,k)\Big]\Big\},\end{aligned} \tag{11}$$

$$\begin{aligned}R_3(i,j,k)=\frac{\Delta z}{2jn_0k_0}\Big\{&a\Big[\Phi(i-1,j-1,k)+\frac{1}{2}R_2(i-1,j-1,k)\Big]\\&+b\Big[\Phi(i-1,j,k)+\frac{1}{2}R_2(i-1,j,k)\Big]+c\Big[\Phi(i,j-1,k)+\frac{1}{2}R_2(i,j-1,k)\Big]\\&+d\Big[\Phi(i,j,k)+\frac{1}{2}R_2(i,j,k)\Big]+e\Big[\Phi(i,j+1,k)+\frac{1}{2}R_2(i,j+1,k)\Big]\\&+f\Big[\Phi(i+1,j,k)+\frac{1}{2}R_2(i+1,j,k)\Big]+g\Big[\Phi(i+1,j+1,k)+\frac{1}{2}R_2(i+1,j+1,k)\Big]\\&+[n^2(i,j,k)-n_0^2]k_0^2\Big[\Phi(i,j,k)+\frac{1}{2}R_2(i,j,k)\Big]\Big\},\end{aligned} \tag{12}$$

$$\begin{aligned}R_4(i,j,k)=\frac{\Delta z}{2jn_0k_0}\Big\{&a[\Phi(i-1,j-1,k)+R_3(i-1,j-1,k)]+b[\Phi(i-1,j,k)+R_3(i-1,j,k)]\\&+c[\Phi(i,j-1,k)+R_3(i,j-1,k)]+d[\Phi(i,j,k)+R_3(i,j,k)]\\&+e[\Phi(i,j+1,k)+R_3(i,j+1,k)]+f[\Phi(i+1,j,k)+R_3(i+1,j,k)]\\&+g[\Phi(i+1,j+1,k)+R_3(i+1,j+1,k)]\\&+[n^2(i,j,k)-n_0^2]k_0^2[\Phi(i,j,k)+R_3(i,j,k)]\Big\}.\end{aligned} \tag{13}$$

(9)—(13)式给出了 Runge-Kutta 差分格式的 BPM 方程．显而易见，这种方法避免了求解运算量很大的不规则矩阵方程，能够达到四阶精度且易于编程实现．在计算窗口的边界，可以采用简单实用的完全透明边界条件[13]以减小波反射引起的数值误差．

3．结果和讨论

由于梯形截面光波导的模式参数无解析解，为了验证 RKBPM 计算的精确性，首先求解了具有解析解的长直平板波导的模式，求解时完整的计算流程如图 3 所示，该流程也适用于在 7 点差分格式下

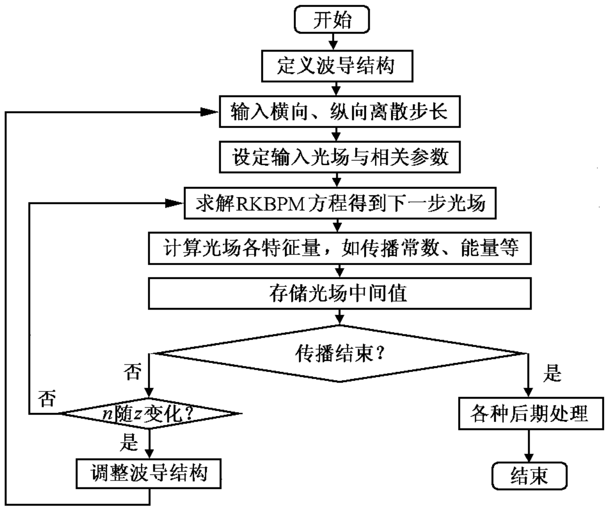

图 3 采用 RKBPM 进行光波导分析的流程图

求解各种非四方截面波导的模式. 取平板波导的高度、芯层折射率、上、下包层折射率和工作波长分别为 2，2.16，2.15 和 1.55μm. 图 4 给出了相同的横向离散步长下，RKBPM 与 CNBPM 模拟 TE_0 模（电场位于平板平面内）传输 1cm 时能量损耗的计算误差. (a)图为计算误差与传输方向计算步长的依赖关系. 由于 RKBPM 为四阶精度，而 CNBPM 仅为二阶精度，随着离散步长的加大，前者的计算误差基本不变且保持在趋于零的较低水平，但后者的误差急剧提高，当离散步长大于 0.1μm 时，能量损耗的计算误差已经超过 10%；(b)图为传输损耗的计算误差和波导长度的函数关系，取计算步长为 0.05μm. 同样由于精度提高，RKBPM 的计算误差基本不受波导长度的影响，但 CNBPM 的误差则几乎与波导长度成线性递增关系. 当波导长度达到 0.5cm 时，计算误差大于 8%. 因此，CNBPM 可以选择的离散步长区间很小，而且，当波导长度达到厘米量级时，计算误差将十分显著.

在此基础上，用 7 点差分格式结合 RKBPM 求解了梯形横截面波导的模场分布. 为便于比较，所选参数与文献[9]相同，波导内、外脊高分别为 4μm 和 2μm，内脊宽 3μm，$n_1 = 3.5$，$n_2 = n_3 = 1.5$，截面倾斜角 $a = 35.3°$. 图 5 给出的是输入高斯光束传播 3mm 后的准 TE 和准 TM 模. 可见，波导边界处的光场并未扭曲变形，表明新方法有效避免了数值发散，求出模有效折射率分别为 3.49232 和 3.49185，文献[9]的计算结果分别为 3.49230 和 3.49188. 但采用相同的个人计算机（CPU P42.26GHz，内存 512MB）和相同计算步长（$\Delta x = 0.01\mu m$，$\Delta y = 0.0173\mu m$，$\Delta z = 0.05\mu m$），本文方法与文献[9]相比，计算时间由 110.8s 降低到 74.1s，计算速度明显提高.

为了进一步说明 RKBPM 的高效性，采用相同的 7 点离散参数，比较了 RKBPM 和 CNBPM 求解上述梯形波导的计算时间. 如图 6 所示，随着波导长度的增加，二者的计算时间都接近于线性递增，但 CNBPM 的计算时间增加得更快. 这是因为，CNBPM 最终把光传输方程转化为一个矩阵方程，其系数矩阵由离散点的折射率构成，但 7 点格式下生成的折射率系数矩阵是不规则的，由于求解大规模、不规则的矩阵方程需要消耗大量的计算机资源，从而降低了计算效率. 在 RKBPM 中，每一步的光电场由前一步的光电场与四个增量值（由光传输方程确定）的线性组合求和得出，这种直接的、线性的计算过程对计

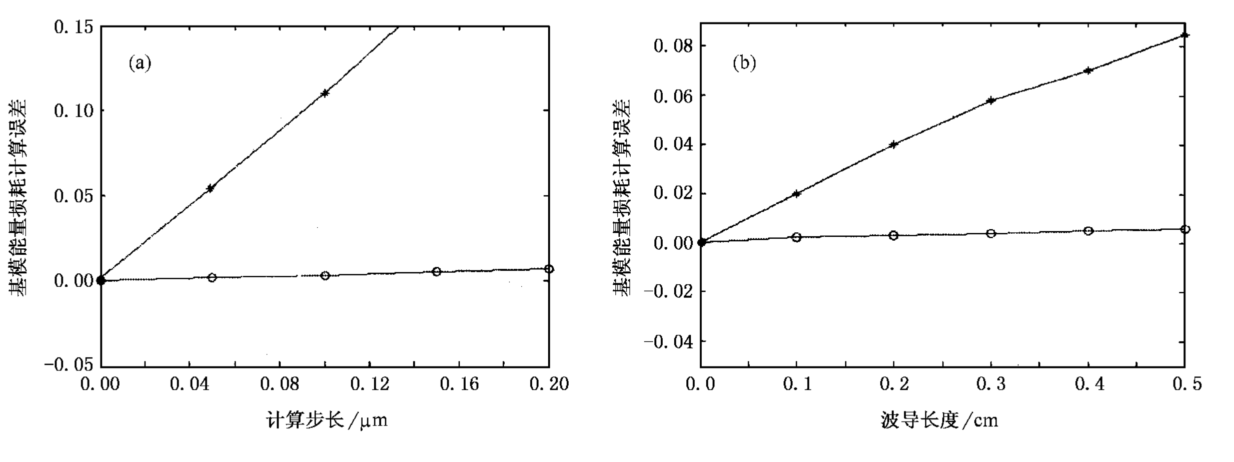

图 4 RKBMP（○○○）和 CNBPM（＊＊＊）计算平板波导能量损耗的误差比较 (a)数值误差与传输方向离散步长的关系；(b)数值误差与波导长度的依赖关系

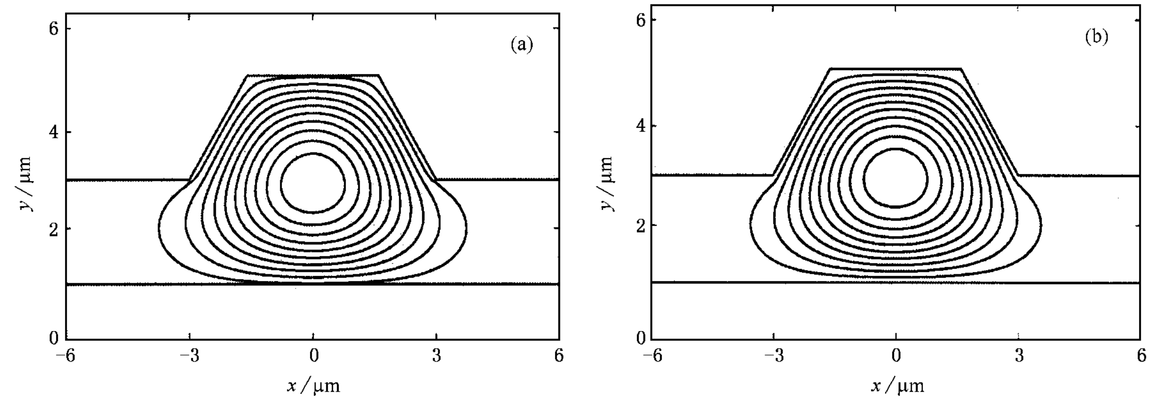

图 5　梯形截面光波导基横模分布的等高线图　(a)准 TE 模；(b)准 TM 模

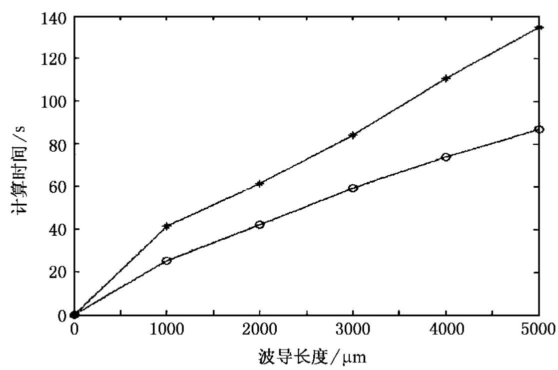

图 6　横向采用 7 点差分格式，纵向分别用 RKBPM(○○○)和 CNBPM(＊＊＊)的计算时间比较

算机资源的要求低得多. 因此，在较为复杂的光子器件模拟中，无论从计算精度还是从计算效率角度考虑，RKBPM 的优势都是显而易见的.

此外，还求解了正三角形横截面波导中的模式特性. 取波导芯层和外包层折射率分别为 3.5 和 1.5，波导横截面边长为 6μm，图 7 示出了准 TE 模和准 TM 模的基模场分布，求出折射率分别为 3.48801 和 3.48788，计算时间由文献[9]的 198.7s 降低到 125.4s.

需要说明的是，(9)—(13)式给出的 RKBPM 为显式格式，其稳定性不如 CNBPM. 但是，当出现计算不稳定的情况时，可以采用隐式和半隐式的 RKBPM[11] 克服该问题. 与显格式相比，级数为 s 的隐格式可以获得 $2s$ 阶的计算精度，缺点是需要求解非线性方程；半隐式格式既能保持隐格式的稳定性，又不需要求解非线性方程，但算法相对复杂. 根据不同情况，灵活采用不同格式的 RKBPM 能进一步扩大该算法的应用范围，突显其实用性.

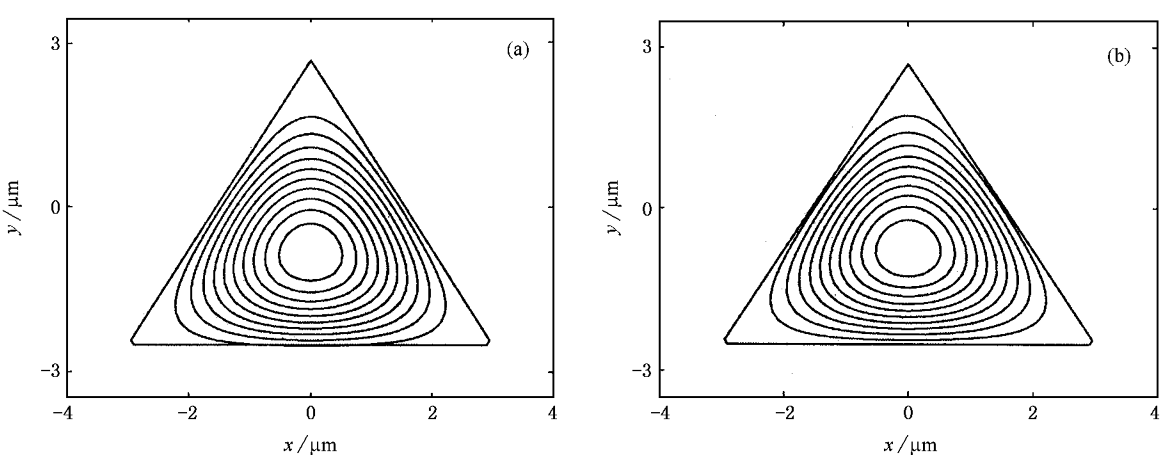

图 7　横截面为正三角形的光波导的基横模分布　(a)准 TE 模；(b)准 TM 模

4. 结 论

传统 5 点差分格式不能精确定义倾斜的折射率界面,因此在波导解模时容易出现数值发散. 为此,本文对常规 BPM 进行了改进,得到 7 点差分格式下的 RKBPM 算法,并通过计算实例证明了新方法的可靠性与高效性,从而可广泛用于各种非四方横截面光波导的模拟.

[1] Kim C M, Ramaswamy R V 1989 *J. Lightwave Technol*. **7** 1581

[2] Yee K S 1996 *IEEE Trans. Antennas Propagat*. **4** 302

[3] Yoneta S, Koshiba M, Tsuji Y 1999 *J. Lightwave Technol*. **11** 2398

[4] Hsueh Y L, Yang M C, Chang H C 1999 *J. Lightwave Technol*. **17** 2389

[5] Xia J S, Yu J Z 2003 *Acta Phys. Sin*. **52** 515 (in Chinese) [夏金松、余金中 2003 物理学报 **52** 515]

[6] Yamauchi J, Sekiguchi M, Takahashi G *et al* 1998 *IEEE Photonics Technology Letter* **10** 1127

[7] Ando T, Nakayama H, Numata S *et al* 2002 *J. Lightwave Technol*. **20** 1627

[8] Chiang Y C, Chiou Y P, Chang H C 2002 *J. Lightwave Technol*. **20** 1609

[9] Xia J S, Yu J Z 2003 *IEEE Photonics Technology Letters* **15** 1237

[10] Chung Y, Dagli N 1990 *IEEE J. Quantum Electron*. **26** 1335

[11] Yu D H, Tang H Z 2003 *Numerical Methods for Differential Equations* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [余德浩、汤华中 2003 微分方程数值解法 (北京:科学出版社)]

[12] Vassallo C 1992 *Proc. Inst. Elect. Eng*. **139** 137

[13] Hadley G R 1992 *IEEE Quantum Electron* **28** 363

A highly efficient beam propagation method for modeling step-index waveguides with tilt interface*

Yu He-Jun Xia Jin-Song Yu Jin-Zhong

(*State Key Laboratory on Integrated Optoelectronics*, *Institute of Semiconductors*, *Chinese Academy of Sciences*, *Beijing* 100083, *China*)

(Received 1 July 2005; revised manuscript received 1 August 2005)

Abstract

Based on a new finite-difference scheme and Runge-Kutta method together with transparent boundary conditions (TBCs), a novel beam propagation method to model step-index waveguides with tilt interfaces is presented. The modified scheme provides an precies description of the tilt interface of the nonrectangular waveguide structure, showing a much better efficiency and accuracy comparing with the previously presented formulas.

Keywords: BPM, Runge-Kutta method, optical waveguide, rib waveguide

PACC: 0340K, 4280L, 8760F

* Project supported by the National High Technology Development Program of China (Grant No. 2002AA312060) and by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. G20000366).