

漸變式光纖元件之模擬

1. 簡介

1.1. 研究動機

光電科技是快速變化且具競爭力的產業，能夠在商場上成功取決於最好的技術表現與最短的研發時間。利用電腦模擬是達成這些目標一個很有效的方法，比起實驗的測試，電腦模擬產品設計的表現不但經濟而且快速。

Finite Difference Beam Propagation Method(FD-BPM)是最被廣泛使用在光電設計的數值模擬技巧之一。FD-BPM 是一個有效、直觀而且彈性的方法，可探討的現象包括：偏極化相關、耦合、非線性效應等。很多光電元件設計都是利用 FD-BPM 來完成，例如被動波導元件(passive waveguiding device)、雷射(laser)、偏極轉換器(polarization rotator)、耦合器(coupler)、濾波器(filter)甚至是複雜的光路(photronics circuit)設計等。本論文之研究即是要來發展可用來模擬漸變式光纖元件之 FD-BPM 模擬技術。

1.2. 研究背景 [11][12][13]

光通信系統利用 wavelength-division multiplexing(WDM)的技術，使不同波長的訊號可以在同一條光纖中傳播，以提升速度。因此

需要可調的 add-drop filter 來插入或取出不同波長的訊號。

目前 WDM 元件如聲光可調濾波器，一般使用平面積體光學的技術來製造，但是因為與光纖的波導不匹配，所以會造成損耗，而且結構複雜。另外，聲光可調濾波器也已經有全光纖形式，但是需要外加元件取出 pass-band 訊號，同樣結構複雜而且有損耗。

Adiabatic coupler 又稱為 Null coupler，顧名思義就是表示在一般情況下 Null coupler 並沒有耦合的現象發生。Null coupler 不需要一個嚴格定義的 critical power-transfer length，所以比起 mode interference coupler 與波長和偏極化有較小的相依性。光從 mode interference coupler 的一條光纖打入要回到同一條光纖，相位關係必須剛好才會發生，也就是必須符合某些特定的耦合器長度與波長的組合，否則耦合率不會是 0。Null coupler 卻像是一對不作用的光纖，耦合率與長度無關。另一方面，Null coupler 因為必須符合 Adiabatic mode transformation 的條件，以避免 extra radiation loss 和 unwanted mode excitation，元件長度要比 mode interference coupler 來得長。

Null coupler 的設計有兩個重點：(1) coupled-waveguide asymmetry (2) coupler taper shape。利用 Null coupler 可製造出全光纖的窄頻聲光濾波器。Null coupler 是將兩條直徑不同（或兩

條相同的但其中一條預先 taper) 的單模光纖熔接在一起的 taper coupler，由於兩條光纖的不匹配，實際上並沒有耦合的現象發生，不會有 beam splitter 的功能。光從一條 V-number 較大的光纖進入到 coupler waist 變成 fundamental mode (even lowest order mode)，然後從同一條光纖出去；光從另一條 V-number 較小的光纖進入 coupler waist 變成 second mode (odd lowest order mode)，然後從同一條光纖出去。光在 coupler waist 傳播沒有發生任何的作用，這種行為在平面波導稱為 mode splitting，是來自於 taper transition 的光學性質。

Taper waist 事實上是個多模波導，有很多 cladding mode。Fundamental mode 的光進入 taper waist 可以利用聲波 couple 到 second mode，反之亦然。Taper waist 作用區域的性質是當 taper 製造好就已經固定了的，waist 直徑小到 $1 \mu\text{m}$ 時，聲波頻率可以操作在數百 MHz。

在 Null coupler 上利用濺鍍法沉積高頻的 piezoelectric transducer 用來激發 100MHz 區間的聲波，聲波會在 coupler waist 傳播，控制耦合器的光學性質。單一頻率的聲波，可以使單一頻率的光波發生耦合現象，可應用在 WDM 光通信系統，當作 add-drop filter、frequency shifter 或 optical switch。

電力驅動的 transducer 產生聲波，會在 coupler waist 造成週期性的折射率擾動。某一波長的光從一條光纖進入，當 taper waist 的 first (β_1) and second (β_2) lowest-order spatial modes 模態間的 beatlength (L_B) 與聲波波長 (Λ) 匹配時，就會發生耦合現象，而從另一條光纖出去，其他波長的光不會耦合。改變聲波頻率就是改變共振波長。coupler 和 transducer 形成了 electrically-tunable filter，一條光纖的輸出是 pass-band 的訊號，另一條光纖的輸出是 notch 的訊號。

$$\Lambda = L_B = \frac{2\pi}{\beta_1 - \beta_2} = \frac{2\pi}{\Delta\beta} \quad (1.1)$$

濾波器的可調範圍約幾十個 nanometer，優點是全光纖、低損耗 (<0.1 dB)、結構簡單、不需額外光學元件、花費低、驅動功率小 (~1 mW)。

元件的頻譜響應決定於聲波頻率。低頻聲波 (~1 MHz) 頻譜寬，高頻聲波 (~100 MHz) 頻譜窄。要製造 narrowband 的 filter，聲波頻率必須夠高，如何有效又穩定的產生高頻聲波是必須的，例如利用 zinc oxide (ZnO) 和 barium sodium niobate (BSN) 薄膜濺度製作高頻的 transducer。

另外一種採用 Null coupler 的 OADM 是在 coupler waist 用 UV 光打一個 tilted grating。光從一條 V-number 較大的光纖左端進入

到 coupler waist，符合 grating 的 Bragg wavelength 的光發生模態轉換，由 fundamental mode (even lowest order mode) 轉換到 second mode (odd lowest order mode)，反射後由 V-number 較小的光纖左端出去，其他波長的光從同一條 V-number 較大的光纖右端出去，就是加減器的 Drop 的功能。同理，光從一條 V-number 較小的光纖右端進入到 coupler waist，符合 grating 的 Bragg wavelength 的光發生模態轉換，由 second mode (odd lowest order mode) 轉換到 fundamental mode (even lowest order mode)，反射後由 V-number 較大的光纖右端出去，其他波長的光從同一條 V-number 較小的光纖左端出去，就是加減器的 Add 的功能。Grating 的 tilt 角度則決定了耦合的效率。



本論文的主要研究內容即是要利用 BPM 的方法來模擬漸變式 (Adiabatic) 光纖元件，以瞭解其特性並進行設計。

2. 有限差分光束傳播法之理論研究

2.1. Scalar Paraxial BPM [14]

BPM 本質上是一種用來近似單頻光波方程式的數值方法。如果只考慮純量場，單頻光的 Helmholtz Equation 寫成：

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + k(x, y, z)^2 \cdot \phi = 0 \quad (2.1)$$

其中 $k(x, y, z) = k_0 \cdot n(x, y, z)$

$$k_0 = \frac{2 \cdot \pi}{\lambda}$$

$n(x, y, z)$ 為折射率分佈。

在一般的波導問題裡，純量場 ϕ 中快速變化的是相位，振幅變化不大，可以把 ϕ 寫成 Slow Varying Field u 與相位項的乘積：

$$\phi(x, y, z) = u(x, y, z) \cdot e^{i\bar{k} \cdot z} \quad (2.2)$$

其中 $\bar{k} = k_0 \cdot \bar{n}$

\bar{k} 是一個常數，用來表示純量場 ϕ 的平均相位變化，

\bar{n} 是參考折射率 (reference refractive index)。

將(2.2)代入 Helmholtz Equation 得到：

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + 2j \cdot \bar{k} \cdot \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + (k^2 - \bar{k}^2) \cdot u = 0 \quad (2.3)$$

(2.3) 式中第一項相對於第二項足夠小，可以忽略，這就是 Slow Varying Envelope Approximation，在這裡也叫做 Paraxial Approximation。

$$2j \cdot \bar{k} \cdot \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + (k^2 - \bar{k}^2) \cdot u \quad (2.4)$$

上式是三維情況下基本的 BPM 方程式，給定一個初始的輸入場 $u(x, y, z=0)$ ，可以決定在空間中 $z > 0$ 時場的演化。這樣做的好處一個是 Slow Varying Field u 可以沿著 z 軸畫出來，另外則是消去二次微分項可以簡化需要迭代或固有值分析的二次邊界問題，變成一次的初始值問題，這也是 BPM 比直接數值解 Helmholtz Equation 效率高至少 N_z 倍的原因。但是這樣的簡化並不是沒有代價的。Slow Varying Envelope Approximation 限制了只能考慮主要沿著 z 軸方向傳播、折射率變化不大的場，同時消去二次微分項也等於是銷去了可能的反射波的解。不過也可以進一步利用 Wide-angle BPM 和 Bi-directional BPM 來修正。



2.2. Simple BPM [5]

如果只考慮二維（一維截面）的情況，slab waveguide 的折射率分佈為 $n(x, z)$ ，利用 Paraxial Approximation，可以將 Helmholtz Equation 簡化為 Paraxial Wave Equation：

$$2j \cdot k_0 \cdot n_0 \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + k_0^2 \cdot [n^2(x, z) - n_0^2] \cdot u \quad (2.5)$$

利用 Crank-Nicholson method 將偏微分方程式以差分形式表示：

$$2j \cdot k_0 \cdot n_0 \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta z} = \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2 \cdot u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{2 \cdot \Delta x^2} + \frac{u_{i+1}^n - 2 \cdot u_i^n + u_{i-1}^n}{2 \cdot \Delta x^2} + k_0^2 \cdot [n^2(x_i, z_{n+1/2}) - n_0^2] \cdot \frac{u_i^{n+1} + u_i^n}{2} \quad (2.6)$$

(2.6)式可寫成一個 tridiagonal 矩陣方程式：

$$-a \cdot u_{i-1}^{n+1} + b \cdot u_i^{n+1} - a \cdot u_{i+1}^{n+1} = a \cdot u_{i-1}^n + c \cdot u_i^n + a \cdot u_{i+1}^n \quad (2.7)$$

$$\text{其中 } a = \frac{\Delta z}{2 \cdot \Delta x^2}$$

$$b = \frac{\Delta z}{\Delta x^2} - \frac{\Delta z}{2} \cdot k_0^2 \cdot (n_i^2(z + \Delta z) - n_0^2) + 2 \cdot j \cdot k_0 \cdot n_0$$

$$c = -\frac{\Delta z}{\Delta x^2} + \frac{\Delta z}{2} \cdot k_0^2 \cdot (n_i^2(z) - n_0^2) + 2 \cdot j \cdot k_0 \cdot n_0$$

數值計算時，場是表示於一有限的計算區域，利用上式無法求出邊界點 $i=1$ 和 $i=N$ 的值，必須引用邊界條件來求得。如果邊界條件不適當將會導致入射場在邊界產生人造的反射，如果將入射場的邊界點的值假設為 0 是不適當的，因為這樣等同於是放置一個完美的反射牆在邊界上。在計算區域的邊界上放置人造的吸收材料雖然可以減少反射，但是調整吸收層的參數使反射達到最小的過程卻是相當的麻煩。一個被廣泛採用的邊界條件叫做 Transparent Boundary Condition (TBC)，基本上是假設場在邊界附近的行為像是往外傳播的平面波，這樣的平面波假設可以把邊界點的場和鄰近的內部點關聯起來，完成下一步的計算。一般來說，TBC 可以非常有效的允許 radiation wave 自由地逃出計算區域，然而引用 TBC 不見得保證完美，也是會有不理想的情況發生，所以還是有許多其他邊界條件被提出來。以上的數值

方法可以利用 Alternating direction implicit method (ADI) 擴展到三維情況。

2.3. Full-Vectorial BPM [1]

Beam Propagation Method 是最常被用來模擬電磁波在導波光電元件和光纖光學元件的方法之一，傳統的 BPM 只能解決純量波方程式 (scalar wave equation)，電磁波的向量性質被乎略了。大部分實用的光學波導結構在 transverse dimensions 的折射率變化小或緩慢，偏極化耦合弱而被忽略，然而向量性質在某些時候可能會變得重要，即使是小的折射率變化，在傳播過一段很長的距離後 (與波長相比)，偏極化的特性將會變得重要。所以模擬向量電磁波在光學導波元件的傳播是必須的。

向量電磁場的單向傳播可以用兩組耦合方程式來表示：

transverse electric and magnetic fields。利用 Finite Difference Method 有限差分法將這兩組耦合方程式當作初始值問題 initial value problem 分別來解。

由 Maxwell' s equations 出發

$$\nabla \times E = -j\omega\mu_0 H$$

$$\nabla \times H = j\omega\varepsilon_0 n^2 E$$

$$\nabla \cdot (n^2 E) = 0$$

$$\nabla \cdot H = 0 \quad (2.8)$$

其中 $n = n(x, y, z)$ 是介質的折射率，可以描述物質的色散、吸收或增益。

$$\nabla \times \nabla \times E - n^2 k^2 E = 0 \quad (2.9)$$

$$\nabla \times \nabla \times = \nabla(\nabla \cdot) - \nabla^2$$

連續波在線性和均勻介質中，vector Helmholtz equation 寫成：

$$\nabla^2 E + n^2 k^2 E = \nabla(\nabla \cdot E) \quad (2.10)$$

$$\text{其中 } k = \omega \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$$

$$n^2 = \epsilon_r - j \frac{\sigma}{\omega \epsilon_0}$$

假設波在 perfectly insulating ($\sigma=0$) and z invariant media ($\frac{\partial n}{\partial z} \rightarrow 0$)，transverse electric field E_t 的微分方程式 (H_t 的微分方程式也可類同導出)

$$\nabla^2 E_t + n^2 k^2 E_t = \nabla_t (\nabla_t \cdot E_t + \frac{\partial E_z}{\partial z}) \quad (2.11)$$

由 $\nabla \cdot (n^2 E) = 0$ 可得

$$\nabla_t \cdot (n^2 E_t) + \frac{\partial n^2}{\partial z} E_z + n^2 \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0 \quad (2.12)$$

因為 $\frac{\partial n}{\partial z} \rightarrow 0$

$$\frac{\partial E_z}{\partial z} \approx -\frac{1}{n^2} \nabla_t \cdot (n^2 E_t) \quad (2.13)$$

代入(2.11)式得

$$\nabla^2 E_t + n^2 k^2 E_t = -\nabla_t (\nabla_t \ln n^2 \cdot E_t) \quad (2.14)$$

$E_t = E_t \cdot e^{-j n_0 k \cdot z}$ 代入(2.14)式

引用 slowly varying envelope approximation i.e.

$$\left| \frac{\partial^2 E_t}{\partial z^2} \right| \ll 2n_0 k \left| \frac{\partial E_t}{\partial z} \right|$$

可以得到電場的 Paraxial vector wave equation

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_x}{\partial z} &= A_{xx} \cdot E_x + A_{xy} \cdot E_y \\ \frac{\partial E_y}{\partial z} &= A_{yx} \cdot E_x + A_{yy} \cdot E_y \end{aligned} \quad (2.15)$$

其中的微分運算子為

$$\begin{aligned} A_{xx} \cdot E_x &= \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{n^2} \frac{\partial}{\partial x} (n^2 \cdot E_x) \right] + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \cdot E_x + (n^2 - n_0^2) \cdot k^2 \cdot E_x \right\} \\ A_{yy} \cdot E_y &= \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} \cdot E_y + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{n^2} \frac{\partial}{\partial y} (n^2 \cdot E_y) \right] + (n^2 - n_0^2) \cdot k^2 \cdot E_y \right\} \\ A_{xy} \cdot E_y &= \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \cdot \left[\frac{1}{n^2} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \cdot (n^2 \cdot E_y) \right] - \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \cdot E_y \right\} \\ A_{yx} \cdot E_x &= \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \frac{\partial}{\partial y} \cdot \left[\frac{1}{n^2} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \cdot (n^2 \cdot E_x) \right] - \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \cdot E_x \right\} \end{aligned}$$

我們可以發現 transverse electric field 的分量是偏極化相依，而且互相耦合的。當在截面 transverse 方向上的折射率變化很快時，向量性質就變得重要了。

偏極化相依 (i.e. $A_{xx} \neq A_{yy}$) 和耦合 (i.e. $A_{xy} \neq A_{yx}$) 也與場 E_x 、 E_y 在 x、y 方向上折射率介面的場的不連續有關。

同理可以得到磁場的 Paraxial vector wave equation

$$\begin{aligned}\frac{\partial H_x}{\partial z} &= B_{xx} \cdot H_x + B_{xy} \cdot H_y \\ \frac{\partial H_y}{\partial z} &= B_{yx} \cdot H_x + B_{yy} \cdot H_y\end{aligned}\quad (2.16)$$

其中的微分運算子為

$$B_{xx} \cdot H_x = \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \frac{\partial^2 H_x}{\partial x^2} + n^2 \cdot \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{n^2} \cdot \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \right] + (n^2 - n_0^2) \cdot k^2 \cdot H_x \right\}$$

$$B_{yy} \cdot H_y = \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \frac{\partial^2 H_y}{\partial y^2} + n^2 \cdot \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{n^2} \cdot \frac{\partial H_y}{\partial x} \right) \right] + (n^2 - n_0^2) \cdot k^2 \cdot H_y \right\}$$

$$B_{xy} \cdot H_y = \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \frac{\partial^2 H_y}{\partial y \partial x} - n^2 \cdot \left[\frac{\partial}{\partial y} \cdot \left(\frac{1}{n^2} \cdot \frac{\partial H_y}{\partial x} \right) \right] \right\}$$

$$B_{yx} \cdot H_x = \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \frac{\partial^2 H_x}{\partial x \partial y} - n^2 \cdot \left[\frac{\partial}{\partial x} \cdot \left(\frac{1}{n^2} \cdot \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \right] \right\}$$

當求出電場和磁場後 可以計算延著 z 方向傳播的導波功率

$$P(z) = \frac{1}{4} \int (\hat{E}_t^* \times \hat{H}_t + \hat{E}_t \times \hat{H}_t^*) \cdot \hat{z} \cdot da \quad (2.17)$$

2.4. Semi-Vectorial BPM [2]

對二維結構而言，兩個偏極化沒有耦合現象

$$A_{xy} = A_{yx} = 0$$

$$B_{xy} = B_{yx} = 0 \quad (\text{semi-vectorial approximation})$$

$$(2.18)$$

可分別單獨求出 TE 和 TM wave 的 x, y 分量

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E_x}{\partial z} &= A_{xx} \cdot E_x && \text{x polarized transverse E field (TM)} \\
\frac{\partial E_y}{\partial z} &= A_{yy} \cdot E_y && \text{y polarized transverse E field (TE)} \\
\frac{\partial H_x}{\partial z} &= B_{xx} \cdot H_x && \text{x polarized transverse H field (TE)} \\
\frac{\partial H_y}{\partial z} &= B_{yy} \cdot H_y && \text{y polarized transverse H field (TM)}
\end{aligned}
\tag{2.19}$$

對一個三維結構，偏極化的耦合通常會存在，所以波在傳播時是 hybrid 的混合形式。然而兩個偏極化之間的耦合通常很弱，不會有很明顯的效應。除非一個結構是被設計用來產生偏極化的耦合現象，否則非對角的項 A_{xy} A_{yx} 是非常弱的，semi-vectorial approximation 可以將不同偏極化的的場去耦合，是很好的簡化問題的近似方法。



2.5. Finite Difference Scheme [2]

FD-BPM 的方法是在計算區域內利用 finite difference method 數值方法的網格結構來模擬光束傳播的情況。上述微分運算子可寫成離散的形式

$$A_{xx} \cdot E_x = \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \begin{aligned} & \frac{T_{m+1,n}^E \cdot E_x(m+1,n) - [2 - R_{m+1,n}^E - R_{m-1,n}^E] \cdot E_x(m,n) + T_{m-1,n}^E \cdot E_x(m-1,n)}{(\Delta x)^2} \\ & + \frac{E_x(m,n+1) - 2 \cdot E_x(m,n) + E_x(m,n-1)}{(\Delta y)^2} + [n^2(m,n,l) - n_0^2] \cdot k^2 \cdot E_x(m,n) \end{aligned} \right\}$$

其中

$$T_{m\pm 1,n}^E = \frac{2 \cdot n^2(m \pm 1, n, l)}{n^2(m \pm 1, n, l) + n^2(m, n, l)}$$

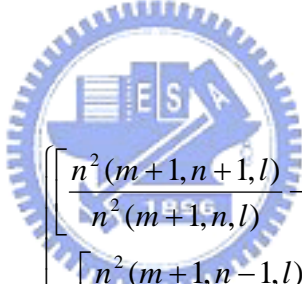
$$R_{m\pm 1,n}^E = T_{m\pm 1,n}^E - 1$$

$$A_{yy} \cdot E_y = \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \begin{array}{l} \frac{T_{m,n+1}^E \cdot E_y(m, n+1) + [2 - R_{m,n+1}^E - R_{m,n-1}^E] \cdot E_y(m, n) + T_{m,n-1}^E \cdot E_y(m, n-1)}{(\Delta x)^2} \\ + \frac{E_y(m+1, n) - 2 \cdot E_y(m, n) + E_y(m-1, n)}{(\Delta x)^2} + [n^2(m, n, l) - n_0^2] \cdot k^2 \cdot E_y(m, n) \end{array} \right\}$$

其中

$$T_{m,n\pm 1}^E = \frac{2 \cdot n^2(m, n \pm 1, l)}{n^2(m, n \pm 1, l) + n^2(m, n, l)}$$

$$R_{m,n\pm 1}^E = T_{m,n\pm 1}^E - 1$$



$$A_{xy} \cdot E_y = \frac{-j}{8 \cdot n_0 \cdot k \cdot \Delta x \cdot \Delta y} \cdot \left\{ \begin{array}{l} \left[\frac{n^2(m+1, n+1, l)}{n^2(m+1, n, l)} - 1 \right] \cdot E_y(m+1, n+1) \\ - \left[\frac{n^2(m+1, n-1, l)}{n^2(m+1, n, l)} - 1 \right] \cdot E_y(m+1, n-1) \\ - \left[\frac{n^2(m-1, n+1, l)}{n^2(m-1, n, l)} - 1 \right] \cdot E_y(m-1, n+1) \\ + \left[\frac{n^2(m-1, n-1, l)}{n^2(m-1, n, l)} - 1 \right] \cdot E_y(m-1, n-1) \end{array} \right\}$$

$$A_{yx} \cdot E_x = \frac{-j}{8 \cdot n_0 \cdot k \cdot \Delta y \cdot \Delta x} \cdot \left\{ \begin{array}{l} \left[\frac{n^2(m+1, n+1, l)}{n^2(m, n+1, l)} - 1 \right] \cdot E_x(m+1, n+1) \\ - \left[\frac{n^2(m+1, n-1, l)}{n^2(m, n+1, l)} - 1 \right] \cdot E_x(m+1, n-1) \\ - \left[\frac{n^2(m-1, n+1, l)}{n^2(m, n-1, l)} - 1 \right] \cdot E_x(m-1, n+1) \\ + \left[\frac{n^2(m-1, n-1, l)}{n^2(m, n-1, l)} - 1 \right] \cdot E_x(m-1, n-1) \end{array} \right\}$$

$$B_{xx} \cdot H_x = \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \begin{aligned} & \frac{H_x(m+1, n) - 2 \cdot H_x(m, n) + H_x(m-1, n)}{(\Delta x)^2} \\ & + \frac{T_{m, n+1}^H \cdot H_x(m, n+1) - [T_{m, n+1}^H + T_{m, n-1}^H] \cdot H_z(m, n) + T_{m, n-1}^H \cdot H_x(m, n-1)}{(\Delta y)^2} \\ & - [n^2(m, n, l) - n_0^2] \cdot k^2 \cdot H_x(m, n) \end{aligned} \right\}$$

其中

$$T_{m, n \pm 1}^H = \frac{2 \cdot n^2(m, n, l)}{n^2(m, n \pm 1, l) + n^2(m, n, l)}$$

$$B_{yy} \cdot H_x = \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \begin{aligned} & \frac{H_y(m, n+1) - 2 \cdot H_y(m, n) + H_y(m, n-1)}{(\Delta y)^2} \\ & + \frac{T_{m+1, n}^H \cdot H_y(m+1, n) - [T_{m+1, n}^H + T_{m-1, n}^H] \cdot H_y(m, n) + T_{m-1, n}^H \cdot H_y(m-1, n)}{(\Delta x)^2} \\ & - [n^2(m, n, l) - n_0^2] \cdot k^2 \cdot H_y(m, n) \end{aligned} \right\}$$

其中

$$T_{m \pm 1, n}^H = \frac{2 \cdot n^2(m, n, l)}{n^2(m \pm 1, n, l) + n^2(m, n, l)}$$

$$B_{xy} \cdot H_y = \frac{-j}{8 \cdot n_0 \cdot k \cdot \Delta x \cdot \Delta y} \cdot \left\{ \begin{aligned} & \left[1 - \frac{n^2(m, n, l)}{n^2(m, n+1, l)} \right] \cdot H_y(m+1, n+1) \\ & - \left[1 - \frac{n^2(m, n, l)}{n^2(m, n-1, l)} \right] \cdot H_y(m+1, n-1) \\ & - \left[1 - \frac{n^2(m, n, l)}{n^2(m, n+1, l)} \right] \cdot H_y(m-1, n+1) \\ & + \left[1 - \frac{n^2(m, n, l)}{n^2(m, n-1, l)} \right] \cdot H_y(m-1, n-1) \end{aligned} \right\}$$

$$B_{yx} \cdot H_x = \frac{-j}{8 \cdot n_0 \cdot k \cdot \Delta y \cdot \Delta x} \cdot \left\{ \begin{aligned} & \left[1 - \frac{n^2(m, n, l)}{n^2(m+1, n, l)} \right] \cdot H_x(m+1, n+1) \\ & - \left[1 - \frac{n^2(m, n, l)}{n^2(m-1, n, l)} \right] \cdot H_x(m-1, n+1) \\ & - \left[1 - \frac{n^2(m, n, l)}{n^2(m+1, n, l)} \right] \cdot H_x(m+1, n-1) \\ & + \left[1 - \frac{n^2(m, n, l)}{n^2(m-1, n, l)} \right] \cdot H_x(m-1, n-1) \end{aligned} \right\} \quad (2.20)$$

2.6. ADI method [1]

(2.15)式可以改寫成

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} A_{xx} & A_{xy} \\ A_{yx} & A_{yy} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} A_x + A_y & C \\ D & B_x + B_y \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} \\ &= \left(\begin{bmatrix} A_x & C \\ 0 & B_x \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} A_y & 0 \\ D & B_y \end{bmatrix} \right) \cdot \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.21)$$

其中

$$A_x E_x = \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{n^2} \frac{\partial}{\partial x} (n^2 \cdot E_x) \right] + \frac{1}{2} \cdot (n^2 - n_0^2) \cdot k^2 \cdot E_x \right\}$$

$$A_y E_x = \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \frac{\partial^2}{\partial y^2} \cdot E_x + \frac{1}{2} \cdot (n^2 - n_0^2) \cdot k^2 \cdot E_x \right\}$$

$$B_x E_y = \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} \cdot E_y + \frac{1}{2} \cdot (n^2 - n_0^2) \cdot k^2 \cdot E_y \right\}$$

$$B_y E_y = \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{n^2} \frac{\partial}{\partial y} (n^2 \cdot E_y) \right] + \frac{1}{2} \cdot (n^2 - n_0^2) \cdot k^2 \cdot E_y \right\}$$

$$CE_y = \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \cdot \left[\frac{1}{n^2} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \cdot (n^2 \cdot E_y) \right] - \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \cdot E_y \right\}$$

$$DE_x = \frac{-j}{2 \cdot n_0 \cdot k} \cdot \left\{ \frac{\partial}{\partial y} \cdot \left[\frac{1}{n^2} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \cdot (n^2 \cdot E_x) \right] - \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \cdot E_x \right\}$$

利用 Crank-Nicholson Scheme 將(2.21)式離散化

$$\frac{1}{\Delta z} \left(\begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix}^{n+1} - \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix}^n \right) = \left(\begin{bmatrix} A_x & C \\ 0 & B_x \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} A_y & 0 \\ D & B_y \end{bmatrix} \right) \cdot \frac{1}{2} \left(\begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix}^{n+1} + \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix}^n \right)$$

$$\left(1 - \frac{\Delta z}{2} \begin{bmatrix} A_x & C \\ 0 & B_x \end{bmatrix} - \frac{\Delta z}{2} \begin{bmatrix} A_y & 0 \\ D & B_y \end{bmatrix} \right) \cdot \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix}^{n+1} = \left(1 + \frac{\Delta z}{2} \begin{bmatrix} A_x & C \\ 0 & B_x \end{bmatrix} + \frac{\Delta z}{2} \begin{bmatrix} A_y & 0 \\ D & B_y \end{bmatrix} \right) \cdot \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix}^n$$

(2.22)

利用加入一項二次誤差項的技巧，並引入 ADI method 可以得到

$$\left(1 - \frac{\Delta z}{2} \begin{bmatrix} A_x & C \\ 0 & B_x \end{bmatrix} \right) \cdot \left(1 - \frac{\Delta z}{2} \begin{bmatrix} A_y & 0 \\ D & B_y \end{bmatrix} \right) \cdot \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix}^{n+1} = \left(1 + \frac{\Delta z}{2} \begin{bmatrix} A_x & C \\ 0 & B_x \end{bmatrix} \right) \cdot \left(1 + \frac{\Delta z}{2} \begin{bmatrix} A_y & 0 \\ D & B_y \end{bmatrix} \right) \cdot \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix}^n$$

$$\begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix}^{n+1} = \frac{\left(1 + \frac{\Delta z}{2} \begin{bmatrix} A_y & 0 \\ D & B_y \end{bmatrix} \right) \cdot \left(1 + \frac{\Delta z}{2} \begin{bmatrix} A_x & C \\ 0 & B_x \end{bmatrix} \right)}{\left(1 - \frac{\Delta z}{2} \begin{bmatrix} A_x & C \\ 0 & B_x \end{bmatrix} \right) \cdot \left(1 - \frac{\Delta z}{2} \begin{bmatrix} A_y & 0 \\ D & B_y \end{bmatrix} \right)} \cdot \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix}^n \quad (2.23)$$

FV-BPM 到目前的發展經常必須要考慮穩定性(stability)和準確性(accuracy)，這是因為在耦合的波方程式中有混合導函數(mixed derivative)的存在，由於模擬偏極化相依和耦合元件時，向量特性的處理是絕對需要的，因此必須要發展準確而且穩定的數值方法。

Alternating direction implicit (ADI) method 是一種非迭代的方
法，用來解多維的偏微分方程式。由於 ADI 的非迭代特性，所以在運

算上較為省時。(2.23)式純粹利用 Crank–Nicholson Scheme 和 ADI method。Crank–Nicholson Scheme 準確到二次，ADI method 中加入的項也並不會降低其準確性，所以上式也是準確到二次，而且 pure implicit form 具數值穩定性。

2.7. Initial condition [10]

Fundamental HE_{11} mode

a. Core region ($0 \leq r \leq a$)

$$\begin{aligned}
 E_x &= -jA\beta \cdot \frac{a}{u} \left[\frac{1-s}{2} \cdot J_0\left(\frac{u}{a}r\right) \cdot \cos\psi - \frac{1+s}{2} \cdot J_2\left(\frac{u}{a}r\right) \cdot \cos(2\theta + \psi) \right] \\
 E_y &= jA\beta \cdot \frac{a}{u} \left[\frac{1-s}{2} \cdot J_0\left(\frac{u}{a}r\right) \cdot \sin\psi + \frac{1+s}{2} \cdot J_2\left(\frac{u}{a}r\right) \cdot \sin(2\theta + \psi) \right] \\
 E_z &= A \cdot J_1\left(\frac{u}{a}r\right) \cdot \cos(\theta + \psi)
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

b. Cladding region ($r \geq a$)

$$\begin{aligned}
 E_x &= -jA\beta \cdot \frac{aJ_1(u)}{wK_1(w)} \left[\frac{1-s}{2} \cdot K_0\left(\frac{w}{a}r\right) \cdot \cos\psi + \frac{1+s}{2} \cdot K_2\left(\frac{w}{a}r\right) \cdot \cos(2\theta + \psi) \right] \\
 E_y &= jA\beta \cdot \frac{aJ_1(u)}{wK_1(w)} \left[\frac{1-s}{2} \cdot K_0\left(\frac{w}{a}r\right) \cdot \sin\psi - \frac{1+s}{2} \cdot K_2\left(\frac{w}{a}r\right) \cdot \sin(2\theta + \psi) \right] \\
 E_z &= A \cdot \frac{J_1(u)}{K_1(w)} \cdot K_1\left(\frac{w}{a}r\right) \cdot \cos(\theta + \psi)
 \end{aligned} \tag{2.25}$$

$\ominus s \cong -1$ and assume $\psi = \frac{\pi}{2}$

a. Core region ($0 \leq r \leq a$)

$$\begin{aligned}
 E_x &= -jA\beta \cdot \frac{a}{u} \cdot J_0\left(\frac{u}{a}r\right) \cdot \cos\psi = 0 \\
 E_y &= jA\beta \cdot \frac{a}{u} \cdot J_0\left(\frac{u}{a}r\right) \cdot \sin\psi = jA\beta \cdot \frac{a}{u} \cdot J_0\left(\frac{u}{a}r\right)
 \end{aligned} \tag{2.26}$$

b. Cladding region ($r \geq a$)

$$E_x = -jA\beta \cdot \frac{aJ_1(u)}{wK_1(w)} \cdot K_0\left(\frac{w}{a}r\right) \cdot \cos\psi = 0$$

$$E_y = jA\beta \cdot \frac{aJ_1(u)}{wK_1(w)} \cdot K_0\left(\frac{w}{a}r\right) \cdot \sin\psi = jA\beta \cdot \frac{aJ_1(u)}{wK_1(w)} \cdot K_0\left(\frac{w}{a}r\right) \quad (2.27)$$

其中 $u = a\sqrt{k^2 n_1^2 - \beta^2}$

$$w = a\sqrt{\beta^2 - k^2 n_0^2}$$

$$v^2 = u^2 + w^2 = k^2(n_1^2 - n_0^2)a^2$$

Marcuse 於 1976 年提出了一個有用的近似法來求得固有值 u :

$$u = v\sqrt{1-b} = 2.4048 \cdot e^{-0.8985/v} \quad (2.28)$$

其中 $b = \frac{\left(\frac{\beta}{k}\right)^2 - n_0^2}{n_1^2 - n_0^2}$



已知 v 可以求得 u 。當 $v = 0.9 \sim 10$ 時，固有值 u 的誤差小於 0.75%、當

$v = 0.9 \sim 2.4048$ 時，固有值 u 的誤差小於 0.5%。

2.8. Transparent Boundary Condition [3]

Helmholtz equation 事實上是定義在一個無窮的自由空間，如果沒有將其限定在一個有限的計算區域內則無法作數值解。計算區域的大小也應該盡可能的小 以節省計算時間，所以有限差分光束傳波法 FD-BPM 的一個重要課題就是選擇適當的邊界條件。

如果不考慮邊界條件，計算區域的邊界將會產生反射，這是因為

描述自由空間傳播的 cross section Laplacian 二次導函數在邊界必須用到邊界點的值，否則就視為是在計算區域外包覆一層理想導體，將場完全吸收，如此急遽的吸收就會造成反射。

傳統上，邊界條件一般採用吸收邊界條件(absorbing boundary condition, ABC)，在計算區域外(computational window)加上一層人造吸收材料來模擬。如果吸收太快，會造成反射；如果吸收太緩，計算區域會變得太大。所以，以 ABC 作為邊界條件的 BPM 光束傳播法必須根據不同的波導結構手動調整參數(problem dependent)，包括最大吸收係數(maximum absorption coefficient)、吸收層厚度(thickness of the region)、吸收函數(functional shape)並不方便，同時外加的吸收層也會佔據記憶體並增加模擬時間。

Hadley 在 1992 年時提出了一個聰明的演算法 transparent boundary condition, TBC，適合結合 Crank-Nicholson 差分法應用在 2D 和 3D 的問題，以避免邊界導致的反射所造成的干擾和計算區域太大的問題。他的想法很簡單，利用接近邊界的內部兩點來計算得知其為出射波或入射波，如果是出射波則沒問題，使之通過邊界，如果是入射波則必須禁止。

首先計算 $\text{step} = n$ 時邊界的波數(wavenumber) k 。

$$\frac{\partial E}{\partial x} = -j \cdot k_x \cdot E \quad (2.29)$$

$$e^{-jk_x \Delta x} = \frac{E_{M-1}^n}{E_{M-2}^n}$$

$$k_x = \frac{j}{\Delta x} \ln\left(\frac{E_{M-1}^n}{E_{M-2}^n}\right) \quad (2.30)$$

每一個 step 的 k_x 值是可變動的。 k_x 的實部如果是正號的，則沒問題，因為是出射波，如果是負號的，則必須重設。

$$\bar{k}_x = \begin{cases} k_x & \text{if } \text{Re}(k_x) \geq 0 \\ \text{Im}(k_x) & \text{if } \text{Re}(k_x) < 0 \end{cases} \quad (2.31)$$

step = n+1 邊界點的值 E_M^{n+1} 就可以求得。

$$E_M^{n+1} = E_{M-1}^{n+1} \cdot e^{i\bar{k}_x \Delta x} \quad (2.32)$$

這個演算法稱為 Simple TBC，後來 Hadley 又提出了更為周詳的演算法 Full TBC，必須根據幾何算法來決定波數 k_x ，相對上較為複雜，但根據經驗大部分的情況使用 Simple TBC 已相當準確，與使用 Full TBC 的結果差距不大。

Transparent boundary condition 比起 ABC 的優點在計算上更有效率、正確而且省時，不需根據不同的波導結構來調整參數(problem independent)。但是 TBC 也是有限制的，例如：wide-angle propagation waves 的模擬。

2.9. Perfectly Matched Layer Boundary Condition [4]

Berenger 在 1994 年時提出了一個新的邊界條件 Perfectly matched layer (PML) boundary conditions，用在 finite-difference

time domain (FDTD) method 解 Maxwell' s equations，之後也被用在 FD-BPM 解 Helmholtz wave equation 等問題上，可以大大改善當縮減計算區域大小時的準確性。

PML 是一層不完美的導體層，置於計算區域周圍，在 PML 介質內，一般的 Helmholtz wave equation

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \phi + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \phi + \frac{n^2}{c^2} \omega^2 \phi = 0 \quad (2.33)$$

經由 anisotropic complex coordinate transformation 對應到 PML 的 wave equation。

$$\begin{aligned} & \frac{1}{1 - j\sigma_x / \omega \epsilon_0 n_p^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{1 - j\sigma_x / \omega \epsilon_0 n_p^2} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \\ & + \frac{1}{1 - j\sigma_y / \omega \epsilon_0 n_p^2} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{1 - j\sigma_y / \omega \epsilon_0 n_p^2} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \\ & + \frac{1}{1 - j\sigma_z / \omega \epsilon_0 n_p^2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{1 - j\sigma_z / \omega \epsilon_0 n_p^2} \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + \frac{n_p^2}{c^2} \omega^2 \phi = 0 \end{aligned} \quad (2.34)$$

其中

n_p 是 PML 介質的折射率，可以使等於鄰近介質的折射率。

σ_z 、 σ_x 、 σ_y 是 PML 的各向異性的導電率 (anisotropic conductivity)。

$\sigma_z = 0$ (延 z 方向傳播)

$$\sigma_x = \sigma_{\max} \cdot \left(\frac{\rho}{\delta}\right)^2$$

$$\sigma_y = \sigma_{\max} \cdot \left(\frac{\rho}{\delta}\right)^2 \quad (2.35)$$

ρ 是從計算區域與 PML 介質的介面量起的距離，

δ 是 PML 層的厚度。

如此，在假想的 PML 介質內產生一個非物理性的波，可以完美匹配鄰近的真實自由空間中物理性的波，沒有反射。TBC 對大角度的模擬較不有效，而 PML 則對吸收 wide spatial spectrum 的出射波相當有效。實際上運用 PML boundary condition 必須小心以確保模擬的正確性，包含 PML 層參數的最佳化。目前 PML boundary condition 在 FD-BPM 仍然常被探討。

2.10. Wide-Angle BPM [6][7][8]

波方程式的 Paraxial solution 限制了 FD-BPM 有限光束傳播法的場只能在離軸一小角度內傳播，否則會造成相位誤差 (phase error)。為了克服這個限制，可以利用 wide-angle FD-BPM 來提高正確性。wide-angle 的方法是引入先前忽略的對 z 的二次微分項 $\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$ ，但是仍保有一次 paraxial approximation 的好處。

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + 2j \cdot \bar{k} \cdot \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + (k^2 - \bar{k}^2) \cdot u = 0$$

可視為是一元二次方程式

$$(D^2 + 2 \cdot i \cdot \bar{k} \cdot D + P) \cdot u = 0 \quad (2.36)$$

$$\text{其中 } P \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + (k^2 - \bar{k}^2)$$

$$D = i \cdot (\sqrt{P + \bar{k}^2} - \bar{k})$$

$$\frac{\partial u}{\partial z} = i \cdot (\sqrt{P + \bar{k}^2} - \bar{k}) \cdot u \quad (2.37)$$

(2.37)式是一單向往前傳播的一次波方程式，沒有採用 paraxial approximation，可以使用 Taylor series expansion 或 complex Pade expansion 方法展開，相同的最高展開次，expansion via Pade approximants 的正確性高於 Taylor series expansion。

$$\frac{\partial u}{\partial z} = i \cdot \frac{N_m(P)}{D_n(P)} \cdot u \quad (2.38)$$

其中 N_m 和 D_n 是運算子 P 的多項式 (m, n) 是近似的次數。

Pade Order (m, n)	N_m	D_n
(1, 0)	$\frac{P}{2\bar{k}}$	1
(1, 1)	$\frac{P}{2\bar{k}}$	$1 + \frac{P}{4\bar{k}^2}$
(2, 2)	$\frac{P}{2\bar{k}} + \frac{P^2}{4\bar{k}^3}$	$1 + \frac{3P}{4\bar{k}^2} + \frac{P^2}{16\bar{k}^4}$

Pade Order (1,1)在傳播角 30 度以內非常準確，運算矩陣一為 tridiagonal matrix；Pade Order (2,2)在傳播角 55 度以內非常準確，運算矩陣一為 pentadiagonal matrix；Pade Order (3,3)在傳播角 70 度以內非常準確，運算矩陣一為 heptdiagonal matrix。近似的次數愈高，大角度、大折射率變化的問題可以被更正確的分析。

寫成差分形式

$$D_n \cdot (u^{n+1} - u^n) = \frac{i \cdot \Delta z}{2} \cdot N_m \cdot (u^{n+1} + u^n) \quad (2.39)$$

由 n step 可求得 n+1 step

$$(D_n - \frac{i \cdot \Delta z}{2} \cdot N_m) \cdot u^{n+1} = (D_n + \frac{i \cdot \Delta z}{2} \cdot N_m) \cdot u^n \quad (2.40)$$

與沒有引進 Wide-Angle 修正的 BPM 比較

$$(1 - \frac{i \cdot \Delta z}{2} \cdot P) \cdot u^{n+1} = (1 + \frac{i \cdot \Delta z}{2} \cdot P) \cdot u^n \quad (2.41)$$

利用 Multistep method 可以將 P 的高次多項式 D, N 因式分解

$$u^{n+1} = \frac{(D_n + \frac{i \cdot \Delta z}{2} \cdot N_m)}{(D_n - \frac{i \cdot \Delta z}{2} \cdot N_m)} \cdot u^n = \frac{(1 + a_1 P)(1 + a_2 P) \cdots (1 + a_n P)}{(1 + a_1^* P)(1 + a_2^* P) \cdots (1 + a_n^* P)} \cdot u^n$$

$$u^{n+\frac{i}{m}} = \frac{(1 + a_i P)}{(1 + a_i^* P)} \cdot u^{n+\frac{i-1}{m}} \quad (2.42)$$

每一個小 step 的矩陣都是 tridiagonal matrix，如此邊界條件就可以直接使用先前 paraxial propagation 所用的 transparent boundary condition 的演算法，只需要邊界內部兩點即可求得下一個 step 的邊界值。如果運算矩陣是 pentadiagonal matrix 或 heptadiagonal matrix，邊界條件會較為複雜。

2.11. Bidirectional BPM [9]

Wide-angle BPM 允許延著 z 軸大角度的傳播，但最多也只到 $\pm 90^\circ$ ，並不能計算因為折射率延傳播方向 z 軸的變化所造成的逆向反射。我們必須引進 Bidirectional BPM，正向傳播的波 $u^+(x, y, z)$ 與逆向傳播的波 $u^-(x, y, z)$ 都存在。我們可以將光學元件結構視為一連串的

傳播矩陣 P(propagation matrix)和介面矩陣 T(interface matrix)的乘積

$$\begin{bmatrix} u_{out}^+ \\ u_{out}^- \end{bmatrix} = M \cdot \begin{bmatrix} u_{in}^+ \\ u_{in}^- \end{bmatrix} \quad M = P_n \cdot T_{n-1,n} \Lambda P_2 \cdot T_{12} \cdot P_1 \quad (2.43)$$

在一般均勻區域正向波與逆向波是不耦合的，也就是說傳播矩陣 P 是對角化的，對正向傳播的波 $u^+(x, y, z)$ 而言就是一般的 BPM，對逆向傳播的波 $u^-(x, y, z)$ 而言則是 time-reversed 的 BPM。

但是在介面因為反射造成正向波與逆向波是耦合。

Incident field E_A^+

$$\text{Reflected field } E_A^- = \frac{\sqrt{L_A} - \sqrt{L_B}}{\sqrt{L_A} + \sqrt{L_B}} E_A^+ \quad (\text{incident side A})$$

$$\text{Transmitted field } E_B^+ = \frac{2\sqrt{L_A}}{\sqrt{L_A} + \sqrt{L_B}} E_A^+ \quad (\text{transmitted side B})$$

其中 (2.44)

$$L_A = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + k_0^2 n_A(x, y)^2$$

$$L_B = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + k_0^2 n_B(x, y)^2$$

L_A 、 L_B : Pade-based transverse operators on the incident side A and transmitted side B of an interface

也可以寫成介面矩陣 T 的形式

$$\begin{bmatrix} E_B^+ \\ E_B^- \end{bmatrix} = T \cdot \begin{bmatrix} E_A^+ \\ E_A^- \end{bmatrix} \quad (2.45)$$

$$T_{AB} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \sqrt{L_B}^{-1} \sqrt{L_A} & 1 - \sqrt{L_B}^{-1} \sqrt{L_A} \\ 1 - \sqrt{L_B}^{-1} \sqrt{L_A} & 1 + \sqrt{L_B}^{-1} \sqrt{L_A} \end{bmatrix}$$

給定一個輸入端的入射場 u_{in}^+ ，利用迭代的方式解輸入端的反射場 u_{in}^- ，直到輸出端的反射場 $u_{out}^- = 0$ 。

(1) 已知 u_{in}^+ 猜 $u_{in}^{-(0)}$ (可設為 0)

(2) 迭代次數 $n=0, 1, 2, \dots$

(a)
$$\begin{bmatrix} u_{out}^{+(n)} \\ u_{out}^{-(n)} \end{bmatrix} = M \cdot \begin{bmatrix} u_{in}^{+(n)} \\ u_{in}^{-(n)} \end{bmatrix}$$

(b) 如果 $|u_{out}^{-(n)}| < tolerance$ 則停止 否則繼續

(c)
$$\begin{bmatrix} * \\ u_{in}^{-(n+1)} \end{bmatrix} = N \cdot \begin{bmatrix} u_{out}^{+(n)} \\ \alpha \cdot u_{out}^{-(n)} \end{bmatrix}$$
 求得 $u_{in}^{-(n+1)}$ 後與已知的 u_{in}^+ 繼續下一次

迭代

$$N = M^{-1} \quad 0 < \alpha < 1 \text{ damping factor}$$

這樣做的好處是我們只需要儲存輸入端和輸出端的場，而不需要每個介面的場都儲存下來，可以節省記憶體容量。

2.12. Adaptive window

利用 Adaptive window 的技巧可以僅針對主要的場作運算，當折射率沿著傳播軸方向變化時，計算區域可以跟著調整，如此可以節省計算時間，對於較大元件的模擬有幫助。

3. 模擬結果

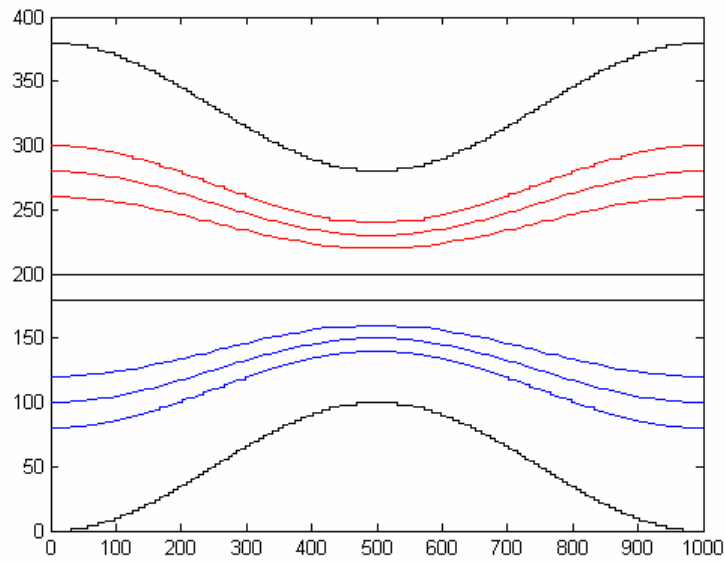
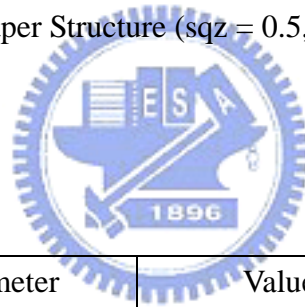


圖 3.0 Taper Structure (sqz = 0.5, overlap = 1)

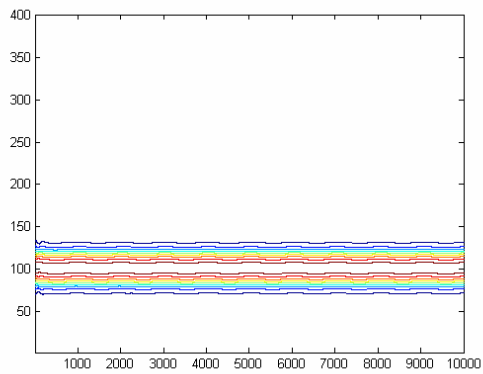
3.1. 2D simple BPM



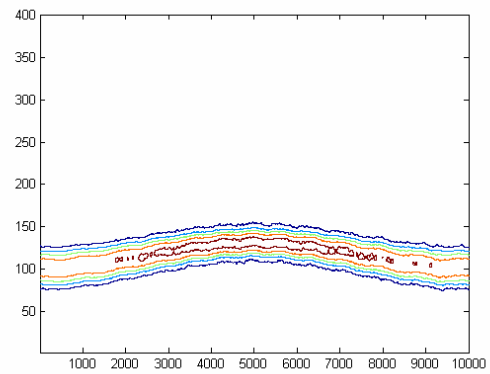
Parameter	Value
ra_core	1 μ m
ra_clad	5 μ m
rb_core	ra_core * ratio
rb_clad	ra_clad * ratio
dx	0.05 μ m
dz	dx
lambda	0.633 μ m
n_clad	1.49
n_core	1.52

表 3.1 2D simple BPM Parameter

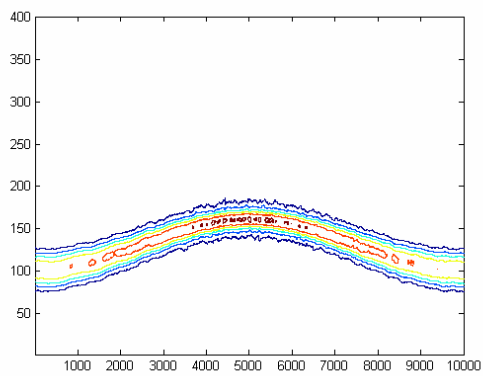
(a) $N_z = 10000$, overlap = 0, sqz = 0



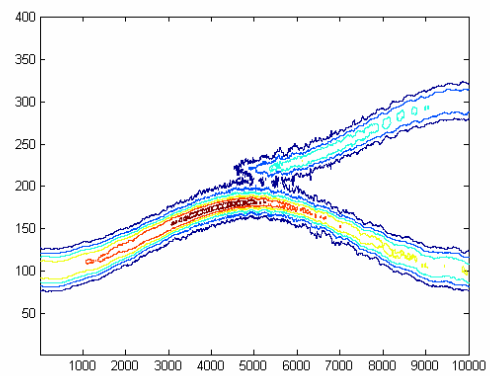
(b) $N_z = 10000$, overlap = 0, sqz = 0.3



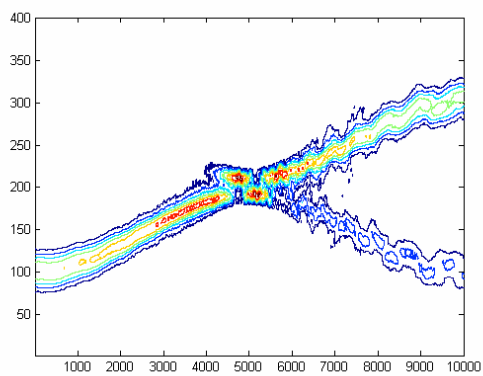
(c) $N_z = 10000$, overlap = 0, sqz = 0.6



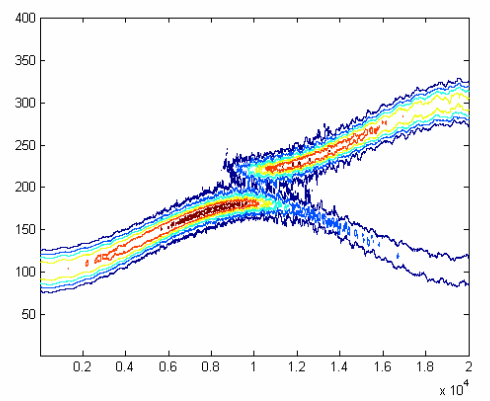
(d) $N_z = 10000$, overlap = 0, sqz = 0.8



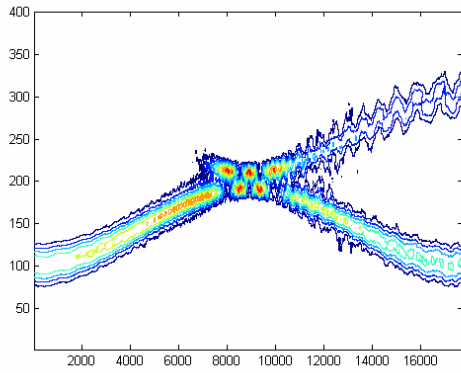
(e) $N_z = 10000$, overlap = 0, sqz = 0.9



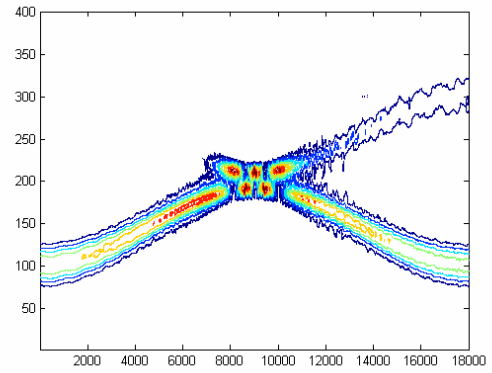
(f) $N_z = 20000$, overlap = 0, sqz = 0.8



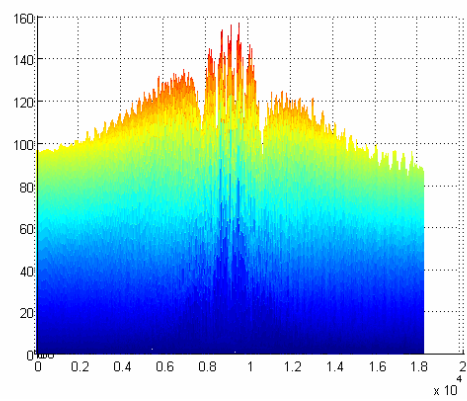
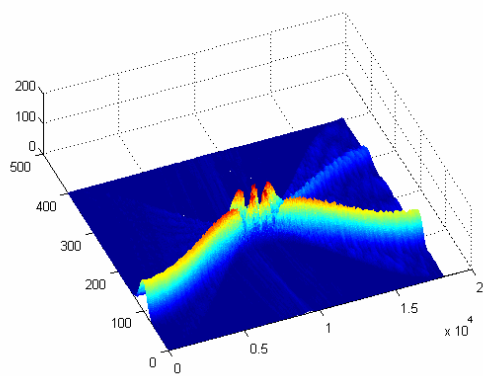
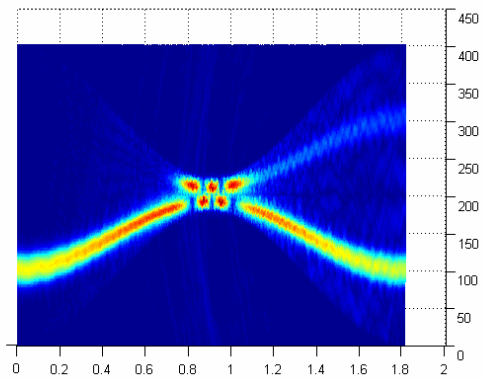
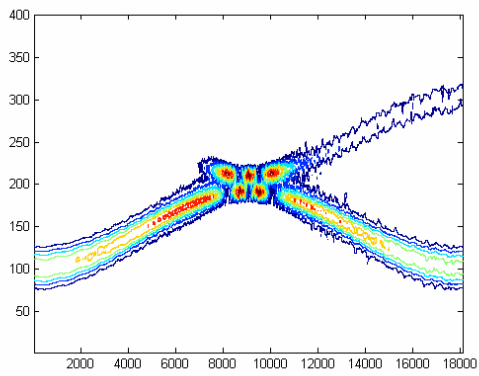
(g) $N_z = 17750$, overlap = 0, sqz = 0.9



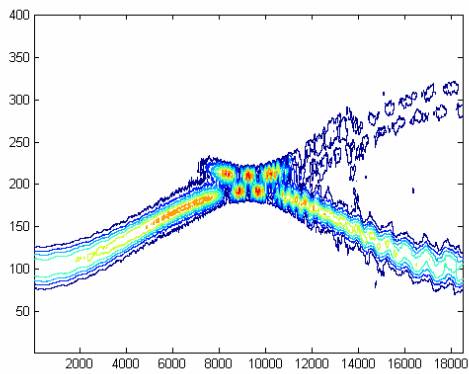
(h) $N_z = 18000$, overlap = 0, sqz = 0.9



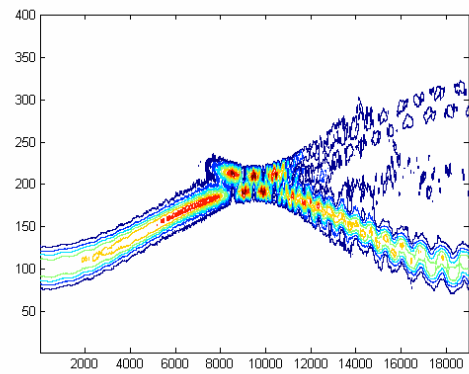
(i) $N_z = 18100$, overlap = 0, sqz = 0.9



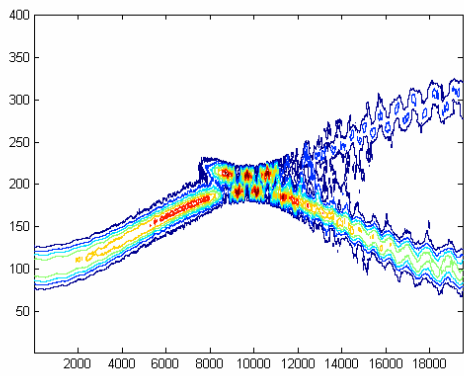
(j) $N_z = 18500$, overlap = 0, sqz = 0.9



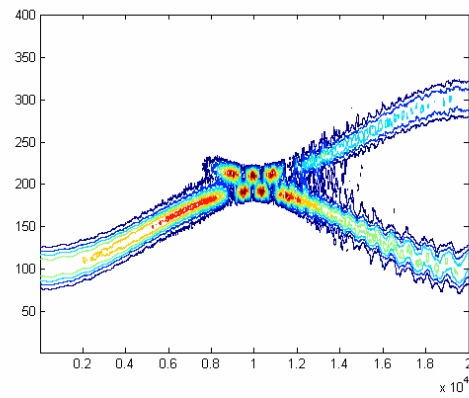
(k) $N_z = 19000$, overlap = 0, sqz = 0.9



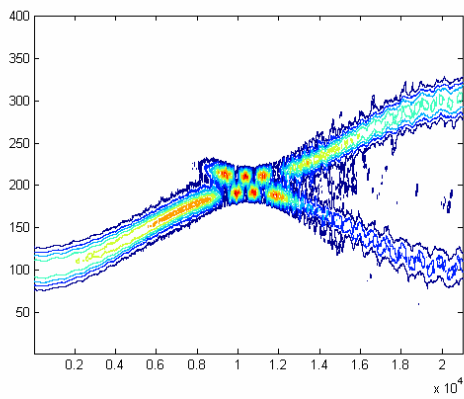
(l) $N_z = 19500$, overlap = 0, sqz = 0.9



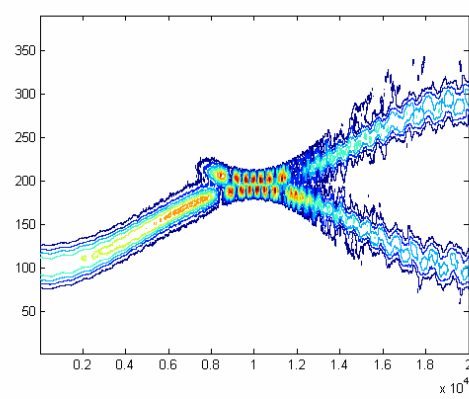
(m) $N_z = 20000$, overlap = 0, sqz = 0.9



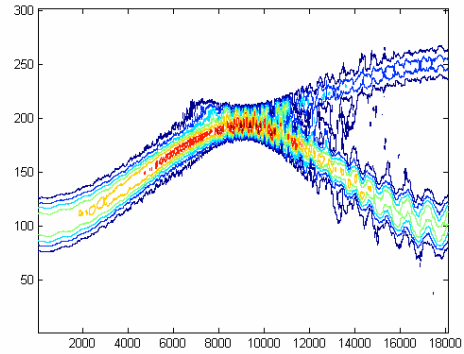
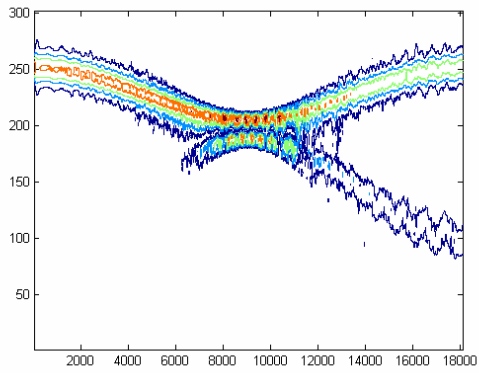
(n) $N_z = 21000$, overlap = 0, sqz = 0.9



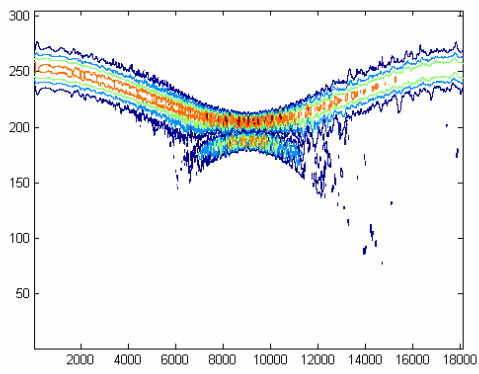
(o) $N_z = 20000$, overlap = 0.5, sqz = 0.9



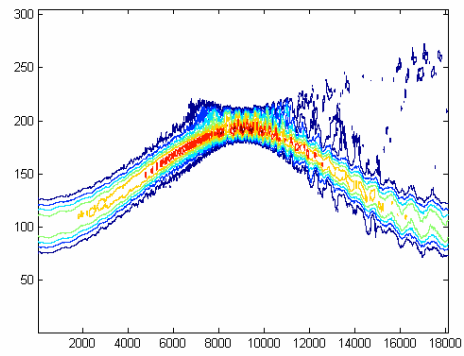
(p) $N_z = 18100$, overlap = 0, sqz = 0.9, ratio = 0.5



(q) $N_z = 18100$, overlap = 0, sqz = 0.9, ratio = 0.52



10000

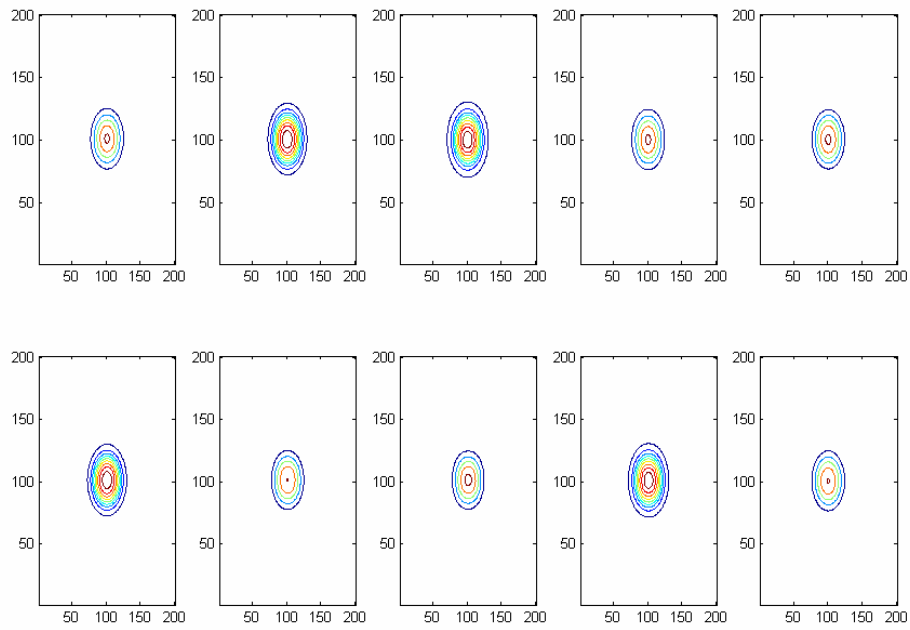


3. 2. 3D SV-BPM

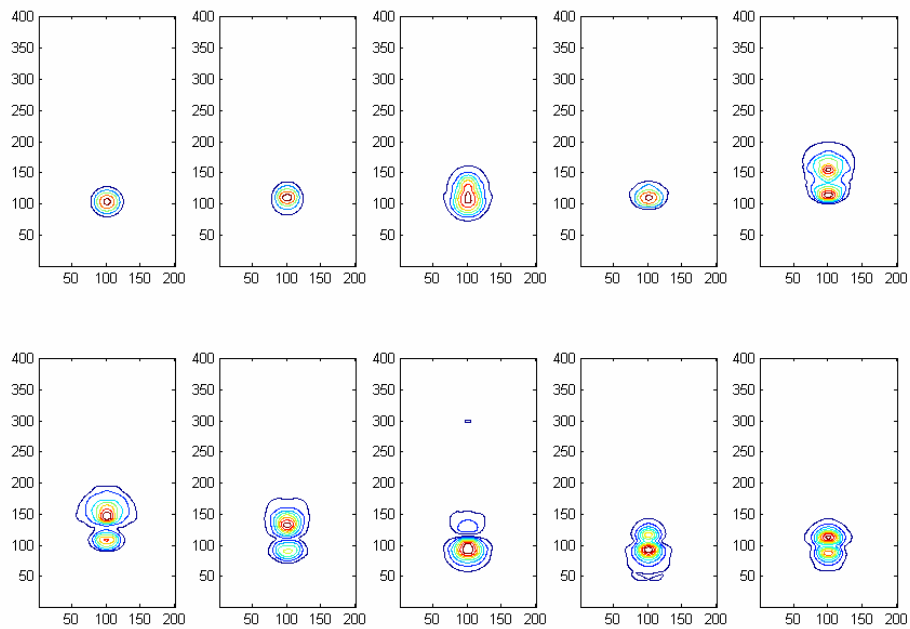
Parameter	Value
ra_core	$1 \mu\text{m}$
ra_clad	$5 \mu\text{m}$
rb_core	ra_core
rb_clad	ra_clad
dx	$0.05 \mu\text{m}$
dy	dx
dz	dx
lambda	$0.633 \mu\text{m}$
n_clad	1.49
n_core	1.52

表 3.2 3D SV-BPM Parameter

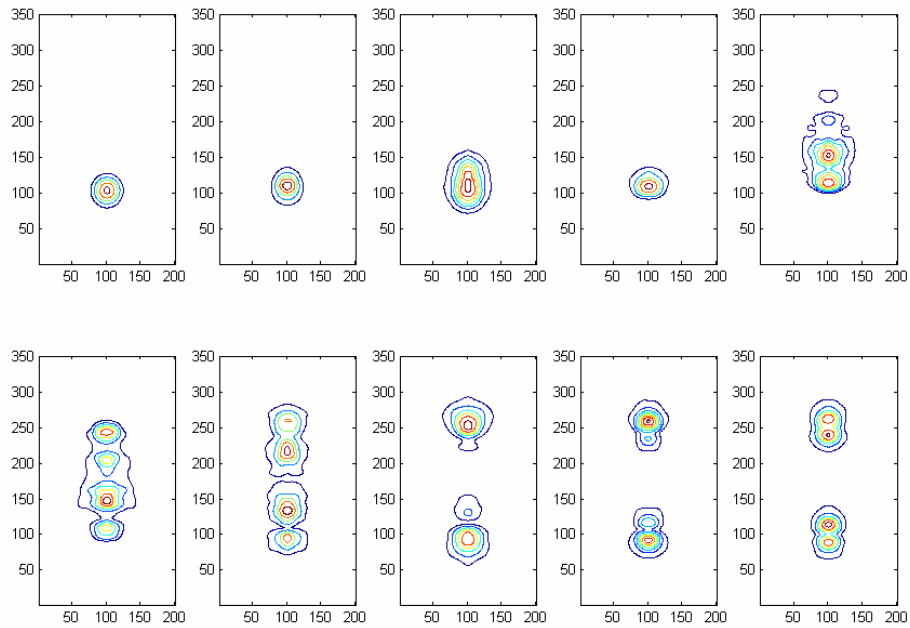
(a) $sqz = 0$, $overlap = 0$, $Nz = 10000$



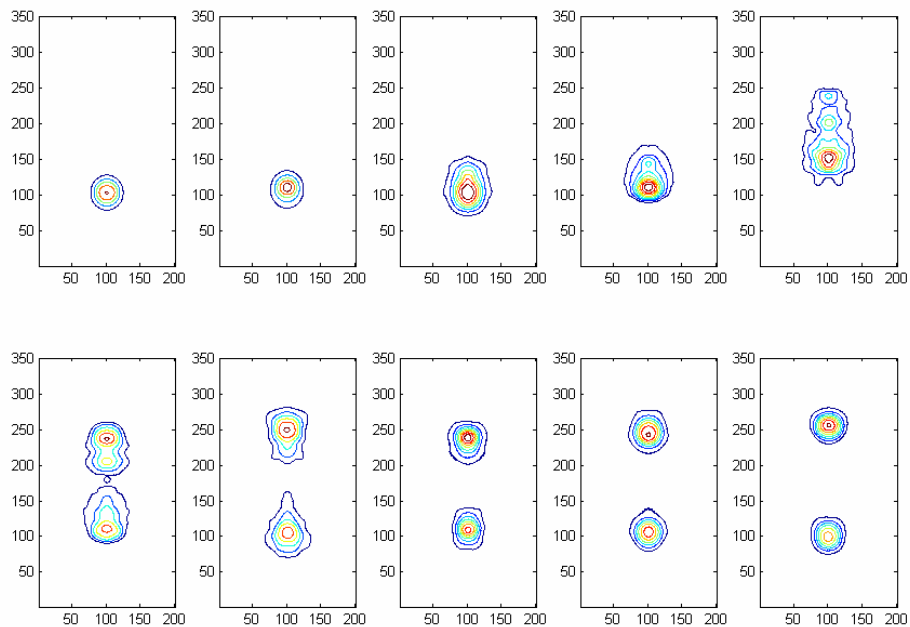
(b) $sqz = 0.5$, $overlap = 0$, $Nz = 10000$



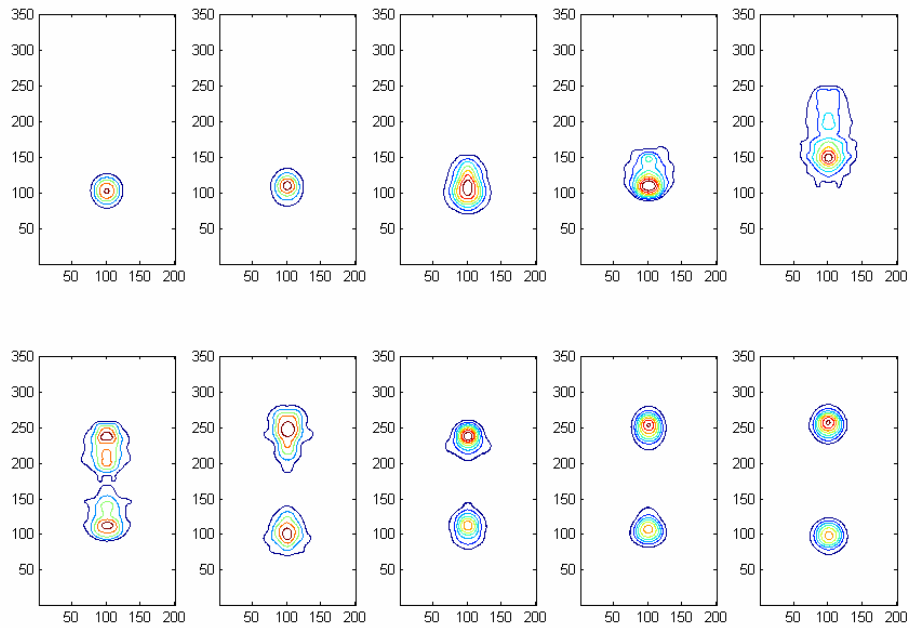
(c) $sqz = 0.5$, $overlap = 2.5$, $N_z = 10000$



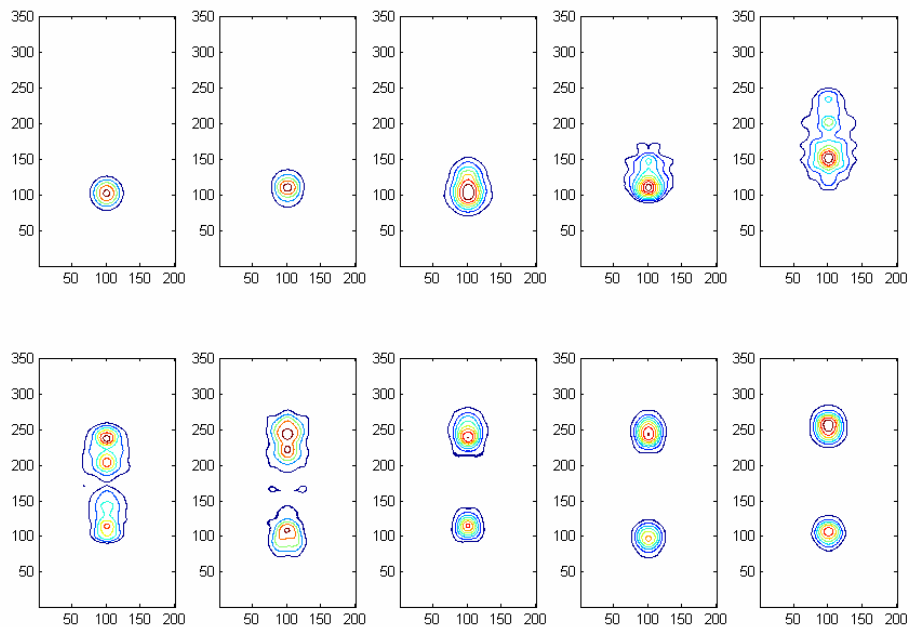
(d) $sqz = 0.5$, $overlap = 2.5$, $N_z = 19500$



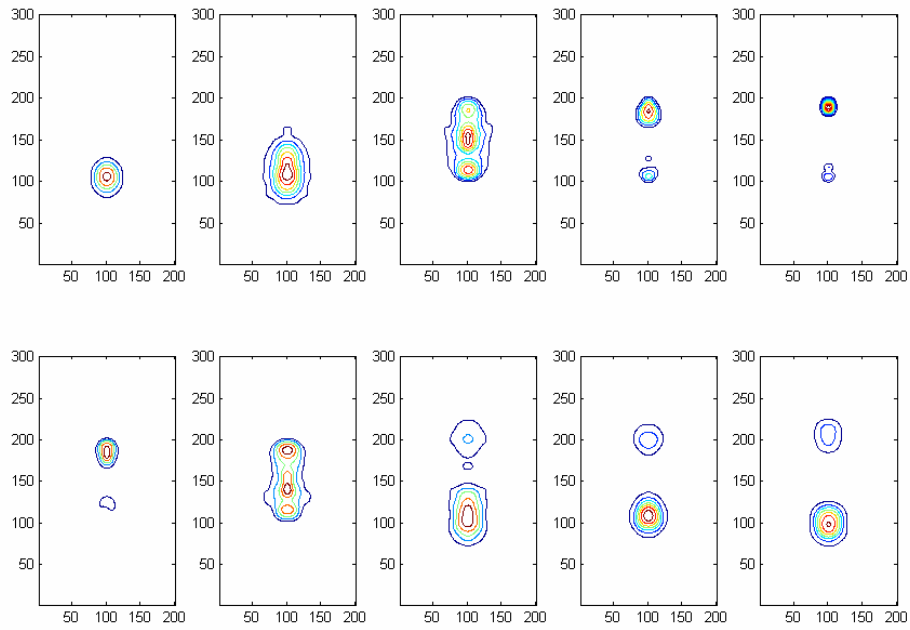
(e) $sqz = 0.5$, $overlap = 2.5$, $N_z = 20000$



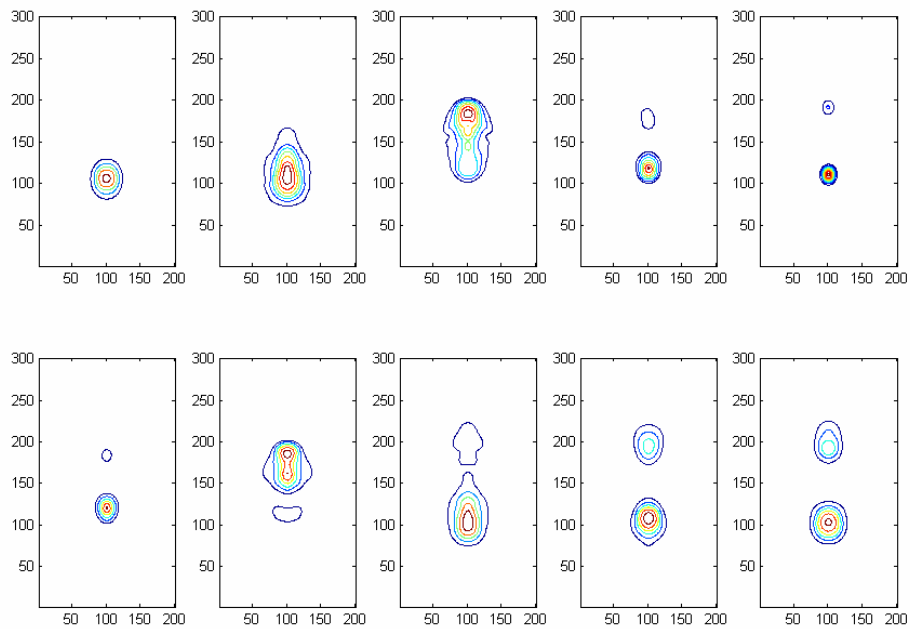
(f) $sqz = 0.5$, $overlap = 2.5$, $N_z = 22000$



(g) $sqz = 0.9$, $overlap = 5$, $Nz = 20000$



(h) $sqz = 0.9$, $overlap = 5$, $Nz = 40000$

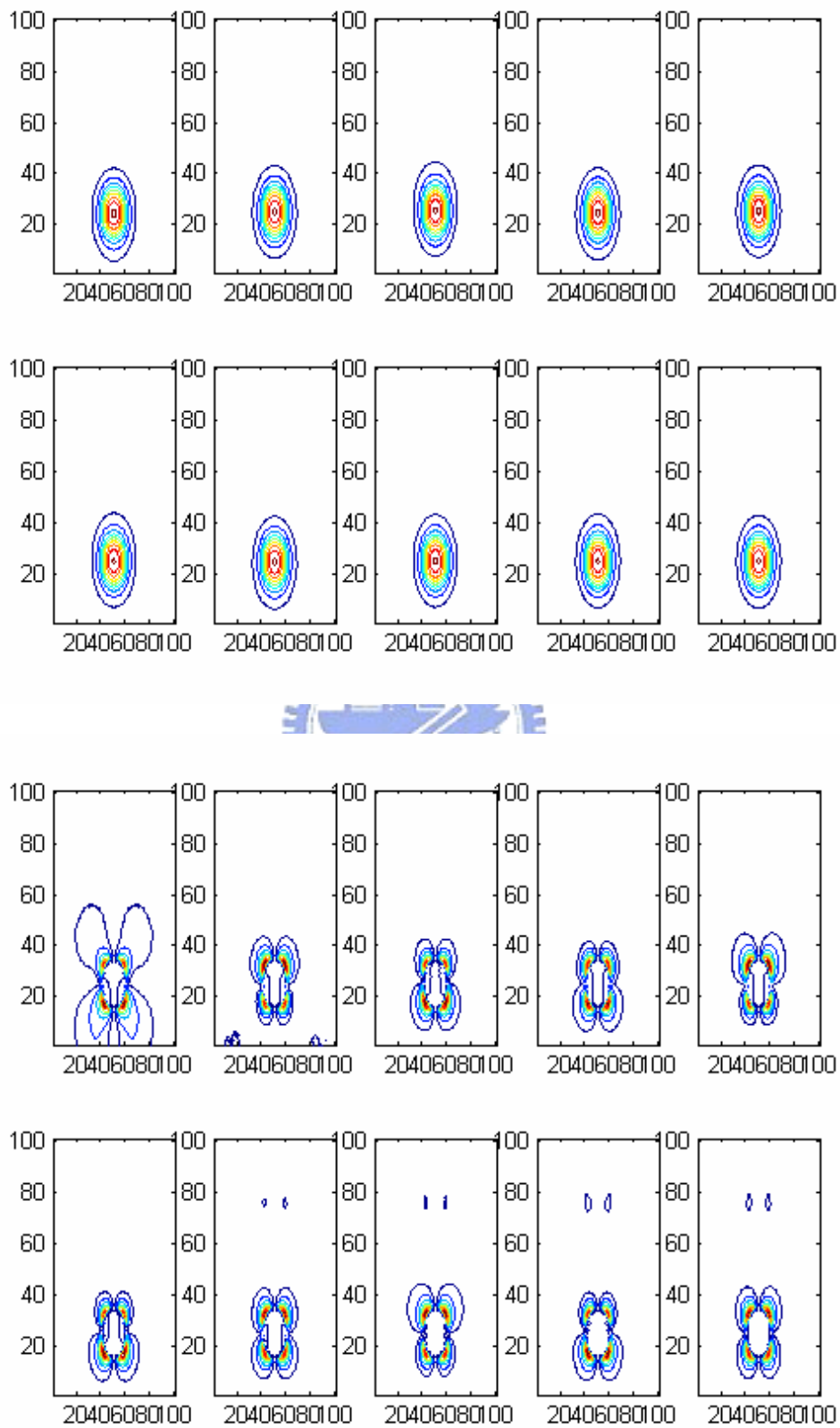


3.3. 3D FV-BPM

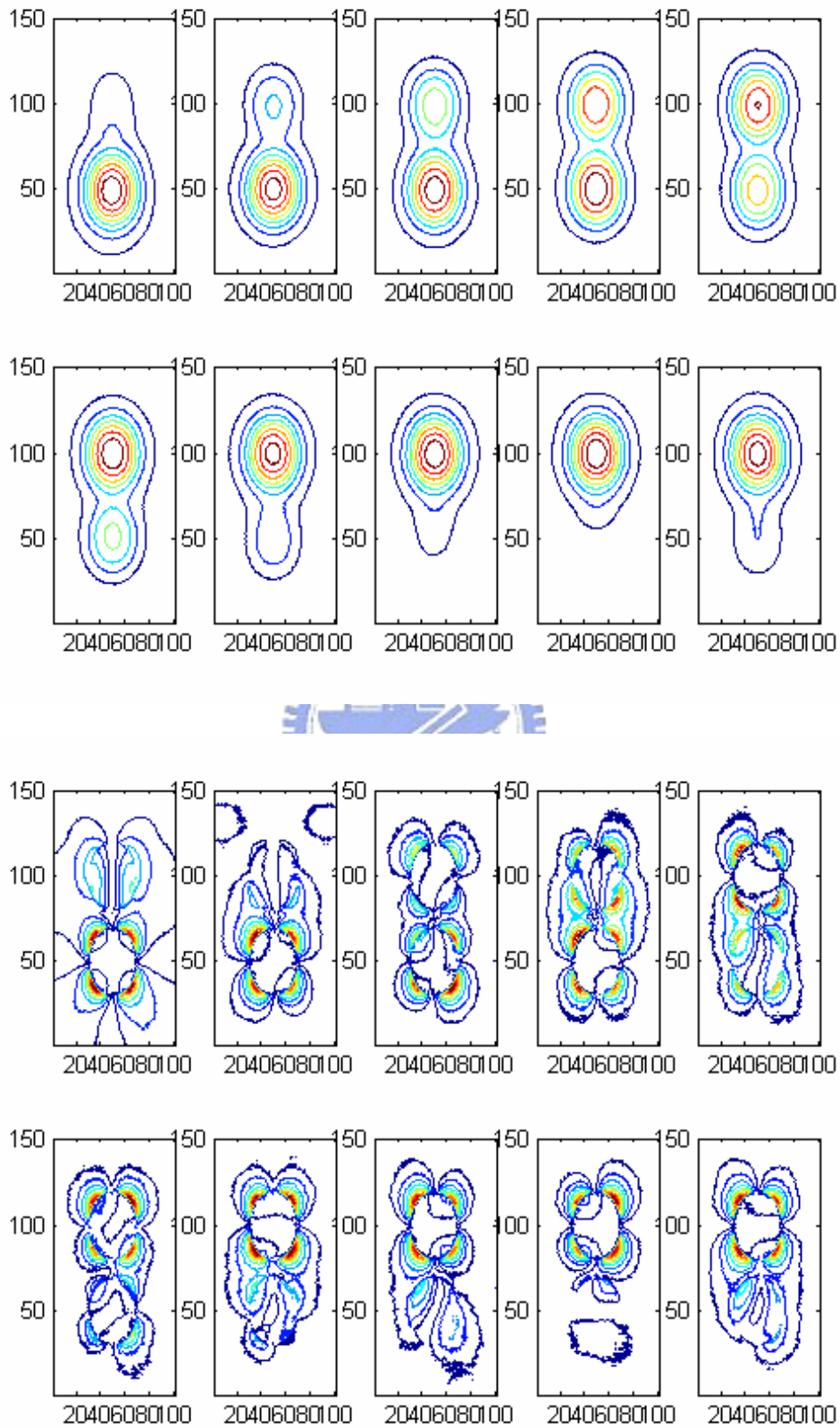
Parameter	Value
ra_core	$2 \mu\text{m}$
ra_clad	$5 \mu\text{m}$
rb_core	ra_core
rb_clad	ra_clad
dx	$0.2 \mu\text{m}$
dy	dx
dz	dx
lambda	$1.5 \mu\text{m}$
n_clad	1.45
n_core	1.46

表 3.3 3D FV-BPM Parameter

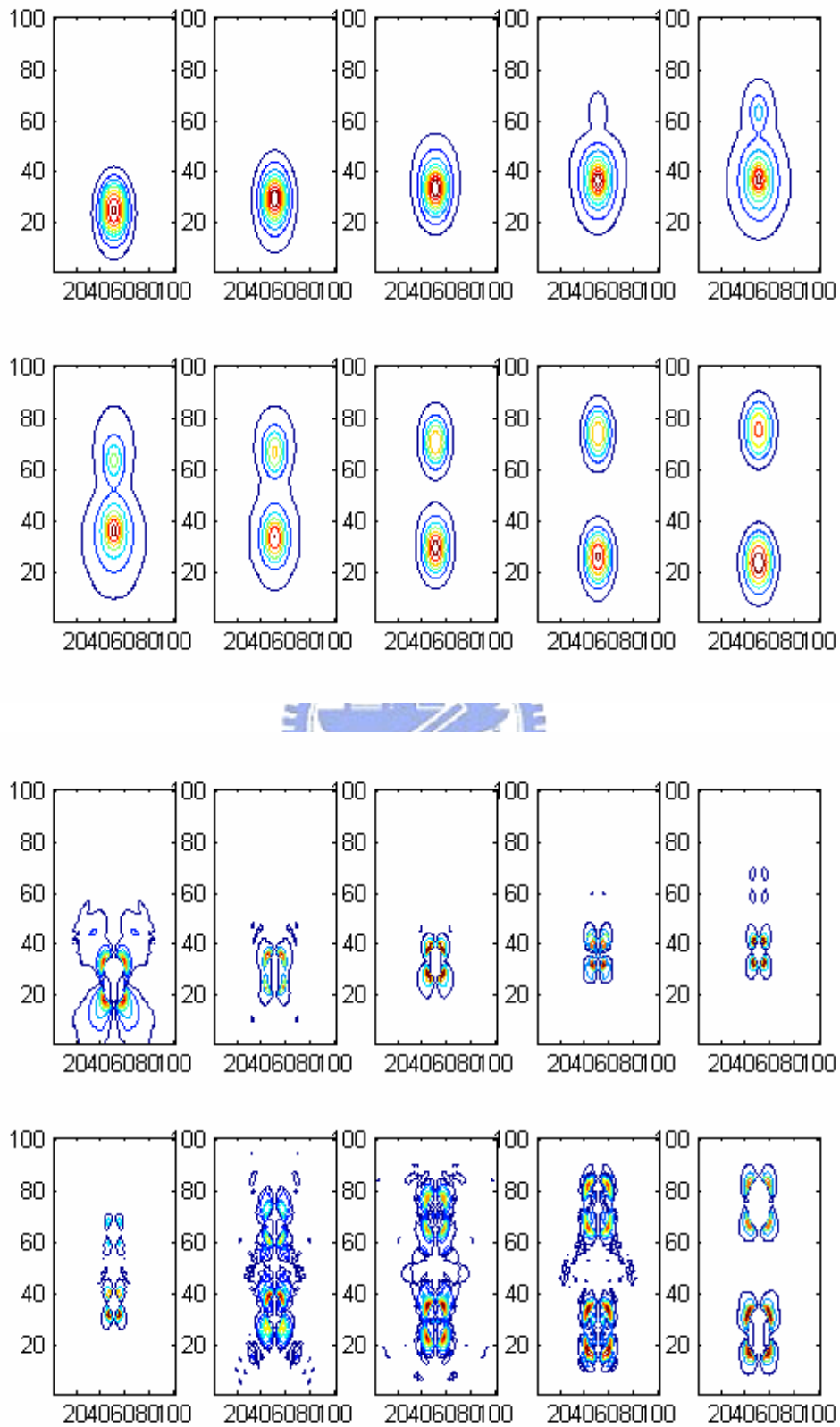
(a) $sqz = 0$, $overlap = 0$, $Nz = 5000$



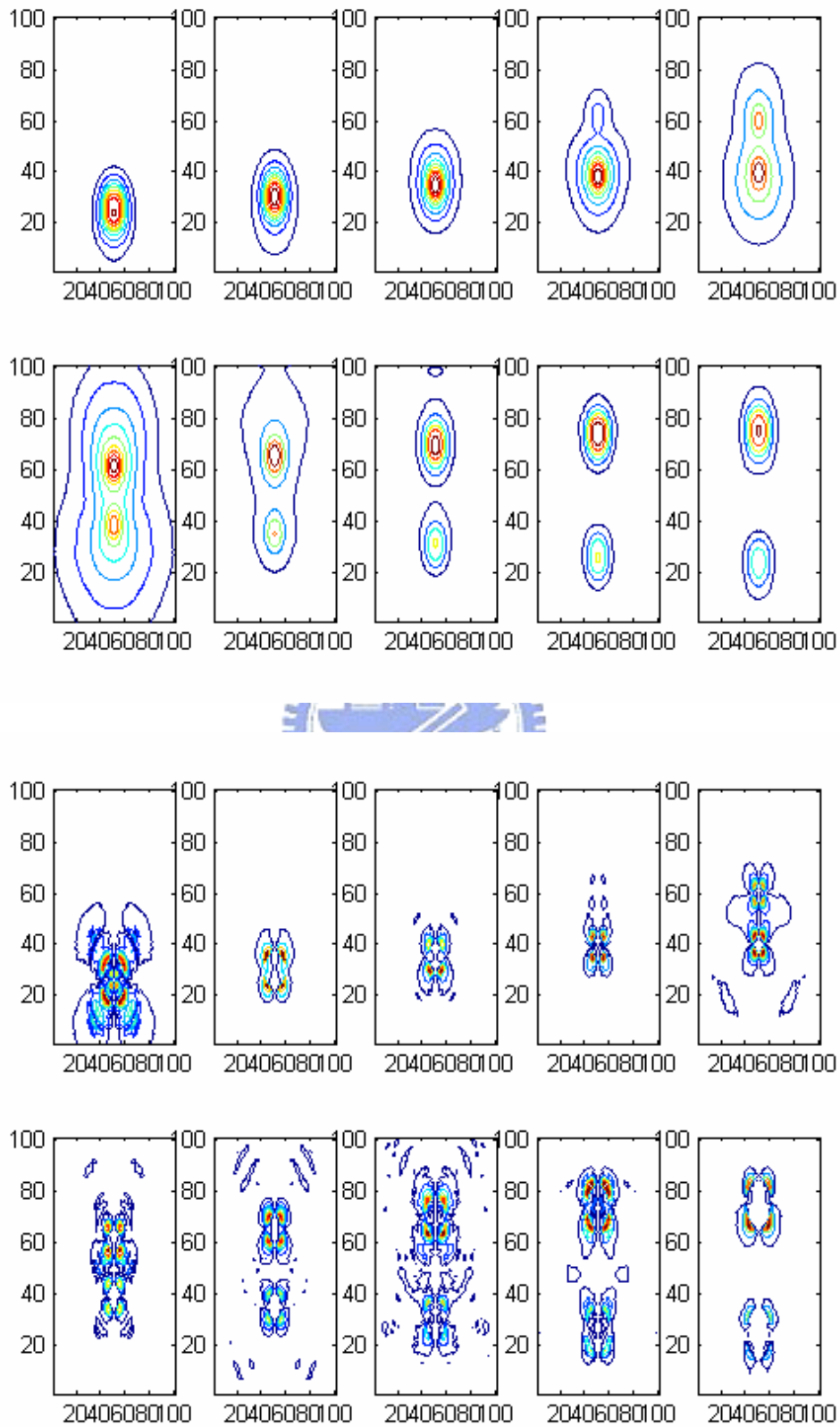
(b) $sqz = 0$, $overlap = 5$, $N_z = 5000$



(c) $sqz = 0.5$, $overlap = 0$, $N_z = 5000$



(d) $\text{sqz} = 0.6$, $\text{overlap} = 0$, $N_z = 5000$



4. 結論與展望

在本論文中我們利用 Finite Difference Method 來解 Paraxial Approximation of Helmholtz Equation，邊界條件則採用 TBC (Transparent Boundary Condition)。Paraxial Approximation 只能對近軸方向上的 Waveguide 模擬有較正確的結果，對於離軸方向上的 Waveguide 模擬必須引進 Wide-Angle Finite Difference Method 以提高精確度，例如：Pade Approximation (1, 0)、(1, 1)、(2, 2)、(3, 3)、(4, 4)等。

一般 BPM 只考慮 Scalar wave 的假設，如果需要考慮偏極化的特性需要引進 Vector Beam Propagation 的方法來克服，又因為是 one-way wave equation，無法計算 Back Reflections，需要引進 Bidirectional BPM 的方法來克服，同時考慮 coupled forward and backward traveling waves 就可以探討反射現象。

一個物理傳播問題需要兩個關鍵的資訊：

1. 折射率分佈 $n(x, y, z)$ 。
2. 輸入波場形 $u(x, y, z=0)$ 。

數值模擬所需的參數：

1. 有限的計算區域 A Finite Computational Domain。
2. Transverse Grid Size Δx 、 Δy 。

3. Longitudinal Step Size Δz 。

4. Reference Wavenumber \bar{k} 。

所需計算時間大約正比於 $N_x \cdot N_y \cdot N_z \cdot m$ (m 是 Pade Order)，

Full-Vector BPM 的計算時間約是 Scalar or Semi-Vector BPM 的四倍，Bidirectional BPM 是一般 BPM 的 N 倍 (N 是迭代次數：2~100)。

如何選擇參數？

1. Grid Size (Δx and Δy)

Grid Size 愈小，BPM 的正確性愈高。較小的 Grid Size 會在 TBC 產生反射或在介面產生問題，可縮小 Step Size 來改善。

2. Step Size (Δz)

Step Size 愈小，BPM 的正確性愈高，可減輕因為 TBC 所造成的問題和較小 Grid Size 的介面傳播問題。

3. Reference Wavenumber (\bar{k})

Reference Wavenumber 愈正確，BPM 結果愈好。因為模擬的正確性和 $(\bar{k} - k_z) \cdot \Delta z$ 有關，較小的 step size 或較大的 Pade Order 可以補償 Reference Wavenumber 的誤差。

4. Pade Order

Pade Order 愈高可以改善大角度、大折射率變化的傳播問題。Pade Order 的效應和 Grid size、Step sizes、Reference

Wavenumber 的效應都有關係，必須盡量使其最佳化。

5. 計算區域的選擇

通常以 TBC 作邊界條件來模擬發生問題時，可以利用選擇較大的計算區域來解決。TBC 分為 Full TBC 和 Simple TBC，Full TBC 的演算法較複雜，理論上應較 Simple TBC 正確，但是卻不盡然，有時候反而簡單的好。

由於 3D Full Vectorial BPM 運算上有其複雜性，所花的運算時間與記憶體都遠比 2D 多得多，如果想要節省時間，快速得到結果，則結果就常常有問題；如果想要得到更正確的結果，則所花的時間常常多到我們沒有耐心繼續等下去。這是一個 trade-off。

當然我的程式還是有可以再加強的地方，包括：

(1) 提高正確性

Grid Size、Step Size 和 Window 大小的選擇可能影響結果的正確性。為了提高正確性，將使運算矩陣變大而耗時，所以在可接受的運算時間裡，盡可能提高正確性才是我們該注意的，否則結果很可能永遠出不來。

(2) 提升運算速度

由於 Matlab 在運算速度上有待改善，為節省運算時間，目前的

程式碼是以 C++ 撰寫，不過由於 3D Full Vectorial BPM 的複雜性，
運算時間仍然相當長，接下來在演算法上力求精練是可以研究的課
題。

(3) 擴大應用範圍

如果折射率沿著傳播方向的變化較大時，需要引入 wide-angle
和 bi-directional 的演算法，這將使得運算已經非常複雜而耗時的
3D Full Vectorial BPM 更加複雜，目前沒有採用。不過如果要繼續
研究更複雜的波導結構，為了得到更正確的結果，勢必得採用。



5. 參考文獻

1. Yu-li Hsueh, Ming-chuan Yang, Hung-chun Chang, “Three-Dimensional Noniterative Full-Vectorial Beam Propagation Method Based on the Alternating Direction Implicit Method,” *Journal of Lightwave Technology*, vol. 17, no. 11, pp. 2389-2397, 1999.
2. W. P. Huang, C. L. Xu, “Simulation of Three-Dimensional Optical Waveguides by a Full-Vector Beam Propagation Method,” *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 29, no. 10, pp. 2639-2649, 1993.
3. G. Ronald Hadley, “Transparent Boundary Condition for the Beam Propagation Method,” *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 28, no. 1, pp. 363-370, 1992.
4. W. P. Huang, C. L. Xu, W. Lui, and K. Yokoyama, “The Perfectly Matched Layer (PML) Boundary Condition for the Beam Propagation Method,” *IEEE Photonics Technology Letters*, vol. 8, no.5, pp.649-651, 1996.
5. Youngchul Chung, Nadir Dagli, “An Assessment of Finite Difference Beam Propagation Method,” *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 26, no. 8, pp. 1335-1339, 1990.
6. G. Ronald Hadley, “Wide-angle beam propagation using Pade approximant operators,” *Optics Letters*, vol. 17, no. 20, pp. 1426-1428, 1992.
7. G. Ronald Hadley, “Multistep method for wide-angle beam propagation,” *Optics Letters*, vol. 17, no. 24, pp. 1743-1745, 1992.
8. Yih-Peng Chiou, Hung-chun Chang, “Analysis of Optical Waveguide Discontinuities Using the Pade Approximants,” *IEEE Photonics Technology Letters*, vol. 9, no. 7, pp. 964-966, 1997.
9. Hongling Rao, Rob Scarmozzino, Richard M. Osgood Jr., “A Bidirectional Beam Propagation Method for Multiple Dielectric Interfaces,” *IEEE Photonics Technology Letters*, vol. 11, no. 7, pp. 830-832, 1999.

10. Katsunari Okamoto, "Fundamentals of Optical Waveguides," NTT Photonics Laboratories, Japan.
11. Selina G. Farwell, Michalis N. Zervas, Richard I. Laming, "2×2 Fused Fiber Null Couplers with Asymmetric Waist Cross Sections for Polarization Independent Switching," *Journal of Lightwave Technology*, vol. 16, no. 9, pp. 1671-1679, 1998.
12. Christos Riziotis, Mikhail N. Zervas, "Design Considerations in Optical Add/Drop Multiplexers Based on Grating-Assisted Null Couplers," *Journal of Lightwave Technology*, vol. 19, no. 1, pp. 92-104, 2001.
13. Tarek A. Ramadan, Robert Scarmozzino, Richard M. Osgood Jr., "Adiabatic Couplers: Design Rules and Optimization," *Journal of Lightwave Technology*, vol. 16, no. 2, pp. 277-283, 1998.
14. F. Schmidt, "An Adaptive Approach to the Numerical Solution of Fresnel's Wave Equation," *Journal of Lightwave Technology*, vol. 11, no. 9, pp. 1425-1434, 1993.
15. Charles Vassallo, J. Michiel van der Keur, "Comparison of a Few Transparent Boundary Conditions for Finite-Difference Optical Mode-Solvers," *Journal of Lightwave Technology*, vol. 15, no. 2, pp. 397-402, 1997.