

國立成功大學

物理研究所

碩士論文

次波長光學系統之分析與模擬

Simulation and Analysis on Optical  
Systems with Subwavelength Scale

研究生：盧朝文

指導教授：陳志隆

中華民國九十一年七月

國立成功大學  
碩士論文

次波長光學系統之分析與模擬

Simulation and Analysis on Optical  
Systems with Subwavelength Scale

研究生：盧朝文

本論業業經審查及口試合格特此證明  
論文考試委員

李永貴 姜一民 陳志隆

指導教授：陳志隆

系(所)主管：傅永貴

中華民國 九十一年 七月 二十六日

## 誌謝

很高興，能夠一一克服問題，終於完成了這篇了這篇碩士論文，作為自己的一個學習記錄。

首先，要感謝我的指導老師 陳志隆教授，如果沒有他的引領與督促，就不會有這篇論文的產生；感謝老師：在我犯錯的時候，包容我；在我意志消沈的時候，關懷、鼓勵我；在我迷失方向的時候，指引我一條正確的路。

接著，我要感謝 DSP 組的小岳、小傳與雅婷，謝謝你們陪我一起學習與討論，並且給我許多寶貴的經驗分享，讓我學到更多的專業知識。

還有實驗室的伙伴們：柯學長、利哥哥、老大、龍哥、成哥、小 C、大牌、扣子、湘湘、敬中，RF 組的阿坤、達叔、阿 Q 與小生，OSD 組的娟姐、阿輝、阿舫、阿凱、佳芬與嘉雯，還有助理小 P 與慧玲，因為你們，讓我實驗室的生活充滿歡笑與活力。

另外，我要特別感謝室友：阿 Q 與小兔，謝謝你們在生活上給我的幫忙與陪伴。

最後，我要將這篇論文獻給我的女友—華容，感謝她在心靈成長路上與我攜手相伴；還有我生命中最重要的人，有他們的支持與鼓勵，我才能無後顧之憂地完成學業。

## 摘要

在這篇論文裡，我們整理了有限差分在光學系統模擬上的一系列應用，包含了有限差分法、有限差分光束傳播法，還有時域分析中的時域有限差分法與時域有限差分光束傳播法，它們都可以應用到次波長的結構模擬上。除了專書之外，我們還研讀了許多相關論文，而將它們的發展歷史、理論推導…等等作有系統的整理，而且也完成了大部分的程式，並且也去驗證了論文上的結果。最後並實際地運用在一些典型的波導結構的計算上。

## Abstract

In this thesis, we focus on simulation and analysis of optical system with subwavelength scale using finite difference scheme which include finite difference method (FDM), finite difference beam propagation method (FD-BPM), finite difference time domain method (FDTD), and time-domain beam propagation method (TD-BPM). We review many related papers and study carefully how the wave equation and finite difference form is derived. We also implemented most of them base on Matlab. Finally, we use these programs to simulate some waveguide structures and validate our code by checking the result with published data.

## 目錄

誌謝	I
中文摘要	II
Abstract	III
目錄	IV
表目錄	VII
圖目錄	VIII
第一章 緒論	
1-1 研究動機	1-1
1-2 次波長光學系統設計的應用	1-2
1-3 程式發展平台與工具	1-2
1-4 論文結構	1-4
第二章 解析法	
2-1 三層平板結構	2-1
2-2 梯狀分佈光纖	2-10
2-3 有效折射率	2-13
第三章 有限差分法	
3-1 FDM 的歷史回顧	3-1
3-2 FD 的概念	3-1

3-3 FDM 的波方程式推導	3-3
3-4 FDM 的有限差分形式	3-6
3-5 邊界條件	3-9
3-6 程式化	3-10
3-7 本徵值的解法	3-13
3-8 模擬結果	3-13
3-9 小結	3-14

#### 第四章 光束傳播法

4-1 FD-BPM 的歷史回顧	4-2
4-2 FD-BPM 的波方程式推導	4-2
4-3 FD-BPM 的有限差分式	4-5
4-4 邊界條件	4-7
4-5 虛數軸傳播法	4-9
4-6 隱含式交替方向法	4-12
4-7 廣角光束傳播法	4-15
4-8 模擬結果	4-19

#### 第五章 時域分析

5-1 時域有限差分法	5-1
5-2 時域光束傳播法	5-7

## 第六章 總結

附錄 A 波方程式的推導 .....A-1

附錄 B FDM 的有限差分式係數推導.....B-1

附錄 C WA-BPM 的係數推導 .....C-1



## 表目錄

表 2-1 各種參數下基本模態的  $n_{eff}$  值.....2-9

表 5-1 各電磁場分量的中心位置.....5-3

## 圖目錄

圖 1-1 典型的波導結構	1-3
圖 2-1 三層平板結構的立體示意圖	2-1
圖 2-2 三層平板結構的平面示意圖	2-2
圖 2-3 梯狀分佈光纖	2-10
圖 2-4 有效折射率法示意圖	2-14
圖 2-5a Rib 波導結構	2-16
圖 2-5b 三個獨立的一維結構	2-16
圖 2-5c 虛擬的一維結構	2-16
圖 3-1 函數 $f(x)$ 示意圖	3-2
圖 3-2 非等間距的格點	3-6
圖 3-3 有限差分法的格點示意圖	3-12
圖 3-4 矩陣 A 元素示意圖	3-12
圖 3-5a 基本模態的場形分佈(引用[3-10])	3-15
圖 3-5b 基本模態的場形分佈(我們的結果)	3-15
圖 3-6a $n_{eff}$ 的誤差對格點數 $N$ 之關係圖(引用[3-10])	3-16
圖 3-6a $n_{eff}$ 的誤差對格點數 $N$ 之關係圖(我們的結果)	3-16
圖 4-1 SVEA 示意圖	4-5
圖 4-2 邊界外的虛擬格點	4-7

圖 4-3 對稱三層平板結構·····	4-20
圖 4-4 輸入函數分佈圖·····	4-22
圖 4-5 $n_{eff}(z)$ 隨距離變化的關係圖 ·····	4-22
圖 4-6 誤差( $n_{eff}(z)-n_{exact}$ )隨距離變化的關係圖 ·····	4-23
圖 4-7 基本模態的函數分佈圖·····	4-23
圖 5-1 Yee 晶格示意圖·····	5-2

## 第一章 緒論

### 1.1 研究動機

光電產業是一個快速發展而且競爭激烈的領域，而商業上的成功則依賴於產品本身效能的提高與發展時間的縮短，而電腦模擬正好可以同時滿足這兩項需求，妥善地使用模擬工具可以大大地減少嘗試錯誤的時間，所以光學系統設計軟體是目前也是將來光電界不可或缺的工具之一。

然而傳統的光學系統設計軟體(像 OSLO, Code V, ASAP)都是建立在幾何光學與純量波方程式的基礎上，因此不適用於波長或次波長尺度的結構上。對於這種尺度的結構而言，光的波動特性是非常明顯的，也就是說我們要從馬克斯威爾方程式下手。也因此已經有許多人投入在這方面的研究上，而有限差分便是這些研究的卓越成果之一，也是本篇論文的主題。

有限差分的概念由於想法簡單、理論推導也不複雜，還有穩定性與精確度都有不錯的評價，並且程式化容易，所以很快的就變成主流工具之一了。目前在光學系統設計中已有許多重要的應用了，像是被運用在波導模態計算的 FDM、處理軸向有結構變化的 FD-BPM，還有屬於時域分析的 FDTD 與 TD-BPM，這些將會在之後的章節中依序地介紹。

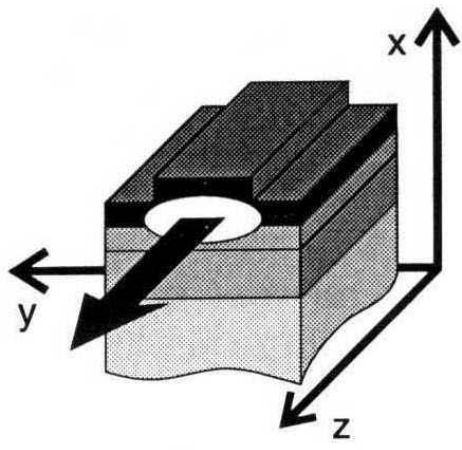
## 1.2 次波長光學系統設計的應用

目前光學系統設計在波長與次波長尺度的應用大部分都在積體光學系統上，因此我們稍微簡介一下這方面的背景。由於現在已經有許多專書在討論積體光學[1-1], [1-2]，所以我們的重點並不是在建立這方面的知識，而在於讓讀者對模擬的目的有個概括性的瞭解。

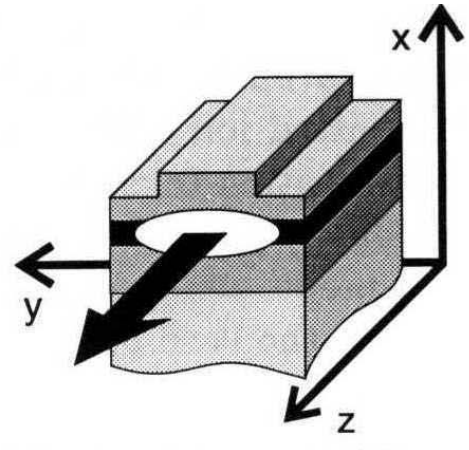
在積體光學中，最基本的就是能夠導引光波行進路徑的波導結構，如圖 1.1 所示。而在設計上，我們想要知道其中特徵模態的數目、有效折射率、場形分佈，還有它們與結構參數之間的關係，這也就是第三章有限差分法的目標。有了這些基本資料以後，我們更進一步的想知道一個任意的入射光在其中傳播情形，這將會是第四章光束傳播法的主題。然而，上述的方法都是在單一頻率的假設下才成立，也就是說屬於穩定態(steady state)的結果。所以為了突破這個限制，我們也將屬於時域分析的 FDTD 與 TD-BPM 納入我們的研究範圍內，它們可以讓我們作更多的事情，像是暫態分析、反射現象、非線性效應…等等的研究。

## 1.3 程式發展平台與工具

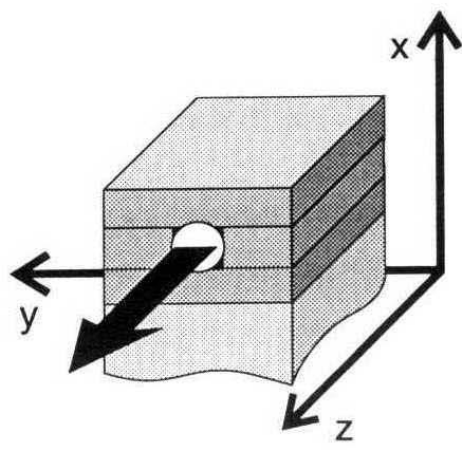
為了讓大家分享我們的成果，所以我們的程式是架構在 PC 平台上。為了記憶體管理效率與系統穩定的考量下(與視窗 98 比較之下)，我們採用了視窗 2000 來做為我們的作業系統。



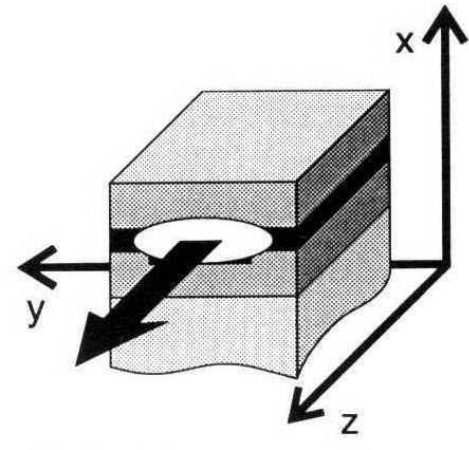
Rib waveguide



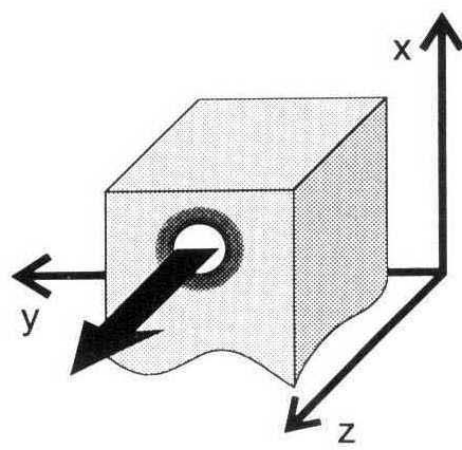
Strip-loaded waveguide



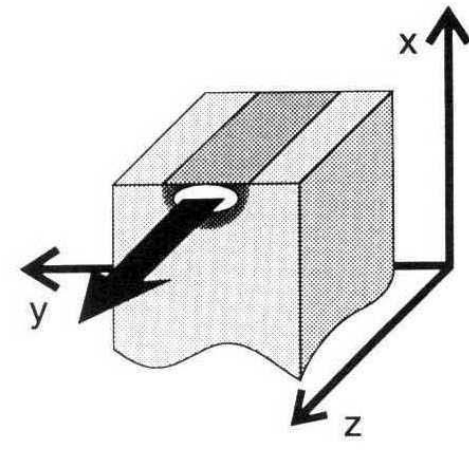
Buried-strip waveguide



Buried-rib waveguide



Buried diffused waveguide



Diffused waveguide

圖 1.1 典型的波導結構(引用[1-1])

另外，為了縮短程式發展時間，我們選了一套工程計算軟體--Matlab 來幫助我們處理一些圖形介面與複雜的數學問題，像是求矩陣的本徵值，而使我們專心處理核心問題。Matlab 是一套語法簡單但功能強大的工程用計算軟體，它可以快速地處理龐大的矩陣運算，再加上豐富的各種函式庫與優異的圖形處理介面，所以目前被廣泛地運用在學術與工業界上，由於我們可以在一些書上找到更詳盡的介紹[1-3], [1-4]，所以就不多介紹了。

然而由於 Matlab 是屬於直譯式的編譯器，在處理迴圈上效率欠佳，因此要盡量避免使用到迴圈的形式而改用向量化的寫法，這需要一些時間去熟悉。對於一些無法避免使用迴圈的情形，Matlab 提供的應用程式介面(application program interface, API)可以幫助我們提昇效率，它可以使我們從 Matlab 內部呼叫 C 語言寫的函示，或著是從外部獨立的 C 語言程式呼叫 Matlab 的內建函數庫而把 Matlab 當成是一個計算引擎 (computing engine)。

#### 1.4 論文結構

本論文主要是介紹次波長光學系統之分析與模擬，其中我們主要是採用有限差分法，共分成六章。第一章首先說明了我們的研究動機，並簡單地回顧了有限差分在光學系統上的發展與應用情形。第二章先討論

解析法，並算出一些精確的值，以作為之後驗證數值方法的工具。第三章則介紹了最基本的 FDM，它通常被用來計算波導的特徵模態的有效折射率  $n_{eff}$  與場形分佈，並且藉此瞭解有限差分的原理與特性。第四章介紹了目前運用最廣的 FDTD，我們詳細地推導了各種波方程式與其有限差分式的各項係數。第五章稍微介紹了 FDTD 與 TD-BPM，以作為將來工作的基礎。第六章則是我們的總結。

#### 參考文獻

- [1-1] R. März, *Integrated Optics*, ARTECH HOUSE, Boston, 1995.
- [1-2] R.G. Hunsperger, *Integrated optics: theory and technology*, Springer-Verlag, New York, 1992.
- [1-3] 張智星，*MATLAB 程式設計與應用*，清蔚科技，2000。
- [1-4] 蒙以正，*MATLAB5 專業的設計技巧*，基峰資訊，1998。



## 第二章 解析法

在正式發展數值方法之前，我們要先討論一下解析法，以便作為將來驗證數值方法之準確性的工具。然而到目前為止，在文獻上能夠不用近似法便能夠完全解析的例子實在不多，我們分別找到了一維結構中的三層平板結構波導(three layer slab optical waveguide)[2-1]與二維結構中的光纖[2-1],[2-2]來作為範例，並實際算了幾個例子。

在本章的最後，我們將介紹有效折射率法[2-3]，雖然它是屬於近似解，其正確性只有在某些條件下才成立，但是如果小心使用的話，我們還是可以相當快速的找出特徵模態的有效折射率(effective index of refraction,  $n_{eff}$ )，所以至今仍有其參考的價值，是一項很好的初步分析工具。

### 2.1 三層平板結構

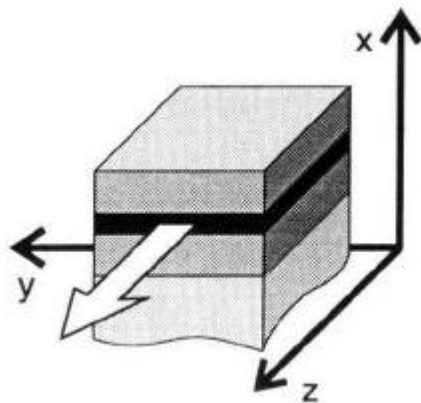


圖 2.1 三層平板結構的立體示意圖

在這個小節中，我們將要去解三層平板結構，如圖 2.1 所示。為了分析方便我們採用圖 2.2 的表示法，其中  $n_1, n_2, n_3$  分別代表三個區域的折射率，而  $W$  為其核心區的寬度，另外座標軸也如圖 2.2 所示。在  $n_1 = n_3$  的情況下，我們稱之為對稱平板結構(symmetry slab)；反之， $n_1 \neq n_3$  就叫做非對稱平板結構(asymmetry slab)。

由於在這種結構中，只有  $x$  軸上的結構有變化，所以我們稱之為一維結構。也因此我們可以令  $\partial/\partial y = 0$ 。最後一點要聲明的是，在  $n_2 > \max(n_1, n_3)$  的條件下，我們才會得到傳導模態。

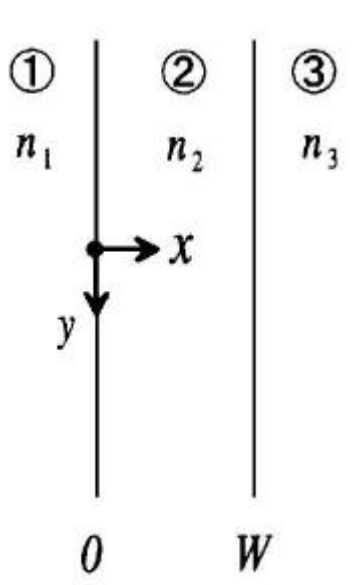


圖 2.2 三層平板結構平面示意圖

由附錄 A 的(A.15)式與(A.16)兩式，我們可以知道電場與磁場會滿足這樣的關係

$$\nabla \times \mathbf{E} = -j\omega \mathbf{m}_r \mathbf{H} \quad (2.1.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = j\omega \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_r \mathbf{E} \quad (2.1.2)$$

它們的分量形式可以寫成

$$\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} = -j\omega m_0 m_r H_x \quad (2.1.3)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = -j\omega m_0 m_r H_y \quad (2.1.4)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = -j\omega m_0 m_r H_z \quad (2.1.5)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} = j\omega \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_r E_x \quad (2.1.6)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = j\omega \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_r E_y \quad (2.1.7)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = j\omega \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_r E_z \quad (2.1.8)$$

但是由於我們現在所處理的結構在 y 方向上是均勻分佈的，所以

$\partial/\partial y = 0$ 。所以(2.1.3-8)可以改寫成

$$-\frac{\partial E_y}{\partial z} = -j\omega m_0 m_r H_x \quad (2.1.9)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = -j\omega m_0 m_r H_y \quad (2.1.10)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} = -j\omega m_0 m_r H_z \quad (2.1.11)$$

$$-\frac{\partial H_y}{\partial z} = j\omega \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_r E_x \quad (2.1.12)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = j\omega \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_r E_y \quad (2.1.13)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} = j\omega \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_r E_z \quad (2.1.14)$$

按照傳統的作法，我們將會分為兩組線性獨立的解來討論，它們分

別是 TE 模與 TM 模。以下我們就分別討論之。

### 2.1.1 TE 模的分析

對 TE 模而言，我們會令

$$E_z = 0 \quad (2.1.15)$$

帶入(2.1.14)式後，得到 $\partial H_y / \partial x = 0$ ，所以推得 $H_y$ 是一個常數，因此我們

可以令

$$H_y = 0 \quad (2.1.16)$$

將(2.1.15)式與(2.1.16)式帶入(2.1.10)式之後，我們可以得到

$\partial E_x / \partial z = 0$ ，同樣地，我們可以令

$$E_x = 0 \quad (2.1.17)$$

將(2.1.15-17)式的結果帶入(2.1.9-14)式之後，我們可以得到

$$-\frac{\partial E_y}{\partial z} = -j\omega\mathbf{m}_r\mathbf{m}_0 H_x \quad (2.1.18)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} = -j\omega\mathbf{m}_r\mathbf{m}_0 H_z \quad (2.1.19)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = j\omega\mathbf{e}_0\mathbf{e}_r E_y \quad (2.1.20)$$

如果我們令 $E_y$ 為獨立變數的話，則 $H_x$ 與 $H_z$ 可以表示成

$$H_x = \frac{1}{j\omega\mathbf{m}_r\mathbf{m}_0} \frac{\partial E_y}{\partial z} \quad (2.1.21)$$

$$H_z = -\frac{1}{j\omega\mathbf{m}_r\mathbf{m}_0} \frac{\partial E_y}{\partial x} \quad (2.1.22)$$

最後將(2.1.20)式與(2.1.21)式帶入(2.1.19)式之後，我們可以得到 TE 模的波方程式

$$\frac{d^2 E_y}{dz^2} + \frac{d^2 E_y}{dx^2} + k_0^2 \mathbf{m}_r \mathbf{e}_r E_y = 0$$

如果我們令  $E_y(x, z) = E_y(x) \exp(-j \mathbf{b}_{\text{eff}} z)$ ，則我們可以得到

$$\frac{d^2 E_y}{dx^2} + k_0^2 (\mathbf{m}_r \mathbf{e}_r - n_{\text{eff}}^2) E_y = 0 \quad (2.1.23)$$

其中  $k_0 = \omega \sqrt{\mathbf{e}_0 \mathbf{m}_0}$ ，而  $\mathbf{b}_{\text{eff}} = k_0 n_{\text{eff}}$ 。根據(2.1.23)式我們可以寫下

$$E_y(x) = C_1 \exp(\mathbf{g}_1 x) \quad \text{其中 } \mathbf{g}_1 = k_0 \sqrt{n_{\text{eff}}^2 - n_1^2} \text{ [第一區]} \quad (2.1.24)$$

$$= C_2 \cos(\mathbf{g}_2 x + \mathbf{a}) \quad \text{其中 } \mathbf{g}_2 = k_0 \sqrt{n_1^2 - n_{\text{eff}}^2} \text{ [第二區]} \quad (2.1.25)$$

$$= C_3 \exp(-\mathbf{g}_3(x - W)) \quad \text{其中 } \mathbf{g}_3 = k_0 \sqrt{n_{\text{eff}}^2 - n_3^2} \text{ [第三區]} \quad (2.1.26)$$

其中我們可以發現共有四個變數  $C_1$ 、 $C_2$ 、 $C_3$  與  $n_{\text{eff}}$ ，所以需要四個等式。

所以我們利用  $E_y$  與  $H_z$  在  $x=0$  與  $x=W$  的邊界條件來製造出四個等式。由

(2.1.11)式可得

$$H_z = \frac{-1}{j \omega \mathbf{m}_0 \mathbf{m}_r} \frac{\partial E_y}{\partial x} \quad (2.1.27)$$

將(2.1.24-26)式的結果帶入上式之後，我們可以得到

$$H_z(x) = -\frac{\mathbf{g}_1}{j \omega \mathbf{m}_0 \mathbf{m}_r} C_1 \exp(\mathbf{g}_1 x) \quad \text{[第一區]} \quad (2.1.28)$$

$$= \frac{\mathbf{g}_2}{j \omega \mathbf{m}_0 \mathbf{m}_r} C_2 \sin(\mathbf{g}_2 x + \mathbf{a}) \quad \text{[第二區]} \quad (2.1.29)$$

$$= \frac{\mathbf{g}_3}{j \omega \mathbf{m}_0 \mathbf{m}_r} C_3 \exp(-\mathbf{g}_3(x - W)) \quad \text{[第三區]} \quad (2.1.30)$$

最後利用下列的四個邊界條件

$$E_{y1}(0) = E_{y2}(0) \quad (2.1.31)$$

$$H_{z1}(0) = H_{z2}(0) \quad (2.1.32)$$

$$E_{y2}(W) = E_{y3}(W) \quad (2.1.33)$$

$$H_{z2}(W) = H_{z3}(W) \quad (2.1.34)$$

最後我們可以得到這樣的關係：

$$C_1 = C_2 \cos a \quad (2.1.35)$$

$$-\frac{g_1}{m_{r1}} C_1 = \frac{g_2}{m_{r2}} C_2 \sin a \quad (2.1.36)$$

$$C_2 \cos(g_2 W + a) = C_3 \quad (2.1.37)$$

$$\frac{g_2}{m_{r2}} C_2 \sin(g_2 W + a) = \frac{g_3}{m_{r3}} C_3 \quad (2.1.38)$$

將(2.1.36)除以(2.1.35)式以後，我們可以得到

$$a = -\tan^{-1}\left(\frac{m_{r2} g_1}{m_{r1} g_2}\right) + q_1 p \quad \text{其中 } q_1 = 0, 1, 2, \dots \quad (2.1.39)$$

另外，將(2.1.38)除以(2.1.37)式以後，我們也可以得到

$$g_2 W = \tan^{-1}\left(\frac{m_{r2} g_3}{m_{r3} g_2}\right) - a + q_2 p \quad \text{其中 } q_2 = 0, 1, 2, \dots \quad (2.1.40)$$

將(2.1.39)帶入(2.1.40)式之後，我們可以得到

$$g_2 W = \tan^{-1}\left(\frac{m_{r2} g_3}{m_{r3} g_2}\right) + \tan^{-1}\left(\frac{m_{r2} g_1}{m_{r1} g_2}\right) + q p \quad \text{其中 } q = q_1 + q_2 = 0, 1, 2, \dots \quad (2.1.41)$$

再利用數學公式

$$\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right) = \frac{p}{2} - \tan^{-1}\left(\frac{x}{y}\right) \quad (2.1.42)$$

我們可以將(2.1.41)式改寫成

$$g_2 W = -\tan^{-1}\left(\frac{m_{r3} g_2}{m_{r1} g_3}\right) - \tan^{-1}\left(\frac{m_{r1} g_2}{m_{r2} g_1}\right) + (q+1)p \quad \text{其中 } q = 0, 1, 2, \dots \quad (2.1.43)$$

### 2.1.2 TM 模的分析

對 TM 模而言，我們會令

$$H_z = 0 \quad (2.1.44)$$

利用(2.1.11)與(2.1.13)式，我們可以得到

$$H_x = E_y = 0 \quad (2.1.45)$$

將上兩式的結果帶入(2.1.9)-(2.1.14)式後，我們可以得到  $H_y$  的波方程式

$$\frac{d^2 H_y}{dx^2} + k_0^2 (\mathbf{e}_r \mathbf{m}_r - n_{eff}^2) H_y = 0 \quad (2.1.46)$$

根據(2.1.46)式我們可以寫下

$$H_y(x) = C_1 \exp(\mathbf{g}_1 x) \quad \text{其中 } \mathbf{g}_1 = k_0 \sqrt{n_{eff}^2 - n_1^2} \text{ [第一區]} \quad (2.1.47)$$

$$= C_2 \cos(\mathbf{g}_2 x + \mathbf{a}) \quad \text{其中 } \mathbf{g}_2 = k_0 \sqrt{n_1^2 - n_{eff}^2} \text{ [第二區]} \quad (2.1.48)$$

$$= C_3 \exp(-\mathbf{g}_3 (x - W)) \quad \text{其中 } \mathbf{g}_3 = k_0 \sqrt{n_{eff}^2 - n_3^2} \text{ [第三區]} \quad (2.1.49)$$

其中我們可以發現共有四個變數  $C_1$ 、 $C_2$ 、 $C_3$  與  $n_{eff}$ ，所以需要四個等式。

從(2.1.14)式，我們可得

$$E_z = \frac{1}{j\omega \epsilon_0 \mathbf{e}_r} \frac{\partial H_y}{\partial x} \quad (2.1.50)$$

將(2.1.47-49)式的結果帶入上式之後，我們可以得到

$$E_z(x) = \frac{\mathbf{g}_1}{j\omega \epsilon_0 \mathbf{e}_r} C_1 \exp(\mathbf{g}_1 x) \quad (2.1.51)$$

$$= -\frac{\mathbf{g}_2}{j\omega \epsilon_0 \mathbf{e}_r} C_2 \sin(\mathbf{g}_2 x + \mathbf{a}) \quad (2.1.52)$$

$$= \frac{\mathbf{g}_3}{j\omega\mathbf{e}_0\mathbf{e}_r} C_3 \exp(-\mathbf{g}_3(x-W)) \quad (2.1.53)$$

再利用在  $E_z$  與  $H_y$  在  $x=0$  與  $x=W$  連續的條件，我們可得到

$$C_1 = C_2 \cos \mathbf{a} \quad (2.1.54)$$

$$-\frac{\mathbf{g}_1}{\mathbf{e}_{r1}} C_1 = \frac{\mathbf{g}_2}{\mathbf{e}_{r2}} C_2 \sin \mathbf{a} \quad (2.1.55)$$

$$C_2 \cos(\mathbf{g}_2 W + \mathbf{a}) = C_3 \quad (2.1.56)$$

$$-\frac{\mathbf{g}_2}{\mathbf{e}_{r2}} C_2 \sin(\mathbf{g}_2 W + \mathbf{a}) = -\frac{\mathbf{g}_3}{\mathbf{e}_{r3}} C_3 \quad (2.1.57)$$

將(2.1.55)式除以(2.1.54)式之後，我們可以得到

$$\mathbf{a} = -\tan^{-1}\left(\frac{\mathbf{e}_{r2} \mathbf{g}_1}{\mathbf{e}_{r1} \mathbf{g}_2}\right) + q_1 \mathbf{p} \quad \text{其中 } q_1 = 0, 1, 2, \dots \quad (2.1.58)$$

同樣地，將(2.1.57)式除以(2.1.56)式之後，我們可以得到

$$\mathbf{g}_2 W = \tan^{-1}\left(\frac{\mathbf{e}_{r2} \mathbf{g}_3}{\mathbf{e}_{r3} \mathbf{g}_2}\right) - \mathbf{a} + q_2 \mathbf{p} \quad \text{其中 } q_2 = 0, 1, 2, \dots \quad (2.1.59)$$

將(2.1.58)式帶入(2.1.59)式，我們可得到

$$\mathbf{g}_2 W = \tan^{-1}\left(\frac{\mathbf{e}_{r2} \mathbf{g}_3}{\mathbf{e}_{r3} \mathbf{g}_2}\right) + \tan^{-1}\left(\frac{\mathbf{e}_{r2} \mathbf{g}_1}{\mathbf{e}_{r1} \mathbf{g}_2}\right) + q \mathbf{p} \quad \text{其中 } q = q_1 + q_2 = 0, 1, 2, \dots \quad (2.1.60)$$

最後，利用(2.1.42)式的數學公式，我們可以將(2.1.60)式改寫成

$$\mathbf{g}_2 W = -\tan^{-1}\left(\frac{\mathbf{e}_{r3} \mathbf{g}_2}{\mathbf{e}_{r2} \mathbf{g}_3}\right) - \tan^{-1}\left(\frac{\mathbf{e}_{r1} \mathbf{g}_2}{\mathbf{e}_{r2} \mathbf{g}_1}\right) + (q+1) \mathbf{p} \quad \text{其中 } q = 0, 1, 2, \dots \quad (2.1.61)$$

### 2.1.3 例子

為了與數值方法作交互驗證，我們也實際地去寫了一個程式來精確



地計算出特徵模態的  $n_{eff}$ ，我們就稍微討論一下作法。利用(2.1.43)與(2.1.61)式，我們可以得到判別式

$$f_{TE}(n) = g_2 W + \tan^{-1}\left(\frac{m_{r3} g_2}{m_{r1} g_3}\right) + \tan^{-1}\left(\frac{m_{r1} g_2}{m_{r2} g_1}\right) + (q+1)p \quad (2.1.62)$$

$$f_{TM}(n) = g_2 W + \tan^{-1}\left(\frac{e_{r3} g_2}{e_{r2} g_3}\right) + \tan^{-1}\left(\frac{e_{r1} g_2}{e_{r2} g_1}\right) + (q+1)p \quad (2.1.63)$$

其中  $n$  為變數。而這兩個函數的根就是我們要的  $n_{eff}$ ，我們可以用很簡單的二分法來逼近  $n_{eff}$  到小數點下任何一位數字。

得到了  $n_{eff}$  以後，我們就可以算出其它所有的資料了，包括推出各個電磁場分量的分佈函數了。最後我們將在文獻上常被使用的結構與其參數來當作我們的例子，算出其基本模態的  $n_{eff}$ ，並將結果列於表 2.1

結構	$W$	$n_{core}$	$n_{clad}$	$l$	$TE n_{eff}$	$TM n_{eff}$
A[2-4]	2 mm	3.3704	3.2874	1.55 mm	<u>3.35798693676468</u>	3.35770896615869
B[2-4]	2 mm	$\sqrt{11.088}$	$\sqrt{11.044}$	1.55 mm	<u>3.32578847351789</u>	3.32578032833332
C[2-5]	2 mm	1.5	1.4	1.3 mm	<u>1.47842453415186</u>	<u>1.47601675040746</u>

表 2.1 各種參數下基本模態的  $n_{eff}$  值

上表中底線代表與文獻吻合的數字，但是我們在文獻上很難找到這們多的有效位數的  $n_{eff}$  值，所以只能作部分的比對。我們可以發現結構 B 的結果與論文完全吻合(論文只有給 TE 模的  $n_{eff}$  值)。

## 2.2 梯狀分佈光纖

在這個小節裡，我們將實際地去導出光纖的各階傳導模態的場形分佈與  $n_{eff}$ ，而我們要算的光纖其折射率分佈如圖 2.2 所示，分別為核心層的  $n_1$  與覆層的  $n_2$ ，是屬於梯狀分佈光纖 (step-index fiber)。

雖然完全的解析這個問題需要使用到混合模態分析法 (hybrid mode analysis) [2-6]，然而過程有點繁瑣，所以通常使用弱導引近似法 (weakly guiding approximation, WGA) 來分析 [2-7]，也就是忽略掉相對折射率的微分項，但先決條件是核心層與覆層的折射率差值要夠小，通常要小於 1% 才會得到準確的結果，而這對單模光纖而言是成立的。通常我們把使用 WGA 所得到的特徵模態就稱為線偏極化模 (linear polarized modes) [2-1]。

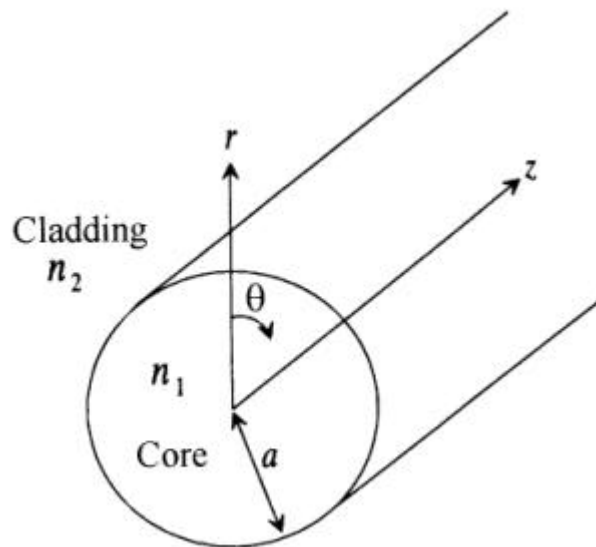


圖 2.3 梯狀分佈光纖

在做 WGA 的假設之後，我們可以得到附錄 A 的(A.36)式的荷姆赫茲方程式

$$\nabla^2 \mathbf{?} + k^2 \mathbf{?} = 0 \quad (2.2.1)$$

其中  $\mathbf{?} = \mathbf{E} \text{ or } \mathbf{H}$ 。由於我們要算的是特徵模態，所以可以令

$$\mathbf{?}(r, \mathbf{q}, z) = \mathbf{?}(r, \mathbf{q})e^{ibz} \quad (2.2.2)$$

其中  $b = k_0 n_{eff}$ 。在帶入(2.2.1)式並取縱軸上的分量  $?_t$  後，我們可以得到

$$\nabla^2 ?_t + k_0^2 (n_r^2 - n_{neff}^2) ?_t = 0 \quad (2.2.3)$$

其中  $t = x \text{ or } y$ 。在極座標下，拉普拉斯可以寫成：

$$\nabla^2 = \nabla_{\perp}^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{q}^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.2.4)$$

利用變數分離法，我們設可以設

$$?_t(r, \mathbf{q}) = R(r)\Theta(\mathbf{q}) \quad (2.2.5)$$

將上式帶入(2.2.1)式並整理之後，我們可以得到兩個獨立的方程式

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR(r)}{dr} + k_0^2 \left( n_r^2 - n_{eff}^2 - \frac{l^2}{r^2} \right) R(r) = 0 \quad (2.2.6)$$

$$\frac{d^2 \Theta(\mathbf{q})}{d\mathbf{q}^2} + l^2 \Theta(\mathbf{q}) = 0 \quad (2.2.7)$$

(2.2.7)式的解很容易可以看出為

$$\Theta(\mathbf{q}) = \sin(l\mathbf{q} + f) \quad (2.2.8)$$

其中  $l$  為任意整數，而  $f$  則為相位常數。為了計算方便，我們再使用下列的變數變換

$$\tilde{u}^2 = k_0^2(\mathbf{e}_r - n_{eff}^2) \quad (2.2.9)$$

$$\mathbf{x} = \tilde{u}r \quad (2.2.10)$$

(2.2.6)式將可以被改寫成

$$\frac{d^2 R(r)}{d\mathbf{x}^2} + \frac{1}{\mathbf{x}} \frac{dR(r)}{d\mathbf{x}} + k_0^2 \left(1 - \frac{l^2}{\mathbf{x}^2}\right) R(r) = 0 \quad (2.2.11)$$

(2.2.11)式的解就是標準的  $l$  階的 Bessel 函數，我們可以寫成

$$R(r) = \begin{cases} AJ_l\left(\frac{ur}{a}\right) + BN_l\left(\frac{ur}{a}\right) & \text{for } r \leq a \\ CK_l\left(\frac{wr}{a}\right) + DI_l\left(\frac{wr}{a}\right) & \text{for } r \geq a \end{cases} \quad (2.2.12)$$

其中  $J_l(ur/a)$  與  $N_l(ur/a)$  分別代表的是  $l$  階的 Bessel 函數的第一型與第二型，而  $K_l(ur/a)$  與  $I_l(ur/a)$  則分別代表的是  $l$  階的修改後的 Bessel 函數的第一型與第二型。其中我們使用了

$$u^2 = k_0^2 a^2 (\mathbf{e}_{r1} - n_{eff}^2) \quad (2.2.13)$$

$$w^2 = k_0^2 a^2 (n_{eff}^2 - \mathbf{e}_{r2}) \quad (2.2.14)$$

而它們可以滿足這樣的關係

$$u^2 + w^2 = v^2 = k_0^2 a^2 (\mathbf{e}_{r1} - \mathbf{e}_{r2}) \quad (2.2.15)$$

由於函數  $N_l(ur/a)$  在  $x=0$  的地方會發散，而函數  $I_l(wr/a)$  在  $x=\infty$  的地方會發散，所以係數  $B$  與  $D$  必須為零。所以 (2.2.12) 式必須變成

$$R(r) = \begin{cases} AJ_l\left(\frac{ua}{a}\right) & \text{for } r \leq a \\ CK_l\left(\frac{wa}{a}\right) & \text{for } r \geq a \end{cases} \quad (2.2.16)$$

利用  $R(r)$  必須滿足在  $r = a$  上的邊界條件，我們可以得到

$$R(a-0) = R(a+0) \quad (2.2.17)$$

與

$$\left. \frac{dR(r)}{dr} \right|_{a-0} = \left. \frac{dR(r)}{dr} \right|_{a+0} \quad (2.2.18)$$

將(2.2.16)式帶入上兩式並將結果整理合併之後，我們可以得到

$$\begin{pmatrix} J_l(u) & -K_l(w) \\ uJ_l'(u) & -wK_l'(w) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix} = 0 \quad (2.2.19)$$

而這個聯立方程式要有解的先決條件就是

$$\begin{vmatrix} J_l(u) & -K_l(w) \\ uJ_l'(u) & -wK_l'(w) \end{vmatrix} = 0 \quad (2.2.20)$$

將(2.2.20)式展開並整理之後，我們可以得到

$$\frac{wK_l'(w)}{K_l(w)} = \frac{uJ_l'(u)}{J_l(u)} = 0 \quad (2.2.21)$$

其中符號右上角的一撇是代表對  $r$  的一階微分。這就是著名的特徵方程式了。之後我們就可以依據(2.2.15)與(2.2.21)式來求出有效折射率  $n_{eff}$ 。

### 2.3 有效折射率法

在這小節裡我們將介紹了有效折射率法(effective index method, EIM) [2-1], [2-3]，雖然它是屬於近似法，但是如果小心使用的話，誤差是可以相當小的。EIM 的主要特色是將二維結構轉換成許多的一維結構來處理，如圖 2.4 所示，我們可以將先分為許多的縱向的一維結構，然後

分別求出各個區域的 $n_{eff}$ ，再將所得到的 $n_{eff}$  投影的橫向的軸上，構成一個虛擬的一維結構，而其有效折射率及即是所求。

另外，它也可以先將虛擬結構找到，再配合二維的 BPM，就可以很快的分析複雜的三維結構了。

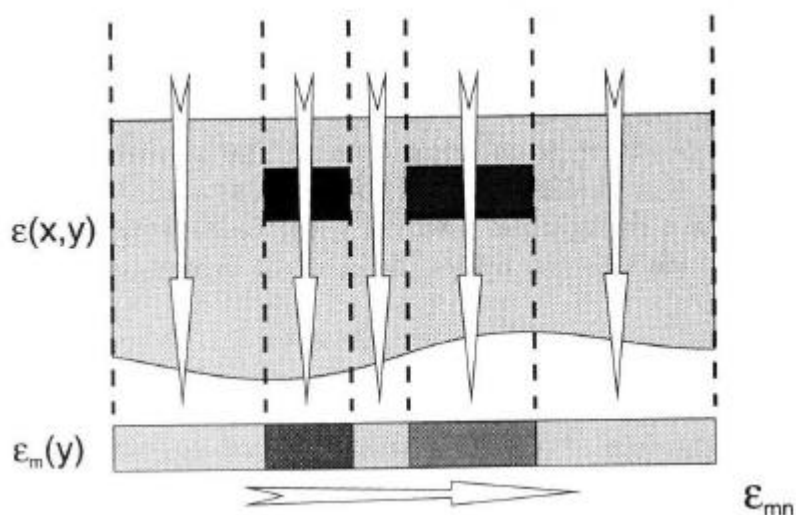


圖 2.4 有效折射率法示意圖

接下來我們就來討論它的理論基礎，由於 EIM 並不能適用於所有的二維結構，所以我們就採用如圖 2.5a 的結構來說明。由荷姆赫茲方程式，我們可以得到

$$\frac{\partial^2 \mathbf{f}(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{f}(x, y)}{\partial y^2} + k_0^2 (n_r^2(x, y) - n_{eff}^2) \mathbf{f}(x, y) = 0 \quad (2.3.1)$$

其中  $n_{eff}$  是我們想要求得的有效折射率。利用變數分離法我們可以寫下

$$\mathbf{f}(x, y) = f(x)g(y) \quad (2.3.2)$$

將上式帶入(2.3.1)式並整理之後，可得

$$\frac{1}{f(x)} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} + \frac{1}{g(y)} \frac{d^2 f(y)}{dy^2} + k_0^2 (n_r^2(x, y) - n_{eff}^2) f(x, y) = 0 \quad (2.3.3)$$

接下來，我們令上式中的第二與三項的和為  $N^2(x)$

$$\frac{1}{g(y)} \frac{d^2 f(y)}{dy^2} + k_0^2 n_r^2(x, y) = k_0^2 N^2(x) \quad (2.3.4)$$

所以(2.3.1)式就變成

$$\frac{1}{f(x)} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} - k_0^2 n_{eff}^2 = -k_0^2 N^2(x) \quad (2.3.5)$$

也就是說，我們只要依序地解兩個方程式

$$\frac{1}{g(y)} \frac{d^2 f(y)}{dy^2} + k_0^2 (n_r^2 - N^2(x)) = 0 \quad (2.3.6)$$

$$\frac{1}{f(x)} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} + k_0^2 (N^2(x) - n_{eff}^2) = 0 \quad (2.3.7)$$

就可以得到  $n_{eff}$  了。歸納上述的推導我們可以分成四個步驟

- (a) 將要解的二維結構分解為數個一維結構，如圖 2.5b 所示。
- (b) 利用多層平板結構的方法算出各區的有效折射率。
- (c) 將(b)所求出的各區有效折射率投影到  $x$  軸，構成一個虛擬的多層板結構，如圖 2.5c 所示。
- (d) 算出(c)中所得到的虛擬結構的  $n_{eff}$ ，這就是我們的所求。

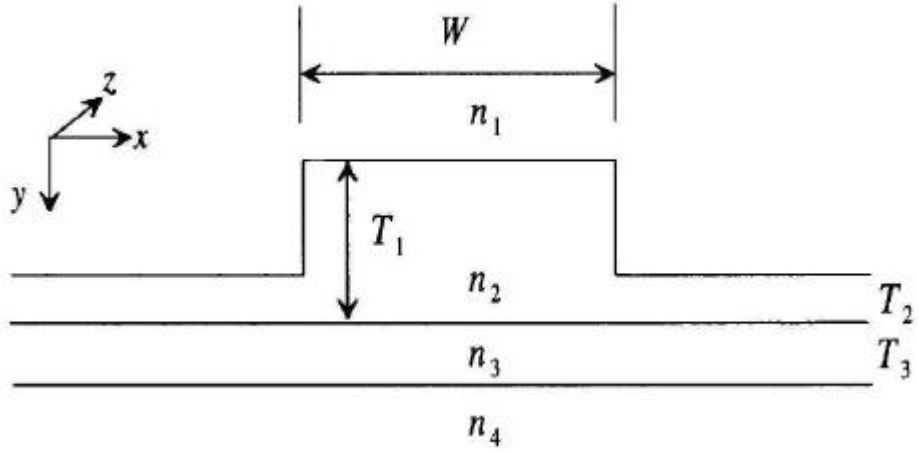
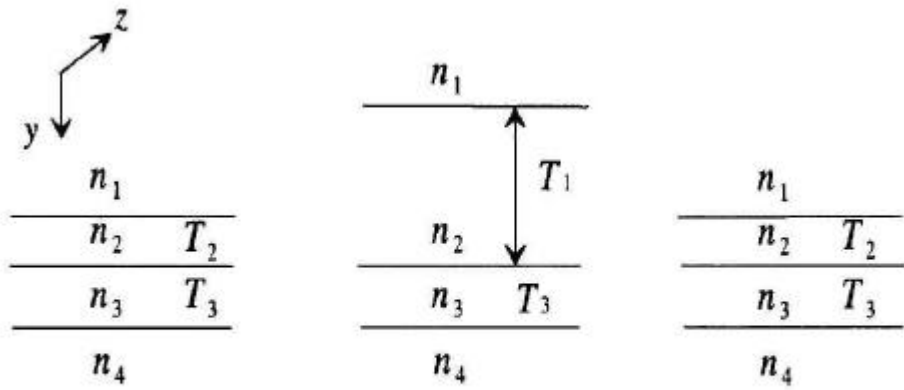


圖 2.5a Rib 波導結構



Effective index  $n_{\text{eff}1}$

Effective index  $n_{\text{eff}2}$

Effective index  $n_{\text{eff}3}$

圖 2.5b 三個獨立的一維結構

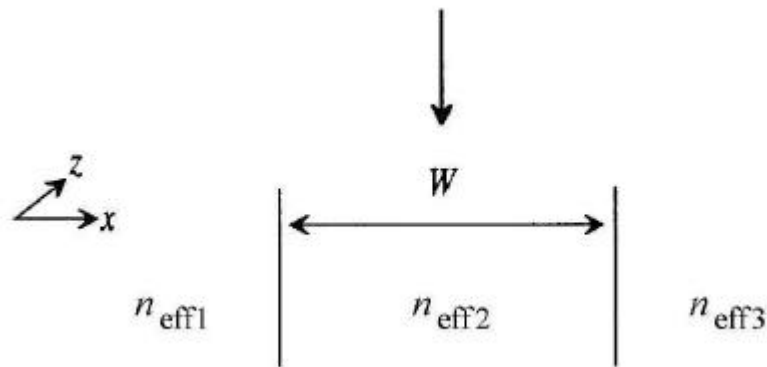


圖 2.5c 虛擬的一維結構



## 參考文獻

- [2-1] K. Kawano and T. Kitoh, *Introduction to Optical Waveguide Analysis*, Wiley, New York, 2001.
- [2-2] A.W. Snyder and J.D. Love, *Optical waveguide theory*, Chapman and Hall, London, 1983.
- [2-3] R. März, *Integrated Optics*, ARTECH HOUSE, Boston, 1995.
- [2-4] Y.P Chiou, Y.C. Chiang and H.C. Chang, "Improved three-point formulas considering the interface conditions in the finite-difference analysis of step index optical devices," *J. of Lightwave Technol.*, vol.18, pp.243-251, 2000.
- [2-5] C.L. Xu, W.P. Huang and S.K. Chaudhuri, "Efficient and accurate vector mode calculation by beam propagation method," *J. of Lightwave Technol.*, vol.11, pp.1209-1215,1993.
- [2-6] E. Snitzer, "Cylindrical dielectric waveguide modes," *J. Opt. Soc. Am.*, vol.51, pp.491-498, 1961.
- [2-7] D. Gloge, "Weakly guiding fibers," *Appl. Opt.*, vol.10, pp. 2252-2258, 1971.

## 第三章 有限差分法

在積體光學元件的設計與模擬中，如何找出基本模態的傳播常數與場形分佈是一件相當重要的工作，也因此經過二十多年的發展後，我們仍然可以發現不斷有新的方法地被提出來。

在幾篇回顧的文獻中[3-1]-[3-4]我們可以找到許多不同處理這個問題的方法，而在這些文獻中有限差法是最常被提到的方法之一，而且為了可以延伸到光束傳播法，所以我們採用了有限差分法來計算積體光學元件的基本模態與場形分佈。

### 3.1 FDM 的歷史回顧

早在 1985 年[3-5]，就有人運用有限差分法來計算積體光學元件的基本模態，然而當時所能處理的是純量波方程式。不久之後 Stern 便發表了基於半向量波方程式的有限差分法[3-6], [3-7]，它已經可以將偏極的特性考慮進去。而基於全向量波方程式的有限差分法一直到 1994 年才由 Xu 等人提出[3-8]。它可以完全解決分析二維截面光波導管的問題，所以目前被廣泛地運用在各種電腦輔助設計軟體上。

### 3.2 FD 的概念

首先我們來解釋有限差分法的概念，假設有一個一維函數  $f(x)$ ，如圖 3.1 所示，其在  $x = -h_1$ 、 $0$ 、 $h_2$  的函數值分別為  $f_1$ 、 $f_3$ 、 $f_2$ ，利用泰勒展開式我們可以得到這樣的關係：

$$f_1 = f(-h_1) = f(0) - \frac{1}{1!}h_1 f^{(1)}(0) + \frac{1}{2!}h_1^2 f^{(2)}(0) - \frac{1}{3!}h_1^3 f^{(3)}(0) + O(h_1^4) \quad (3.2.1)$$

$$f_2 = f(h_2) = f(0) + \frac{1}{1!}h_2 f^{(1)}(0) + \frac{1}{2!}h_2^2 f^{(2)}(0) + \frac{1}{3!}h_2^3 f^{(3)}(0) + O(h_2^4) \quad (3.2.2)$$

其中  $f^{(n)}(x)$  是  $f(x)$  的  $n$  階微分。將兩式相減並整理之後我們可以得到

$$f_2 - f_1 = (h_1 + h_2)f^{(1)}(0) + \frac{1}{2}(h_2^2 - h_1^2)f^{(2)}(0) + O(h^3) \quad (3.2.3)$$

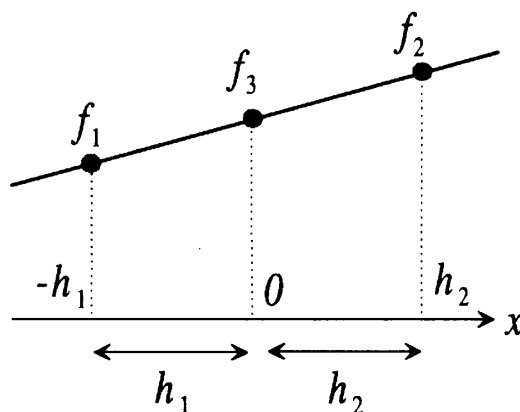


圖 3.1 函數  $f(x)$  示意圖

移項整理之後我們可以將函數  $f(x)$  的一階微分寫成：

$$f^{(1)}(0) = \frac{f_2 - f_1}{h_1 + h_2} + \frac{1}{2}(h_2 - h_1)f^{(2)}(0) + O(h^2) \quad (3.2.4)$$

通常我們會將函數  $f(x)$  的一階微分的差分式寫成

$$f^{(1)}(0) = \frac{f_2 - f_1}{h_1 + h_2} \quad (3.2.5)$$

而其誤差項在  $h_1 = h_2$  的時候為  $O(h^2)$ ；但是當  $h_1 \neq h_2$  時，誤差就擴大成  $O(h)$ 。利用同樣的方法，經過簡單的加減消去法以後，我們可以得到二

階微分的差分式如下：

$$f^{(2)}(0) = \frac{2}{h_1 h_2} \frac{h_2 f_1 - (h_1 + h_2) f_3 + h_1 f_2}{(h_1 + h_2)} \quad (3.2.6)$$

同樣地，當  $h_1 = h_2$  時它的誤差也是為  $O(h^2)$ ；但是當  $h_1 \neq h_2$  時，誤差就變成  $O(h)$ 。

因此有限差分法的誤差基本上就是為  $O(h^2)$ ，所以在記憶體允許的情形下我們要選擇等間格分割(equidistant discretization)，這樣一來誤差會較小。即使是要用非等間格分割(nonequidistant discretization)也要注意讓間隔大小的變化不能太大，以免增加誤差。

### 3.3 FDM 的波方程式推導

這一個小節我們將會得到可以程式化的波方程式，按其簡化程度可以分作三種情況來討論。

#### 3.3.1 向量波方程式

由附錄 A 的(A.33)式，我們知道電場  $\mathbf{E}$  的波方程式為

$$\nabla^2 \bar{\mathbf{E}} + \nabla \left( \frac{\nabla \cdot \bar{\mathbf{E}}}{\epsilon_r} \right) + k^2 \bar{\mathbf{E}} = 0 \quad (3.3.1)$$

(3.3.1)式的縱軸分量可以寫成

$$\nabla^2 \bar{E}_t + \nabla_t \left( \frac{\nabla_t \epsilon_r \cdot \bar{\mathbf{E}}_t}{\epsilon_r} + \frac{1}{\epsilon_r} \frac{\partial \epsilon_r}{\partial z} \cdot \bar{E}_z \right) + k^2 \bar{\mathbf{E}}_t = 0 \quad (3.3.2)$$

由於波導在  $z$  軸上是均勻分佈的，所以相對電介質係數對  $z$  軸的微分為

零：

$$\frac{\partial \varepsilon_r}{\partial z} = 0 \quad (3.3.3)$$

將上式帶回(3.3.2)式中，並作一些整理後我們可以得到

$$-\frac{\partial^2}{\partial z^2} \bar{\mathbf{E}}_t = \nabla_{\perp}^2 \bar{\mathbf{E}}_t + \nabla_t \left( \frac{\nabla_t \varepsilon_r \cdot \bar{\mathbf{E}}_t}{\varepsilon_r} \right) + k^2 \bar{\mathbf{E}}_t = \begin{bmatrix} P_{xx} & P_{xy} \\ P_{yx} & P_{yy} \end{bmatrix} \bar{\mathbf{E}}_t = \mathbf{P} \bar{\mathbf{E}}_t \quad (3.3.4)$$

其中

$$\bar{\mathbf{E}}_t = \begin{bmatrix} \bar{E}_x \\ \bar{E}_y \end{bmatrix} \quad (3.3.5)$$

$$P_{xx} \bar{E}_x = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r \bar{E}_x)}{\partial x} \right] + \frac{\partial^2 \bar{E}_x}{\partial y^2} + k^2 \bar{E}_x \quad (3.3.6)$$

$$P_{yy} \bar{E}_y = \frac{\partial^2 \bar{E}_y}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r \bar{E}_y)}{\partial y} \right] + k^2 \bar{E}_y \quad (3.3.7)$$

$$P_{yx} \bar{E}_x = \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r \bar{E}_x)}{\partial x} \right] - \frac{\partial^2 \bar{E}_x}{\partial y \partial x} \quad (3.3.8)$$

$$P_{xy} \bar{E}_y = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r \bar{E}_y)}{\partial y} \right] - \frac{\partial^2 \bar{E}_y}{\partial x \partial y} \quad (3.3.9)$$

其中我們使用了這樣的關係

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r \bar{E}_x)}{\partial x} \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial \varepsilon_r}{\partial y} \bar{E}_x + \frac{\partial \bar{E}_x}{\partial x} \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial \varepsilon_r}{\partial x} \bar{E}_x \right) + \frac{\partial^2 \bar{E}_x}{\partial x^2} \quad (3.3.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r \bar{E}_y)}{\partial y} \right] = \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial \varepsilon_r}{\partial y} \bar{E}_y + \frac{\partial \bar{E}_y}{\partial y} \right] = \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial \varepsilon_r}{\partial y} \bar{E}_y \right) + \frac{\partial^2 \bar{E}_y}{\partial y^2} \quad (3.3.11)$$

這樣的作法可以使所有的微分項皆為連續，以減少因電場不連續所造成的誤差[3-8]。由於我們要討論的是二維截面的波導問題，所以電場 $\mathbf{E}_t$ 可

以寫成：

$$\bar{\mathbf{E}}_t(x, y, z) = \mathbf{E}_t(x, y)e^{-j\beta z} \quad (3.3.12)$$

其中  $\beta = k_0 n_{eff}$  為傳播常數，而  $n_{eff}$  為有效折射率。要注意上式帶入(3.3.4)

式後，我們可以得到：

$$\beta^2 \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{xx} & P_{xy} \\ P_{yx} & P_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \quad (3.3.13)$$

這就是 Xu 等人[3-8]所得到的矩陣形式。

### 3.3.2 半向量波方程式

在積體光學中，大部分的情況下兩個偏極電場的交互作用很弱，所以  $E_x$  與  $E_y$  的耦合項 ( $P_{xy}$  與  $P_{yx}$ ) 通常可以被忽略掉。因此(3.3.13)式就變成兩個獨立的方程式

$$P_{xx}E_x = \beta^2 E_x \quad ; \text{Quasi-TE modes} \quad (3.3.14)$$

$$P_{yy}E_y = \beta^2 E_y \quad ; \text{Quasi-TM modes} \quad (3.3.15)$$

這就是 Stern 所得到的波方程式[3-6], [3-7]，通常被稱為半向量波方程式。其中(3.3.14)式的解被稱為 TE 模態，而(3.3.15)式的解被稱為 TM 模態。

### 3.3.3 純量波方程式

在折射率的變化很小的情況下，我們可以更進一步的令  $\partial \epsilon_r / \partial x = 0$  與  $\partial \epsilon_r / \partial y = 0$ 。如此一來(3.3.14-15)式就可以化簡成一個式子

$$\beta^2 E_t = P E_t \quad (3.3.16)$$

其中  $t \in \{x, y\}$ ，而

$$P_{xx} = P_{yy} = P = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + k^2 \quad (3.3.17)$$

而(3.3.16)式就被稱為純量波方程式。

### 3.4 有限差分形式

接下來，我們將要去導出上一個小節所導出的各個波方程式的有限差分形式。不同於 Stern [3-6], [3-7] 的作法，在這裡我們使用了非等間距的晶格來處理有限差分法。另外一點要注意的是，不同介質的交界面一定要設在兩個格點的中央，以減少誤差[3-6]。

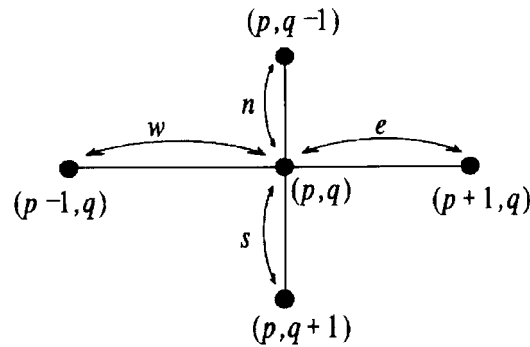


圖 3.2 非等間距的格點

首先，我們拿(3.3.6)式來作例子

$$P_{xx} E_x = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r E_x)}{\partial x} \right] + \frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} + k^2 E_x \quad (3.4.1)$$

為了表示方便，我們將採用下列的符號

$$E_{p,q} = E(x_p, y_q) \quad (3.4.2)$$

$$E_{p\pm 1, q\pm 1} = E(x_{p\pm 1}, y_{q\pm 1}) \quad (3.4.3)$$

$$n = y_q - y_{q-1} \quad (3.4.4)$$

$$s = y_{q+1} - y_q \quad (3.4.5)$$

$$e = x_{p+1} - x_p \quad (3.4.6)$$

$$w = x_p - x_{p-1} \quad (3.4.7)$$

假想在 $(p, q)$ 與 $(p+1, q)$ 之間有一個虛擬的個點 $(p+1/2, q)$ ，對於一階微分項，利用(3.2.5)式我們可以寫下

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial \varepsilon_r}{\partial x} E_x \right) \Big|_{p,q} = \frac{2}{e+w} \left\{ \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r E_x)}{\partial x} \right] \Big|_{p+1/2,q} - \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r E_x)}{\partial x} \right] \Big|_{p-1/2,q} \right\} \quad (3.4.6)$$

再利用一次(3.2.5)式，我們可以得到等式右邊括弧內的兩項

$$\left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r E_x)}{\partial x} \right] \Big|_{p+1/2,q} = \frac{2}{\varepsilon_r(p+1, q) + \varepsilon_r(p, q)} \left( \frac{\varepsilon_r(p+1, q) E_{p+1}^x - \varepsilon_r(p, q) E_{p,q}^x}{e} \right) \quad (3.4.7)$$

$$\left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r E_x)}{\partial x} \right] \Big|_{p-1/2,q} = \frac{2}{\varepsilon_r(p, q) + \varepsilon_r(p-1, q)} \left( \frac{\varepsilon_r(p, q) E_{p,q}^x - \varepsilon_r(p-1, q) E_{p-1,q}^x}{w} \right) \quad (3.4.8)$$

將上兩式帶入(3.4.6)式，並整理之後可得

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial \varepsilon_r}{\partial x} E_x \right) \Big|_{p,q} = \frac{2}{e+w} & \left\{ \frac{2}{e} \frac{\varepsilon_r(p+1, q)}{\varepsilon_r(p+1, q) + \varepsilon_r(p, q)} E_{p+1,q}^x + \frac{2}{w} \frac{\varepsilon_r(p-1, q)}{\varepsilon_r(p, q) + \varepsilon_r(p-1, q)} E_{p-1,q}^x \right. \\ & \left. - \left[ \frac{2}{e} \frac{\varepsilon_r(p, q)}{\varepsilon_r(p+1, q) + \varepsilon_r(p, q)} + \frac{2}{w} \frac{\varepsilon_r(p, q)}{\varepsilon_r(p, q) + \varepsilon_r(p-1, q)} \right] E_{p,q}^x \right\} \quad (3.4.9) \end{aligned}$$

至於二階微分項，利用(3.2.6)式我們可以得到



$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} \Big|_{p,q} = \frac{2}{s(s+n)} E_{p,q+1}^x - \frac{2}{ns} E_{p,q}^x + \frac{2}{n(s+n)} E_{p,q-1}^x \quad (3.4.10)$$

將(3.4.9-10)的結果帶入(3.4.1)式，並整理之後我們可以得到

$$P_{xx} E_x = \alpha_w^{xx} E_{p-1,q}^x + \alpha_e^{xx} E_{p+1,q}^x + \alpha_n^{xx} E_{p,q-1}^x + \alpha_s^{xx} E_{p,q+1}^x + [(\alpha_x^{xx} + \alpha_y^{xx}) + k^2(p,q)] E_{p,q}^x \quad (3.4.11)$$

其中

$$\alpha_w^{xx} = \frac{2}{w(e+w)} \frac{2\varepsilon_r(p-1,q)}{\varepsilon_r(p,q) + \varepsilon_r(p-1,q)} \quad (3.4.12)$$

$$\alpha_e^{xx} = \frac{2}{e(e+w)} \frac{2\varepsilon_r(p+1,q)}{\varepsilon_r(p,q) + \varepsilon_r(p+1,q)} \quad (3.4.13)$$

$$\alpha_n^{xx} = \frac{2}{n(n+s)} \quad (3.4.14)$$

$$\alpha_s^{xx} = \frac{2}{s(n+s)} \quad (3.4.15)$$

$$\alpha_x^{xx} = -\frac{4}{ew} + \alpha_e^{xx} + \alpha_w^{xx} \quad (3.4.16)$$

$$\alpha_y^{xx} = -\frac{2}{ns} = -\alpha_n^{xx} - \alpha_s^{xx} \quad (3.4.17)$$

運用同樣的方法，我們可以得到(3.3.7)式的有限差分式為

$$P_{yy} E_y = \alpha_w^{yy} E_{p-1,q}^y + \alpha_e^{yy} E_{p+1,q}^y + \alpha_n^{yy} E_{p,q-1}^y + \alpha_s^{yy} E_{p,q+1}^y + [(\alpha_x^{yy} + \alpha_y^{yy}) + k^2(p,q)] E_{p,q}^y = 0 \quad (3.4.18)$$

其中

$$\alpha_w^{yy} = \frac{2}{w(e+w)} \quad (3.4.19)$$

$$\alpha_e^{yy} = \frac{2}{e(e+w)} \quad (3.4.20)$$

$$\alpha_n^{yy} = \frac{2}{n(n+s)} \frac{2\varepsilon_r(p,q-1)}{\varepsilon_r(p,q) + \varepsilon_r(p,q-1)} \quad (3.4.21)$$

$$\alpha_s^{yy} = \frac{2}{s(n+s)} \frac{2\varepsilon_r(p, q+1)}{\varepsilon_r(p, q) + \varepsilon_r(p, q+1)} \quad (3.4.22)$$

$$\alpha_x^{yy} = -\frac{2}{ew} = -\alpha_e^{yy} - \alpha_w^{yy} \quad (3.4.23)$$

$$\alpha_y^{yy} = -\frac{4}{ns} + \alpha_n^{yy} + \alpha_s^{yy} \quad (3.4.24)$$

至於(3.3.8)、(3.3.9)與(3.3.17)式的有限差分式則在附錄 B 中會有詳細的導證，所以在這裡就不仔細地說明了。

### 3.5 邊界條件

在實際的模擬環境中，由於記憶體空間與計算機效能的限制，在積分光學的設計中我們只能對有限的空間作分析，所以就會遇到分析區的邊界條件如何處理的問題。而我們在這裡討論了三種的邊界條件，分別是 Dirichlet 法、Neumann 法、解析法 (Analytical)，茲將分述如下：

**DIRICHLET CONDITION** 對於在分析區外的波函數我們都令為零，也就是：

$$\phi = 0 \quad (3.5.1)$$

**NEUMANN CONDITION** 在分析區域邊界上的波函數的正微分 (normal derivative) 都令為零。也就是：

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \quad (3.5.2)$$

**ANALYTICAL CONDITION** 我們假設波函數在分析區域外會成指數函數遞減，其指數常數如下：

$$\exp\left(-k_0 \sqrt{|n_{eff}^2 - \varepsilon_r(p,q)|}\right) \quad (3.5.3)$$

其中  $k_0$ ， $n_{eff}$ ， $\varepsilon_r(p,q)$  分別代表真空中的波數、等效折射率、相對折射率。

上述的邊界條件中，(3.5.1)式是最容易使用的，然而其先決條件是分析區須夠大，以使得波函數在邊界上已經小到一定的程度，通常要小於最大值的  $10^{-5}$ ，也因此它的缺點是需要消耗較大的記憶體空間。相法的，(3.5.3)式程式寫起來複雜了許多，但是它的分析區可以小很多，因此可以節省不少記憶體空間，當然效率也會跟著提升，但其缺點是需要使用疊代法來逼近(3.5.3)式中的  $n_{eff}$ 。

至於更複雜的邊界條件處理的方法，可以在 Vassallo 的論文[3-9]中找到，由於這不是我們的重點，所以就不詳加討論了。

### 3.6 程式化

有了前面的結果後，接下來就是寫程式的工作了。我們首要的工作就是要把(3.3.14-15)式變成可以程式化的形式，我們將拿(3.3.14)作為例子，將(3.4.11)的結果帶入後我們可以得到

$$\alpha_w^{xx} E_{p-1,q}^x + \alpha_e^{xx} E_{p+1,q}^x + \alpha_n^{xx} E_{p,q-1}^x + \alpha_s^{xx} E_{p,q+1}^x + \left[ (\alpha_x^{xx} + \alpha_y^{xx}) + k^2(p,q) \right] E_{p,q}^x = \beta^2 E_{p,q}^x \quad (3.6.1)$$

其中  $E_{p,q}^x$  代表電場  $E_x$  在相對應的格點  $(p,q)$  上的大小。

在令  $\phi = E_x$  並經過下列的符號代換以後(也就是將  $(p,q)$  空間映射到  $r$  空間)

$$r = (p-1) * M_y + q \quad (3.6.2)$$

其中  $M_y$  為  $y$  軸的總格點數。我們就可以得到下列的式子：

$$a_{r,r-M_y} \phi_{r-M_y} + a_{r,r-1} \phi_{r-1} + a_r \phi_{r,r} + a_{r,r+1} \phi_{r+1} + a_{r,r+M_y} \phi_{r+M_y} = \beta^2 \phi_r \quad (3.6.3)$$

其中

$$\alpha_w^{xx} \leftrightarrow a_{r,r-M_y} \quad (3.3.4)$$

$$\alpha_e^{xx} \leftrightarrow a_{r,r+M_y} \quad (3.6.5)$$

$$\alpha_n^{xx} \leftrightarrow a_{r,r-1} \quad (3.6.6)$$

$$\alpha_s^{xx} \leftrightarrow a_{r,r+1} \quad (3.6.7)$$

$$\alpha_x^{xx} + \alpha_y^{yy} + k^2(p, q) \leftrightarrow a_{r,r} \quad (3.6.8)$$

我們也可以將(3.6.3)式寫成矩陣的形式

$$[\mathbf{A}]\{\Phi\} = \beta^2 \{\Phi\} \quad (3.6.9)$$

其中矩陣  $\mathbf{A}$  的每一行都有 5 個非零的元素(非處在邊界的情況下)，而整個矩陣的形式就如圖 3.4 所示。經由這樣的形式，我們很容易地可以看出這就解本徵值的問題，我們要求的傳播常數  $\beta = k_0 n_{eff}$  就是本徵值的平方根，而電磁場的分佈矩陣  $E_{p,q}^x$  則為本徵向量。

值得一提的是，利用有限差分法要解全向量波方程式所需的記憶體是半向量波方程式的四倍[3-8]，所以除非有必要，否則通常使用半向量有限差分法就夠了，而使用純量波方程式會產生對稱矩陣，因此可以比較快速的解出來。

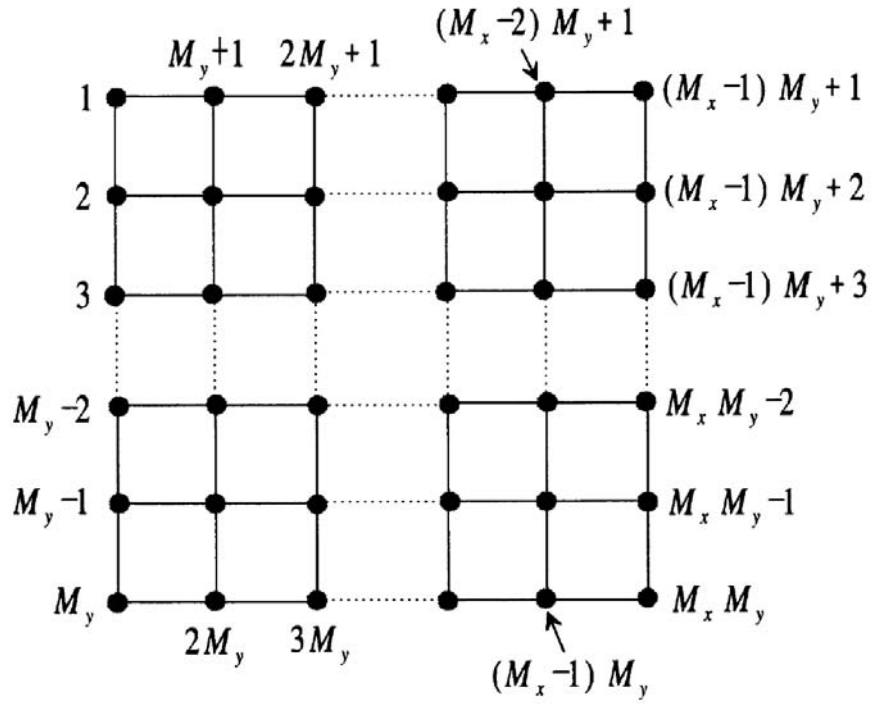


圖 3.3 有限差分法的格點示意圖

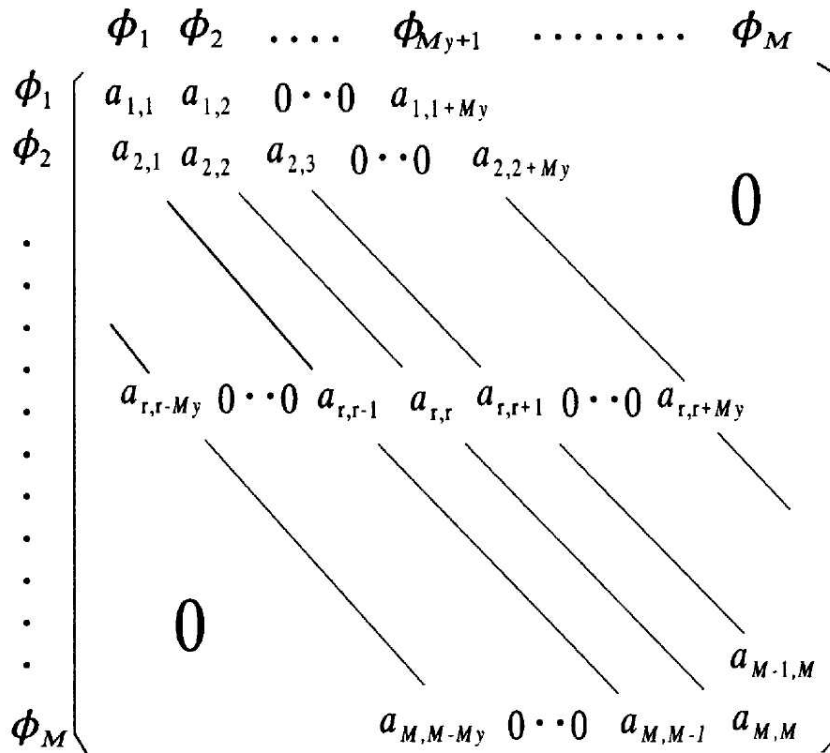


圖 3.4 矩陣 A 元素示意圖

### 3.7 本徵值的解法

有限差分法的最大缺點就是要去處理龐大矩陣的本徵值問題。對一個普通的截面結構而言，如果我們將其分割成 $100 \times 100$ 個點，這樣一來就需要解矩陣維度為 $10000 \times 10000$ 的本徵值，單是儲存這個矩陣就需佔掉 $10000 \times 10000 \times 8 \text{Byte} = 800 \text{MB}$ 的記憶體空間，所以已經超出了普通PC所能處理的範圍了。

還好現在稀疏矩陣的演算法功能強大，所以我們如果利用稀疏矩陣來處理這些問題的話，不僅只是降低記憶體的需求更可以縮短冗長的計算時間，再加上我們只需要有限個的本徵值(大於零)，所以計算速度可以相當的快。目前我們使用Matlab的內建的數學函數庫中的副程式eigs()來求出我們所要的有效折射率與場形分佈。

### 3.8 數值模擬結果

在這個小節裡，我們將拿文獻中所舉的實際例子[3-9]來驗證我們的程式。考慮一個圓柱對稱的波導其相對折射率分佈如下

$$n^2(r) = n_p^2 \left( 1 - 2\Delta \left( \frac{r}{r_0} \right)^2 \right) \quad (3.8.1)$$

其中 $n_p = 3.0$ ， $\Delta = 0.01$ 和 $r_0 = 1.0 \mu\text{m}$ 。在波長為 $1.55 \mu\text{m}$ 的前提下，其理論上[3-10]的基本模態的有效折射率 $n_{\text{eff}} = 2.9649075$ 。

而我們的模擬與文獻中一樣，是採用格點數  $M_x = M_y = 100$ ，而分析區為  $-4.5\mu m \leq x \leq 4.5\mu m$  與  $-4.5\mu m \leq y \leq 4.5\mu m$ ，並且採用 Dirichlet 的邊界條件下，而我們所得到的結果  $n_{eff} = 2.96493$  與理論相當吻合，而其場形分佈就如圖 3.5 所示。

為了探討誤差的來源，我們特別做出了有效折射率的誤差與格子點數的關係如圖 3.6 所示。我們可以清楚的看到誤差會隨著格子點數的增加(也就是格子點間距的縮小)而變小。

### 3.9 小結

在這一章中，我們導出了三種不同近似條件的波方程式，並且推導出它們的有限差分式，之後我們還實際的寫了程式來印證。我們還拿了實際的例子來計算，其結果與理論相當吻合，最後我們還討論誤差的來源。

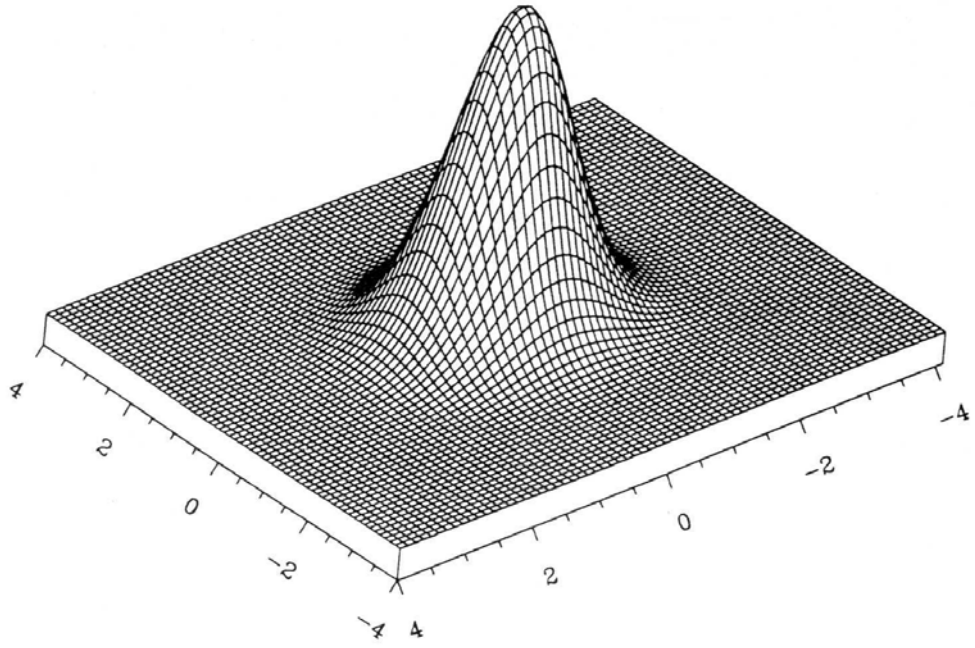


圖 3.5a 基本模態的場形分佈(引用[3-10])

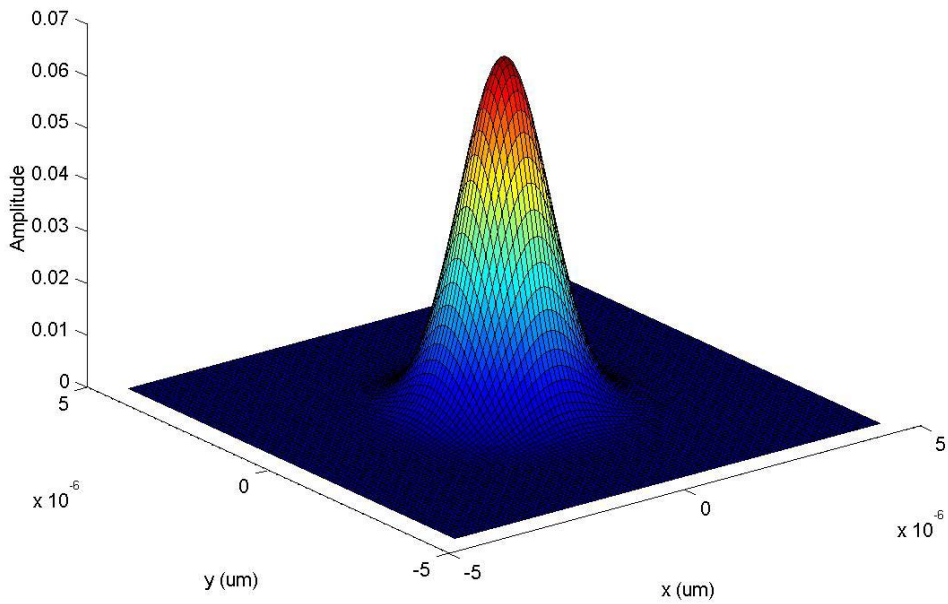


圖 3.5b 基本模態的場形分佈(我們的結果)



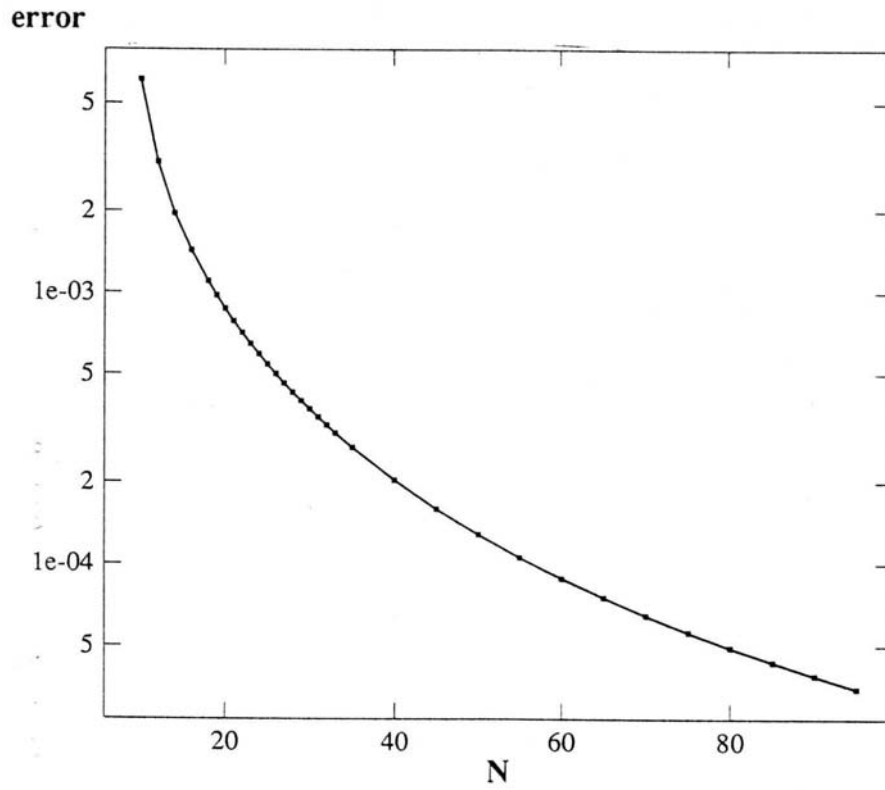


圖 3.6a  $n_{eff}$  的誤差對格點數  $N$  之關係圖(引用[3-10])

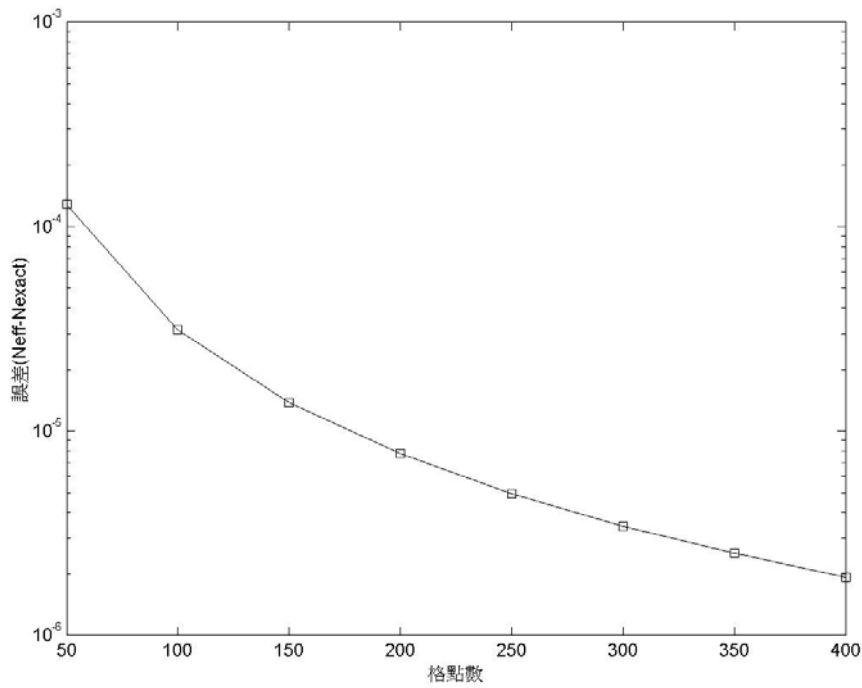


圖 3.6b  $n_{eff}$  的誤差對格點數  $N$  之關係圖(我們的結果)

## 參考文獻

- [3-1] R. Scarmozzino, A. Gopinath, R. Pregla and S. Helfert, “ Numerical techniques for modeling guided-wave photonic devices,” IEEE J. of Sel. Top. In Q. Electr., Vol.6, No.1, pp.150-162, 2000.
- [3-2] T.M. Benson, P. Sewell, P.C. Kendall and S. Sujecki, “Finite difference methods in optoelectronic simulation,” Inter. conf. On transparent optical networks, pp.47-48, 1999.
- [3-3] C. Vassallo, “1993-1995 optical mode solvers,” Opt. Quantum Electron., Vol.29, pp.95-114, 1997.
- [3-4] K.S. Chiang, “Review of numerical and approximate method for the modal analysis of general optical dielectric waveguides,” Opt. Quantum Electron., Vol.26, pp.113-134, 1994.
- [3-5] M.J. Robertson, S. Ritchie and P. Dayan, “Semiconductor waveguides: analysis of optical propagation in single rib structure and directional couplers,” IEE Proc. J., vol.132, pp.336-342, 1985.
- [3-6] M. Stern, “Semivectorial polarized finite difference methods optical waveguides with arbitrary index profiles,” IEE Proc. J., vol. 135, pp.56-63, 1988.
- [3-7] M. Stern, “Semivectorial polarized H field solutions for dielectric waveguides with arbitrary index profiles,” IEE Proc. J., vol. 135, pp.333-338, 1988.
- [3-8] C.L. Xu, W.P. Huang, M.S. Stern and S.K. Chaudhuri, “Full-vectorial mode calculations by finite difference method,” IEE Proc. J., vol. 141, pp.281-286, 1994.
- [3-9] C. Vassallo and J. Michiel, “Comparison of a few transparent boundary conditions for finite-difference optical mode-solvers,” J. Lightwave Technol., vol.15, pp.397-402, 1997.
- [3-10] D.R. Heatley, G. Vitrant and A. Kevorkian, “Simple finite-difference algorithm for calculating waveguide modes,” Opt. Quantum Electron., vol.26, pp.151-163, 1994.
- [3-11] A.W. Snyder and J.D. Love, Optical waveguide theory, Chapman and Hall, London, 1983.

## 第四章 光束傳播法

在第三章所提出的有 FDM 只能處理在傳波方向結構沒有變化的問題，像是電磁波在光纖中的傳播情形，但是這樣的方法在實際的設計上並不實用。尤其在光波導的設計中我們常常會遇到的是彎曲、分光器、光耦合器 等等的非均勻結構。所以我們在這裡將引入 FD-BPM 來突破這個限制。

BPM 最早是由 Feit 與 Fleck 兩位所提出的，當時是為了模擬雷射在大氣層中穿透的情形。不久之後他們將光束傳播法運用在光纖中特徵模式的計算上[4-1]。其後光束傳播法便經過不斷地創新與改良，發展到現在已經有許多的分支了。按照縱向微分的處理方式的不同，可分為三大類：快速傅立葉轉換法[4-1](fast-Fourier transform BPM, FFT-BPM)、有限差分法[4-2](finite-difference BPM, FD-BPM)、有限元素法[4-3](finite-element BPM, FE-BPM)，他們是以縱向微分的處理方式而加以命名區分的。而我們採用的是第二種，也就是 FD-BPM。

在積體光學中，FD-BPM 是目前最常使用的模擬方法之一。其特色在於程式化簡單、使用方便、計算效率高、延伸性大還有它無條件穩定的特色。目前在文獻上我們可以找到許多回顧的論文[4-4]-[4-6]。

## 4.1 FD-BPM 的歷史回顧

有限差分光束傳播法早在 1990 年就被 Chung 和 Dagli [4-2] 提出，由於它的效率與準確性，很快地就取代了當時的 FFT-BPM。然而當時所能處理的還是侷限於二維空間、近軸近似的純量波方程式，所以之後便有許多的新的改良方法被提出。

從 Huang 等人所提出的一系列論文中[4-7]-[4-12]，我們可以看出 FD-BPM 的一個發展方向是由純量波方程式推展到半向量乃至於全向量波方程式，還有從二維空間推展到三維空間。

另一個發展的主軸就是 Hadley 所提出的廣角光束傳播法(WA-BPM) [4-13], [4-14]，它成功地突破了之前的近軸近似的條件，而且還維持一定的效率，然而當時是用於二維半向量波方程式上，因此之後還有許多的延伸，但是限於時間的短促，我們目前的工作是放在重複 Hadley 的工作上。

## 4.2 FD-BPM 的波方程式推導

我們在這一個小節中，我們將會導出 FD-BPM 所用到的各種波方程式。按其簡化的程度可以分為四類討論。

### 4.2.1 廣角全向量波方程式

由第三章的(3.1.11)與(3.1.12)式，我們知道電場的分量  $E_x$  與  $E_y$  必須同時滿足向量波方程式

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\mathbf{e}_r} \frac{\partial \mathbf{e}_r}{\partial x} E_x + \frac{1}{\mathbf{e}_r} \frac{\partial \mathbf{e}_r}{\partial y} E_y \right) + k^2 E_x = 0 \quad (4.2.1)$$

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{1}{\mathbf{e}_r} \frac{\partial \mathbf{e}_r}{\partial y} E_y + \frac{1}{\mathbf{e}_r} \frac{\partial \mathbf{e}_r}{\partial x} E_x \right) + k^2 E_y = 0 \quad (4.2.2)$$

如果我們令

$$E_t(x, y, z) = \Psi_t(x, y, z) e^{-j\mathbf{b}z} \quad (4.2.3)$$

其中  $t$  代表  $x$  或  $y$ 。而  $n_{ref} = \mathbf{b}/k_0$  為經過適當選擇的參考相對折射率，通常可以用覆層(clad)的相對折射率代替。

有了(4.2.3)式的假設後，我們可以得到

$$\frac{\partial^2 E_t}{\partial z^2} = \left( \frac{\partial^2 \Psi_t}{\partial z^2} - 2j\mathbf{b} \frac{\partial \Psi_t}{\partial z} - \mathbf{b}^2 \Psi_t \right) e^{-j\mathbf{b}z} \quad (4.2.4)$$

將(4.2.3-4)式的結果帶入(4.2.1-2)式，並將結果寫成矩陣的形式，我們就得到了廣角全向量波方程式

$$\left( \frac{j}{2\mathbf{b}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial z} \right) \mathbf{?} = \frac{-j}{2\mathbf{b}} \bar{\mathbf{P}} \mathbf{?} \quad (4.2.5)$$

其中

$$\mathbf{?} = \begin{bmatrix} \Psi_x \\ \Psi_y \end{bmatrix} \quad (4.2.6)$$

$$\bar{\mathbf{P}} = \mathbf{P} - \mathbf{b}^2 \mathbf{I} = \begin{bmatrix} P_{xx} - \mathbf{b}^2 & P_{xy} \\ P_{yx} & P_{yy} - \mathbf{b}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{P}_{xx} & \bar{P}_{xy} \\ \bar{P}_{yx} & \bar{P}_{yy} \end{bmatrix} \quad (4.2.7)$$

寫成分量的形式

$$\bar{P}_{xx} \Psi_x = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\mathbf{e}_r} \frac{\partial(\mathbf{e}_r \Psi_x)}{\partial x} \right] + \frac{\partial^2 \Psi_x}{\partial y^2} + k_0^2 (n_r^2 - n_{ref}^2) \Psi_x \quad (4.2.8)$$

$$\bar{P}_{yy} \Psi_y = \frac{\partial^2 \Psi_y}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\mathbf{e}_r} \frac{\partial(\mathbf{e}_r \Psi_y)}{\partial y} \right] + k_0^2 (n_r^2 - n_{ref}^2) \Psi_y \quad (4.2.9)$$

$$\bar{P}_{yx} \Psi_x = \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\mathbf{e}_r} \frac{\partial(\mathbf{e}_r \Psi_x)}{\partial x} \right] - \frac{\partial^2 \Psi_x}{\partial y \partial x} \quad (4.2.10)$$

$$\bar{P}_{xy} \Psi_y = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\mathbf{e}_r} \frac{\partial(\mathbf{e}_r \Psi_y)}{\partial y} \right] - \frac{\partial^2 \Psi_y}{\partial x \partial y} \quad (4.2.11)$$

#### 4.2.2 全向量波方程式

在近軸近似 (paraxial approximation) 的條件下

$$\left| \frac{j}{2\mathbf{b}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right| \ll \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| \quad (4.2.12)$$

我們可以得到 (近軸近似) 全向量波方程式

$$\frac{\partial}{\partial z} \mathbf{P} = \frac{-j}{2\mathbf{b}} \bar{\mathbf{P}} \quad (4.2.13)$$

#### 4.2.3 半向量波方程式

如果我們省略掉了 (4.2.13) 式中  $\Psi_x$  與  $\Psi_y$  的耦合項 ( $\bar{P}_{xy}$  與  $\bar{P}_{yx}$ ) 之後, 我們可以得到兩個獨立的半向量波方程式。

$$\frac{\partial}{\partial z} \Psi_x = \frac{-j}{2\mathbf{b}} \bar{P}_{xx} \Psi_x \quad (4.2.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \Psi_y = \frac{-j}{2b} \bar{P}_{yy} \Psi_y \quad (4.2.15)$$

#### 4.2.4 純量波方程式

最後，如果在這折射率變化很小的情況下，我們可以進一步令  $\partial \epsilon_r / \partial x = 0$  與  $\partial \epsilon_r / \partial y = 0$ ，在這樣的假設下，(4.2.12-13)式可以寫成。

$$\frac{\partial}{\partial z} \Psi_t = \frac{-j}{2b} \bar{P} \Psi_t \quad (4.2.16)$$

其中

$$\bar{P} \Psi_t = \frac{\partial^2 \Psi_t}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi_t}{\partial y^2} + k_0^2 (n_r^2 - n_{ref}^2) \Psi_t \quad (4.2.17)$$

上述的推導是基於緩慢變化包絡面近似法 (slowly varying envelop approximation, SVEA) 的前提下才成立的，如圖 4.1 所示。我們要知道  $\Psi_t$  並不是真正的電場  $E_t$ ，而是電場  $E_t$  的包絡面。

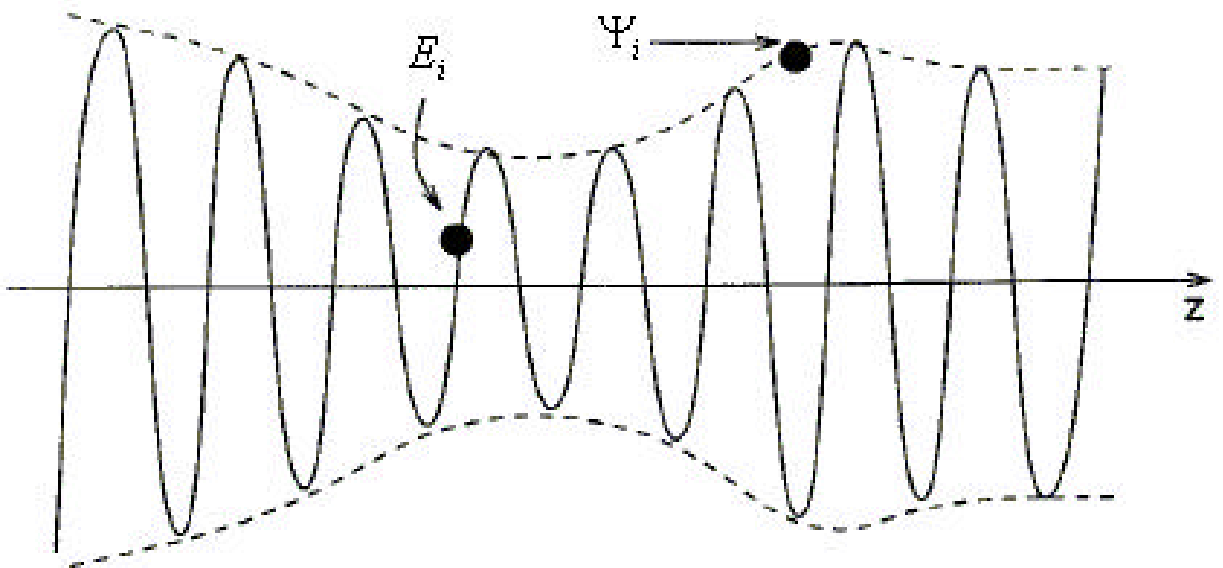


圖 4.1 SVEA 示意圖

### 4.3 FD-BPM 的有限差分式

在這個小節裡我們將只討論近軸近似的 FD-BPM。至於廣角修正的問題將留待到 4.5 小節再討論。

#### 4.3.1 全向量波方程式

由(4.2.13)式，我們可以得到

$$\frac{\partial}{\partial z} \mathbf{E} = \frac{-j}{2b} \bar{\mathbf{P}} \mathbf{E} \quad (4.3.1)$$

接下來我們將使用這樣的表示法

$$\mathbf{E}^k = \mathbf{E}(x, y, k\Delta z) \quad (4.3.2)$$

其中 $\Delta z$ 為 FD-BPM 每一次前進的距離。利用有限差分法，(4.3.1)式可以寫成

$$\frac{1}{\Delta z} (\mathbf{E}^{k+1} - \mathbf{E}^k) = \frac{-j}{2b} \bar{\mathbf{P}} [a\mathbf{E}^{k+1} + (1-a)\mathbf{E}^k] \quad (4.3.3)$$

其中 $0 \leq a \leq 1$ ， $a$ 為權重參數，它的重要性之後會再討論。在移項並整理之後，我們可以得到

$$\left[ \mathbf{I} + \frac{j\Delta z a}{2b} \bar{\mathbf{P}} \right] \mathbf{E}^{k+1} = \left[ \mathbf{I} - \frac{j\Delta z (1-a)}{2b} \bar{\mathbf{P}} \right] \mathbf{E}^k \quad (4.3.4)$$

最後，我們可以將(4.21)式寫成

$$\mathbf{A} \mathbf{E}^{k+1} = \mathbf{B} \mathbf{E}^k \quad (4.3.5)$$

其中



$$\mathbf{A} = \mathbf{I} - \frac{j\Delta z \mathbf{a}}{2\mathbf{b}} \bar{\mathbf{P}} = c1 \begin{bmatrix} \bar{P}_{xx} - \frac{1}{c1} & \bar{P}_{xy} \\ \bar{P}_{yx} & \bar{P}_{yy} - \frac{1}{c1} \end{bmatrix} \quad (4.3.6)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{I} - \frac{j\Delta z \mathbf{a}}{2\mathbf{b}} \bar{\mathbf{P}} = c2 \begin{bmatrix} \bar{P}_{xx} - \frac{1}{c2} & \bar{P}_{xy} \\ \bar{P}_{yx} & \bar{P}_{yy} - \frac{1}{c2} \end{bmatrix} \quad (4.3.7)$$

其中我們令

$$c1 = \frac{j\Delta z \mathbf{a}}{2\mathbf{b}} \quad (4.3.8)$$

$$c2 = \frac{j\Delta z (1-\mathbf{a})}{2\mathbf{b}} \quad (4.3.9)$$

#### 4.4 邊界條件

和 FDM 一樣，FD-BPM 也會遇到有限分析區域的問題，而在這個小節裡我們要介紹的是 Hadley [4-16], [4-17] 所提出的穿透邊界條件 (transparent boundary condition, TBC)，它的主要功能是能夠讓向邊界傳遞的電磁波毫無障礙地穿透出邊界，而不會造成反射。

如圖 4.3 所示，我們假想在左右邊界外有各有一個虛擬的格點  $x_0$ ，

$x_{M+1}$ 。

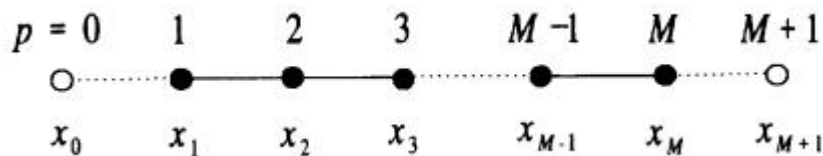


圖 4.2 邊界外的虛擬格點

按照 Hadley 的想法，我們可以想像在左邊界上有一個向左傳遞的波

函數  $f(x, z)$ ，其形式為

$$f_p(x, z) = A(z) \exp(jk_x^- x_p) \quad (4.4.1)$$

所以在格點  $p = 0, 1, 2$  上的波函數  $f_0, f_1, f_2$  就可以寫成

$$f_0 = A(z) \exp(jk_x^- x_0) \quad (4.4.2)$$

$$f_1 = A(z) \exp(jk_x^- x_1) \quad (4.4.3)$$

$$f_2 = A(z) \exp(jk_x^- x_2) \quad (4.4.4)$$

兩兩相除之後，我們可以得到這樣的關係

$$\frac{f_2}{f_1} = \exp(jk_x^- \Delta x) = \frac{f_1}{f_0} \quad (4.4.5)$$

其中  $\Delta x$  為格點的間距。由此可知波數  $k_x^-$

$$k_x^- = \frac{1}{j\Delta x} \ln(f_2/f_1) \quad (4.4.6)$$

最後，我們可以得到在左邊界外  $x_0$  的波函數值為

$$f_0 = f_1 \exp(-jk_x^- \Delta x) = f_1 g_L \quad (4.4.7)$$

其中  $g_L = \frac{f_1}{f_2}$ 。

要特別強調的是，因為波是向左傳遞的，所以波數  $k_x^-$  的實部  $\text{Re}(k_x^-)$  必須為正。如果它為負的表示發生了反射，我們要將其變號。

同理，向右傳遞的波函數  $f(x, z)$ ，其形式為

$$f_p(x, z) = A(z) \exp(-jk_x^+ x_p) \quad (4.4.8)$$

以在格點  $p = M - 1, M, M + 1$  上的波函數  $f_{M-1}, f_M, f_{M+1}$  就可以寫成

$$\mathbf{f}_{M-1} = A(z)\exp(jk_x^+ x_{M-1}) \quad (4.4.9)$$

$$\mathbf{f}_M = A(z)\exp(jk_x^+ x_M) \quad (4.4.10)$$

$$\mathbf{f}_{M+1} = A(z)\exp(jk_x^+ x_{M+1}) \quad (4.4.11)$$

兩兩相除之後，我們可以得到這樣的關係

$$\frac{\mathbf{f}_{M+1}}{\mathbf{f}_M} = \exp(-jk_x^+ \Delta x) = \frac{\mathbf{f}_M}{\mathbf{f}_{M-1}} \quad (4.4.12)$$

其中  $\Delta x$  為格點的間距。由此可知波數  $k_x^+$

$$k_x^+ = \frac{-1}{j\Delta x} \ln(\mathbf{f}_M / \mathbf{f}_{M-1}) \quad (4.4.13)$$

最後，我們可以推得在右邊界外  $x_{M+1}$  的波函數值為

$$\mathbf{f}_{M+1} = \mathbf{f}_M \exp(-jk_x^+ \Delta x) = \mathbf{f}_M \mathbf{g}_R \quad (4.4.14)$$

其中  $\mathbf{g}_R = \frac{\mathbf{f}_M}{\mathbf{f}_{M-1}}$ 。

同樣地，波數  $k_x^+$  的實部  $\text{Re}(k_x^+)$  必須為正。如果它為負的表示發生了反射，我們要將其變號。

雖然以上的討論是在二維結構中的情形，但是它可以毫無困難地運用到三維結構裡。以上所介紹的 TBC 在大部分的情況下都可以適用，而在一些特殊的情況下可能要用到完滿匹配邊界條件(perfectly matched layer boundary condition, PMLBC)[4-18],[4-19]，然而限於篇幅所限，我們就不多介紹了。

#### 4.5 虛數軸傳播法

在這個小節中，我們將介紹虛數軸傳播法(imaginary-distance propagation method, IDPM)[4-20],[4-21]，它可以快速、且精確的找出波導基本模態的有效折射率與場形分佈，而且只需要小幅修改原來的FD-BPM程式，也因此取代了傳統的FDM來計算波導的基本模態的有效折射率與場形分佈。

從(4.2.13)式，我們知道全向量波方程式可以寫成

$$\frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial z^2} = \frac{-j}{2b} \bar{\mathbf{P}} \mathbf{P} \quad (4.5.1)$$

(4.5.1)式的解可以寫成

$$\mathbf{P}(x, y, z) = e^{\frac{-j}{2b} \bar{\mathbf{P}} z} \mathbf{P}(x, y, 0) \quad (4.5.2)$$

既然波導在z軸上是均勻分佈的，所以我們可以將輸入端的電場 $\mathbf{P}(x, y, 0)$ 改寫成各種特徵模態 $\mathbf{P}_m(x, y)$ 的線性疊加

$$\mathbf{P}(x, y, 0) = \sum_{m=0}^{m=\infty} a_m \mathbf{P}_m(x, y) \quad (4.5.3)$$

其中 $\mathbf{P}_m(x, y)$ 會滿足

$$\mathbf{P} \mathbf{P}_m(x, y) = \mathbf{b}_m \mathbf{P}_m(x, y) \quad (4.5.4)$$

其中 $m$ 包括了所有的傳導波與輻射波之特徵模態。而矩陣 $\mathbf{P}$ 則被定義在第三章。另外，矩陣 $\bar{\mathbf{P}}$ 的本徵值 $I_m$ 與本徵向量 $\mathbf{F}_m(x, y)$ 會滿足這樣的關係

$$\bar{\mathbf{P}} \mathbf{F}_m(x, y) = I_m \mathbf{F}_m(x, y) \quad (4.5.5)$$

其中本徵值 $I_m$ 的大小被排序為

$$I_0 > I_1 > \dots > I_m > \dots \quad (4.5.6)$$

而本徵值  $I_m$  與第  $m$  階的傳播常數  $b_m$  之間的關係為

$$I_m = b_m - k_0 n_{ref} \quad (4.5.7)$$

其中  $n_{ref}$  為參考折射率。而且

$$\mathbf{F}_m(x, y) = ?_m(x, y) \quad (4.5.8)$$

接下來，利用  $e^{\frac{-j\bar{P}z}{2b}}$  的泰勒展開式與(4.5.5)式還有(4.5.8)式的關係，(4.5.2)式可以寫成

$$?(x, y, z) = \sum_{m=0}^{m=\infty} a_m e^{\frac{-jI_m z}{2b}} \mathbf{F}_m(x, y) \quad (4.5.9)$$

如果波函數  $?(x, y, z)$  是在虛數軸上傳遞的話，也就是令  $z = jt$ ，則(4.5.9)式會變成

$$?(x, y, jt) = \sum_{m=0}^{m=\infty} a_m e^{\frac{I_m t}{2b}} \mathbf{F}_m(x, y) \quad (4.5.10)$$

如果我們選擇  $n_{ref} = b_0/k_0$ ，使得  $I_0 = 0$  而其它的本徵值  $I_m$  為負數。這樣一來我們會發現這樣的結果

$$\lim_{t \rightarrow \infty} ?(x, y, jt) = a_0 \Phi_0(x, y) \quad (4.5.11)$$

也就是說除了基本模態  $\Phi_0(x, y)$  之外，其它的高階模態都因指數遞減而消失了。也就是說當傳播了夠長的距離之後，其它的高階模態都會消失，只有基本模態  $\Phi_0(x, y)$  仍然會保持其大小。

事實上，我們很難剛好選到  $n_{ref}$  使得  $I_0 = 0$ ，然而令人訝異的是即使在  $n_{ref} \neq b_0/k_0$  的情況下，我們能然可以得到基本模態  $\Phi_0(x, y)$ ，因為基本模態

的遞減(或遞增)速度會小於(或大於)其它的高階模態。所以我們可以算出基本模態的傳播常數為

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{b}(t) = \mathbf{b}_0 \quad (4.5.12)$$

其中  $\mathbf{b}(t)$  的算法可以從文獻 [4-20] 中找到

$$\mathbf{b}(t) = n_0 k + \frac{\ln \left[ \int \Psi(x, y, t + dt) dx dy \right] - \ln \left[ \int \Psi(x, y, t) dx dy \right]}{\Delta t} \quad (4.5.13)$$

#### 4.6 隱含式交替方向法

在這個小節裡，我們將介紹基於隱含式交替方向法(alternating direction implicit method, ADIM) [4-22]-[4-25]的 FDBPM。這個方法可以很有效率的解決多維度的偏微分方程式。在文獻上 Yamauchi [4-22] 等人最先將此方法運用在三維的 SCBPM，不久之後就被延伸到 SVBPM 的運用了 [4-23]。然而兩個偏極化電場之間的耦合項使得 ADIM 難以直接運用在 FVBPM，這個問題直到 1999 年才被解決 [4-25]。我們將參考 Hsueh 等人的作法 [4-25]，說明這個方法的原理。

由 (4.13) 式

$$\frac{\partial}{\partial z} \mathbf{P} = \frac{-j}{2\mathbf{b}} \mathbf{P} = \frac{-j}{2\mathbf{b}} \begin{bmatrix} \bar{P}_{xx} & \bar{P}_{xy} \\ \bar{P}_{yx} & \bar{P}_{yy} \end{bmatrix} \mathbf{P} \equiv \begin{bmatrix} A_x + A_y & C \\ D & B_x + B_y \end{bmatrix} \mathbf{P} \quad (4.6.1)$$

其中

$$A_x \Psi_x = \frac{-1}{2\mathbf{b}} \left( \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\mathbf{e}_r} \frac{\partial(\mathbf{e}_r \Psi_x)}{\partial x} \right] + \frac{1}{2} k_0^2 (n_r^2 - n_{ref}^2) \Psi_x \right) \quad (4.6.2)$$

$$A_y \Psi_x = \frac{-1}{2\mathbf{b}} \left( \frac{\partial^2 \Psi_x}{\partial y^2} + \frac{1}{2} k_0^2 (n_r^2 - n_{ref}^2) \Psi_x \right) \quad (4.6.3)$$

$$B_x \Psi_y = \frac{-1}{2\mathbf{b}} \left( \frac{\partial^2 \Psi_y}{\partial x^2} + \frac{1}{2} k_0^2 (n_r^2 - n_{ref}^2) \Psi_y \right) \quad (4.6.4)$$

$$B_y \Psi_y = \frac{-1}{2\mathbf{b}} \left( \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\mathbf{e}_r} \frac{\partial(\mathbf{e}_r \Psi_y)}{\partial y} \right] + \frac{1}{2} k_0^2 (n_r^2 - n_{ref}^2) \Psi_y \right) \quad (4.6.5)$$

$$C \Psi_y = \frac{-1}{2\mathbf{b}} P_{xy} \Psi_y = \frac{-1}{2\mathbf{b}} \left( \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\mathbf{e}_r} \frac{\partial(\mathbf{e}_r \Psi_y)}{\partial y} \right] - \frac{\partial^2 \Psi_y}{\partial x \partial y} \right) \quad (4.6.6)$$

$$D \Psi_x = \frac{-1}{2\mathbf{b}} P_{yx} \Psi_x = \frac{-1}{2\mathbf{b}} \left( \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\mathbf{e}_r} \frac{\partial(\mathbf{e}_r \Psi_x)}{\partial x} \right] - \frac{\partial^2 \Psi_x}{\partial y \partial x} \right) \quad (4.6.7)$$

我們可以將(4.6.1)改寫成

$$\frac{\partial}{\partial z} ? = \left( \begin{bmatrix} A_x & C \\ 0 & B_x \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} A_y & 0 \\ D & B_y \end{bmatrix} \right) ? = (\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2) ? \quad (4.6.8)$$

其中

$$M_1 = \begin{bmatrix} A_x & C \\ 0 & B_x \end{bmatrix} \quad (4.6.9)$$

$$M_2 = \begin{bmatrix} A_y & 0 \\ D & B_y \end{bmatrix} \quad (4.6.10)$$

利用 Crank-Nicholson 的作法，我們可以得到(4.6.8)式的有限差分式

$$\frac{1}{\Delta z} (?^{k+1} - ?^k) = (\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2) \cdot \frac{1}{2} (?^{k+1} + ?^k) \quad (4.6.11)$$

移項整理之後，可得

$$\left[1 - \frac{\Delta z}{2}(\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2)\right] \psi^{k+1} = \left[1 + \frac{\Delta z}{2}(\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2)\right] \psi^k \quad (4.6.12)$$

為了使用 ADIM，我們加入一個二階誤差項

$$\begin{aligned} \left[1 - \frac{\Delta z}{2}(\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2) + \left(\frac{\Delta z}{2}\right)^2 \mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2\right] \psi^{k+1} \\ = \left[1 + \frac{\Delta z}{2}(\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2) + \left(\frac{\Delta z}{2}\right)^2 \mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2\right] \psi^k \end{aligned} \quad (4.6.13)$$

因式分解之後，我們可以得到

$$\left(1 - \frac{\Delta z}{2} \mathbf{M}_1\right) \left(1 - \frac{\Delta z}{2} \mathbf{M}_2\right) \psi^{k+1} = \left(1 + \frac{\Delta z}{2} \mathbf{M}_1\right) \left(1 + \frac{\Delta z}{2} \mathbf{M}_2\right) \psi^k \quad (4.6.14)$$

最後我們可以將(4.6.14)式改寫成簡潔的形式

$$\psi^{k+1} = \frac{\left(1 + \frac{\Delta z}{2} \mathbf{M}_2\right) \left(1 + \frac{\Delta z}{2} \mathbf{M}_1\right)}{\left(1 - \frac{\Delta z}{2} \mathbf{M}_1\right) \left(1 - \frac{\Delta z}{2} \mathbf{M}_2\right)} \psi^k = \frac{\mathbf{G}_{2+} \mathbf{G}_{1+}}{\mathbf{G}_{1-} \mathbf{G}_{2-}} \psi^k = \mathbf{G}_{1-}^{-1} \mathbf{G}_{2+} \mathbf{G}_{2-}^{-1} \mathbf{G}_{1+} \psi^k \quad (4.6.15)$$

其中

$$\mathbf{G}_{1\pm} = \left(1 \pm \frac{\Delta z}{2} \mathbf{M}_1\right) = \left(1 \pm \frac{\Delta z}{2} \begin{bmatrix} A_x & C \\ 0 & B_x \end{bmatrix}\right) \quad (4.6.16)$$

$$\mathbf{G}_{2\pm} = \left(1 \pm \frac{\Delta z}{2} \mathbf{M}_2\right) = \left(1 \pm \frac{\Delta z}{2} \begin{bmatrix} A_y & 0 \\ D & B_y \end{bmatrix}\right) \quad (4.6.17)$$

像(4.6.15)式的形式是非常有效率的，只要我們依序地將矩陣 $\mathbf{G}_{i\pm}$ 作用在 $\psi^k$ ，如(4.6.18)式所示，我們就可以得到下一個 $\psi^{k+1}$ 波函數。

$$\mathbf{G}_{1-}^{-1} \mathbf{G}_{2+} \mathbf{G}_{2-}^{-1} \mathbf{G}_{1+} \psi^k = \mathbf{G}_{1-}^{-1} \mathbf{G}_{2+} \mathbf{G}_{2-}^{-1} \psi^{k+1/4} = \mathbf{G}_{1-}^{-1} \mathbf{G}_{2+} \psi^{k+2/4} = \mathbf{G}_{1-}^{-1} \psi^{k+3/4} = \psi^{k+1} \quad (4.6.18)$$

而且這裡的反矩陣的計算是相當有效率的，我們現在就來說明一下。

假設我們要件 $\mathbf{G}_{2-}$ 的反矩陣運算



$$\begin{bmatrix} \Psi_x \\ \Psi_y \end{bmatrix}^{k+2/4} = \mathbf{G}_{2-}^{-1} \begin{bmatrix} \Psi_x \\ \Psi_y \end{bmatrix}^{k+1/4} \quad (4.6.19)$$

(4.6.19)式可以改寫成

$$\mathbf{G}_{2-} \begin{bmatrix} \Psi_x \\ \Psi_y \end{bmatrix}^{k+2/4} = \left( 1 - \frac{\Delta z}{2} \begin{bmatrix} A_y & 0 \\ D & B_y \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \Psi_x \\ \Psi_y \end{bmatrix}^{k+2/4} = \begin{bmatrix} \Psi_x \\ \Psi_y \end{bmatrix}^{k+1/4} \quad (4.6.20)$$

(4.6.20)式可以拆成兩個式子

$$(1 - \Delta z A_y / 2) \Psi_x^{k+2/4} = \Psi_x^{k+1/4} \quad (4.6.21)$$

$$(1 - \Delta z D / 2) \Psi_x^{k+2/4} + (1 - \Delta z A_y / 2) \Psi_y^{k+2/4} = \Psi_y^{k+1/4} \quad (4.6.22)$$

要注意的是我們一定要先解(4.6.21)式，以求出 $\Psi_x^{k+2/4}$ 再帶入(4.6.22)式來求出 $\Psi_y^{k+2/4}$ ，這樣一來所有的矩陣皆為三對角矩陣(tridiagonal)，所以我們就可以利用非常快速的 Thomas 法來解矩陣方程式[4-26]。

由於以上的推導是基於 CN 與 ADIM 的作法，所以我們可以知道它的誤差項是 $O((\Delta z)^2)$ 。另外，(4.6.15)式可以經由理論證明是無條件穩定的[4-26]。

## 4.7 廣角光束傳播法

截至目前為止，我們的討論都是在侷限於 Fresnel 方程式(近軸波方程式)的情形下，現在我們將討論基於 Pade 近似子(Pade approximant)的廣角光束傳播法(wide-angle beam propagation method, WA-BPM)[4-27]，並利用多重步驟法(multistep method)[4-28]來改善 WA-BPM 的

執行效率，而這兩個方法都是由 Hadley 提出的。

#### 4.7.1 Pade 近似子

從 4.2 小節的(4.5)式

$$\left( \frac{j}{2\mathbf{b}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial z} \right) ? = \frac{-j}{2\mathbf{b}} \bar{\mathbf{P}} ? \quad (4.7.1)$$

我們可以將上式改寫成

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( 1 + \frac{j}{2\mathbf{b}} \frac{\partial}{\partial z} \right) ? = \frac{-j}{2\mathbf{b}} \bar{\mathbf{P}} ? \quad (4.7.2)$$

移項之後我們可以得到

$$\frac{\partial ?}{\partial z} = \frac{-j\bar{\mathbf{P}}/2\mathbf{b}}{1 + (j\bar{\mathbf{P}}/2\mathbf{b})(\partial/\partial z)} ? \quad (4.7.3)$$

上式可以改寫成遞迴的形式 [4-27]

$$\frac{\partial}{\partial z} \Big|_n = \frac{-j\bar{\mathbf{P}}/2\mathbf{b}}{1 + (j/2\mathbf{b})(\partial/\partial z)_{n-1}} ? \quad (4.7.4)$$

在令  $(\partial/\partial z)_{-1} = 0$  之後，並利用上式的遞迴公式，我們可以得到

$$\frac{\partial ?}{\partial z} = -j \frac{\mathbf{N}_n}{\mathbf{D}_d} ? \quad (4.7.5)$$

其中  $\mathbf{N}$  與  $\mathbf{B}$  皆為  $\mathbf{P}$  的多項式，其階數分別為  $n$  與  $d$  我們會在附錄 C 中詳細導出。

事實上(4.7.1)式的標準解法為

$$\frac{\partial ?}{\partial z} = j \left( \sqrt{\mathbf{P} + \mathbf{b}^2} - \mathbf{b} \right) ? \quad (4.7.6)$$

然而這樣的形式是無法直接處理的，所以 Hadley 提出了使用階數為  $(n, d)$

的 Pade 近似子來處理(4.7.6)式中根號項的問題。而其結果就如同我們在(4.7.5)式中所得的一樣。

最後我們將來處理(4.7.5)式的有限差分式的問題。首先我們可以直接使用有限差分式就如同 4.3 小節的作法一樣

$$\frac{1}{\Delta z}(\varphi^{k+1} - \varphi^k) = -j \frac{N}{D} (a\varphi^{k+1} + (1+a)\varphi^k) = -j \frac{N}{D} \frac{1}{2} (\varphi^{k+1} + \varphi^k) \quad (4.7.7)$$

其中我們已經令  $a = 0.5$  了。移項之後，可以整理成

$$\left( D + j \frac{\Delta z}{2} N \right) \varphi^{k+1} = \left( D - j \frac{\Delta z}{2} N \right) \varphi^k \quad (4.7.8)$$

上式也可以改寫成

$$\varphi^{k+1} = \frac{\left( D - j \frac{\Delta z}{2} N \right)}{\left( D + j \frac{\Delta z}{2} N \right)} \varphi^k = \frac{\left( D - j \frac{\Delta z}{2} N \right)}{\left( D - j \frac{\Delta z}{2} N \right)^*} \varphi^k = \frac{\sum_{i=0}^n x_i P^i}{\sum_{i=0}^n x_i^* P^i} \varphi^k \quad (4.7.9)$$

其中係數  $x_i$  將一併在附錄 C 中導出。有了上面的式子之後， $\varphi^{k+1}$  就可以被求出來。

#### 4.7.2 多重步驟法

由於(4.7.9)式包含  $P$  的高階項，所以矩陣方程式的計算將變的很複雜，不能用很有效率的 Thomas 法來解，所以我們將引進 Hadley[2]所提出多重步驟法(multistep method)來克服這個問題。

首先，我們要將(4.7.9)式改寫。Hadley 發現到在(4.7.9)式中， $x_0 = 1$  對任何階數  $(n, d)$  都恆成立，也因此我們可以將(4.7.9)式中等式右邊的分

子作多項式分解

$$\sum_{i=0}^n x_i \mathbf{P}^i = (1 + a_n \mathbf{P}) \cdots (1 + a_2 \mathbf{P})(1 + a_1 \mathbf{P}) \quad (4.7.10)$$

其中係數  $a_1, a_2, \dots, a_n$  為

$$a_j = -1/r_j, j = 1, 2, \dots, n \quad (4.7.11)$$

其中  $r_j$  為下面代數方程式的根

$$\sum_{i=0}^n x_i \mathbf{P}^i = \sum_{i=0}^n x_i r_j^i = 0 \quad (4.7.12)$$

同樣地，(4.7.9) 式中等式左邊的分母也可以寫成

$$\sum_{i=0}^n x_i^* \mathbf{P}^i = \sum_{i=0}^n (1 + a_i \mathbf{P})^* = \sum_{i=0}^n (1 + a_i^* \mathbf{P}) = (1 + a_n^* \mathbf{P}) \cdots (1 + a_2^* \mathbf{P})(1 + a_1^* \mathbf{P}) \quad (4.7.13)$$

這樣一來(4.7.9)式就可以寫成

$$?^{k+1} = \frac{(1 + a_n \mathbf{P}) \cdots (1 + a_2 \mathbf{P})(1 + a_1 \mathbf{P})}{(1 + a_n^* \mathbf{P}) \cdots (1 + a_2^* \mathbf{P})(1 + a_1^* \mathbf{P})} ?^k \quad (4.7.14)$$

接下來，我們將會討論如何去處理(4.7.14)式子。移項之後，它可

以改寫成

$$\frac{(1 + a_n^* \mathbf{P}) \cdots (1 + a_2^* \mathbf{P})}{(1 + a_n \mathbf{P}) \cdots (1 + a_2 \mathbf{P})} ?^{k+1} = \frac{(1 + a_1 \mathbf{P})}{(1 + a_1^* \mathbf{P})} ?^k \quad (4.7.15)$$

為了討論的方便，我們定義了

$$?^{k+i/n} = \frac{(1 + a_n^* \mathbf{P})(1 + a_{n-1}^* \mathbf{P}) \cdots (1 + a_{i+1}^* \mathbf{P})}{(1 + a_n \mathbf{P})(1 + a_{n-1} \mathbf{P}) \cdots (1 + a_{i+1} \mathbf{P})} ?^{k+1} \quad (4.7.16)$$

如此一來，(4.7.15)式就可以改寫成

$$?^{k+1/n} = \frac{(1 + a_1 \mathbf{P})}{(1 + a_1^* \mathbf{P})} ?^k \quad (4.7.17)$$

既然  $?^k$  為已知，利用(4.7.17)式我們很快的就可以求出  $?^{k+1/n}$ ，再利

用  $?^{k+1/n}$  為已知，(4.7.16)式可以改寫成

$$\frac{(1+a_n^* \mathbf{P}) \cdots (1+a_3^* \mathbf{P})}{(1+a_n \mathbf{P}) \cdots (1+a_3 \mathbf{P})} ?^{k+1} = \frac{(1+a_2 \mathbf{P})}{(1+a_2^* \mathbf{P})} ?^{k+1/n} \quad (4.7.18)$$

同樣地，利用(4.7.16)式的表示法，我們可以將上式改寫成

$$?^{k+1/2} = \frac{(1+a_2 \mathbf{P})}{(1+a_2^* \mathbf{P})} ?^{k+1/n} \quad (4.7.19)$$

既然我們已經知道了 $?^{k+1/n}$ ，所以我們可以利用(4.7.19)式求出

$?^{k+2/n}$ 。重複(4.7.18-19)式，我們最後可以得到在 $z + \Delta z$ 的波函數 $?^{k+1}$

$$?^{k+1} = \frac{(1+a_n \mathbf{P})}{(1+a_n^* \mathbf{P})} ?^{k+(n-1)/n} \quad (4.7.20)$$

歸納了以上的推導，我們可以做出這樣的結論。未知的波函數 $?^{k+1}$ 可

以藉由連續的解下面的式子所得到

$$?^{k+i/n} = \frac{(1+a_i \mathbf{P})}{(1+a_i^* \mathbf{P})} ?^{k+(i-1)/n} \quad (4.7.21)$$

其中 $i = 1, 2, \dots, n$ 。

利用多重步驟法，我們每一步所要處理的矩陣方程式的複雜性都如同4.3小節所討論的一樣，因此可以很快速的運算，尤其在二維結構中，我們可以得到三對角矩陣方程式。

### 4.7.3 小結

Hadley的工作成功地突破了近軸近似的限制，使我們就能夠處理光軸與 $z$ 軸夾角到90度的問題，因此被廣泛的運用。

## 4.8 模擬結果

在這小節裡，我們將測試許多我們寫出來的程式，並試著作一些誤差的分析。

#### 4.8.1 三層平板結構

我們首先測試的是 BPM2D 程式，並為了分析誤差的來源，我們找了一個有解析解的例子來模擬，就是 2.1 小節所介紹的對稱三層平板結構，並為了比對結果，我們的參數是從論文中的例子[1]拿出來的，如圖 4.3 所示。其中  $n_{core}^2 = 11.088$ 、 $n_{clad}^2 = 11.044$ 、 $l = 1.55\text{mm}$ 、 $D = 2\text{mm}$ ，而其 TE 模式的理論  $n_{eff,exact} = \underline{3.32578847351789}$ ，我們的結果與論文完全符合。

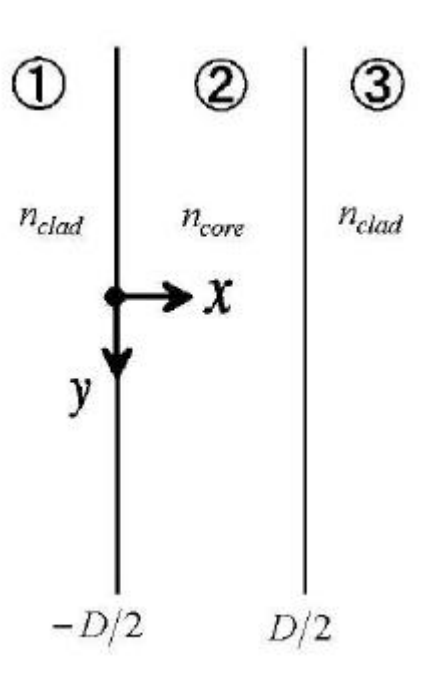


圖 4.3 對稱三層平板結構

接下來，利用 4.5 小節所介紹的 IDPM，我們可以得到  $n_{eff} = \underline{3.32579}$ ，

也就是誤差為  $\Delta n = 2.68 \times 10^{-6}$ 。其中我們所使用的模擬參數為  $n_{ref} = n_{clad}$ 、 $dz = j1/2$ 、 $N_{core} = 200$ ， $N_{total} = 2000$ ，也就是說，分析區域大小  $W = 10\text{mm}$ 、間格距離  $dx = D/N_{core} = 10\text{nm}$ ，並且使用 4.4 小節所介紹的 TBC 條件。至於輸入函數則是採用 Xu 等人[4-20]的作法，其形式為

$$E_{input}(x) = \begin{cases} 1 & , \text{if } abs(x) < D/2 \\ 0 & , \text{else} \end{cases} \quad (4.8.1)$$

也就是令在核心層的波函數  $E_{input} = 1$ ，而在覆層的波函數  $E_{input} = 0$ ，如圖 4.4 所示。

最後我們將每一個疊代過程中所算出的  $n_{eff}$  都記錄下來，並且繪製成圖 4.5，有了這個資料後，我們還作了一張誤差隨距離變化的關係圖，如圖 4.6 所示。此外我們還將波函數的分佈圖(如圖 4.7 所示)一併整理出來。

分析這些資料之後，我們可以從圖 4.5 發現  $n_{eff}$  會逐漸的趨近一個穩定的值，也就是所求的  $n_{ref}$ ，這也印證了 4.4 小節的理論是正確的，而且其誤差也是相當的小。

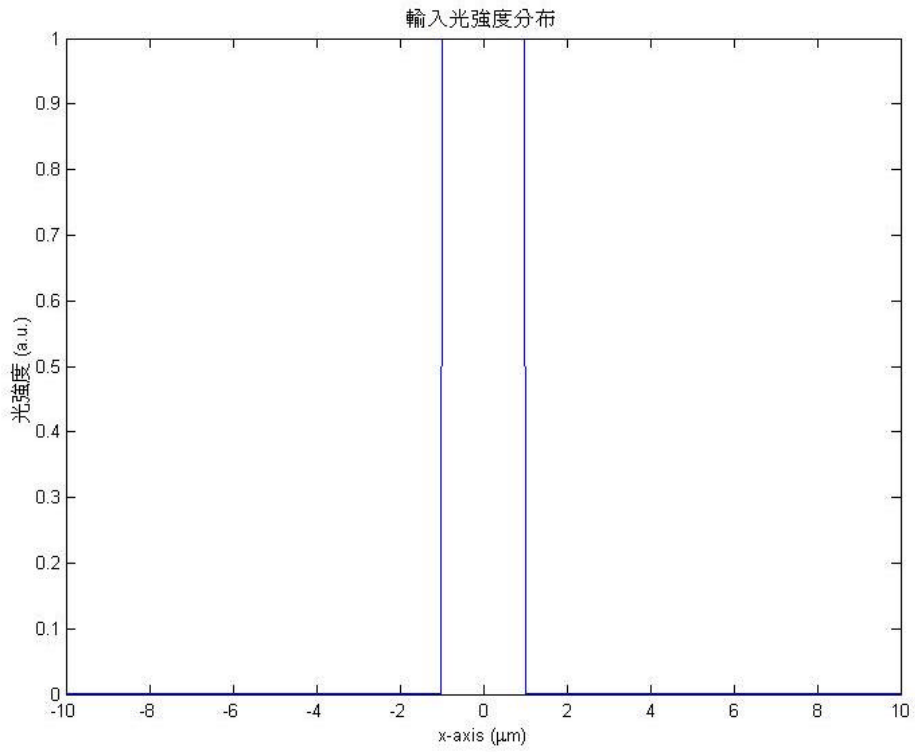


圖 4.4 輸入函數分佈圖

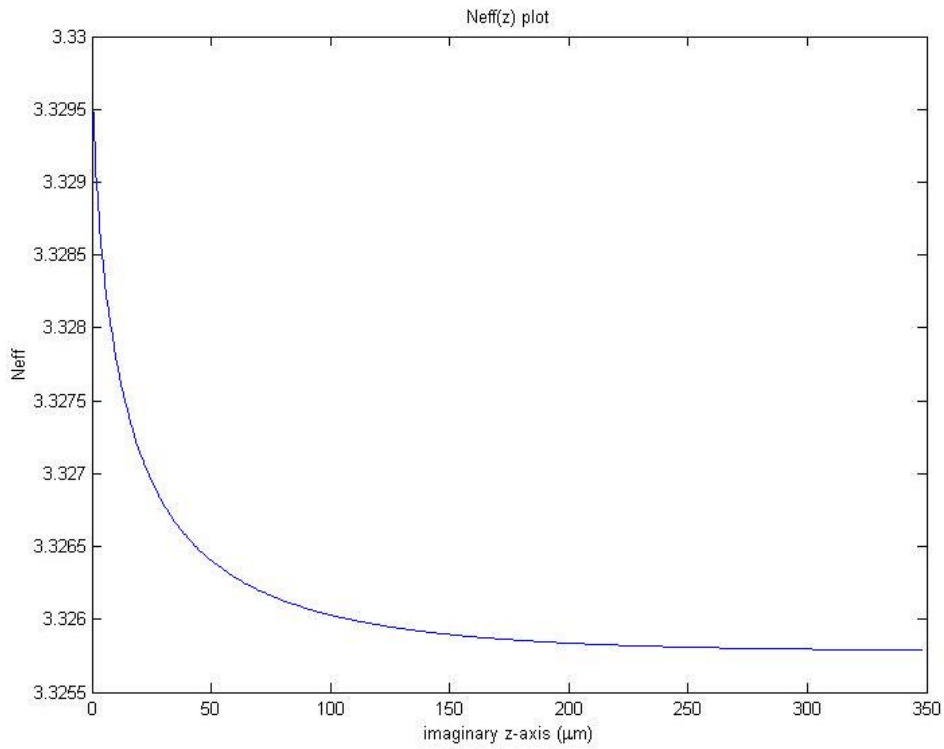


圖 4.5  $n_{eff}(z)$  隨距離變化的關係圖



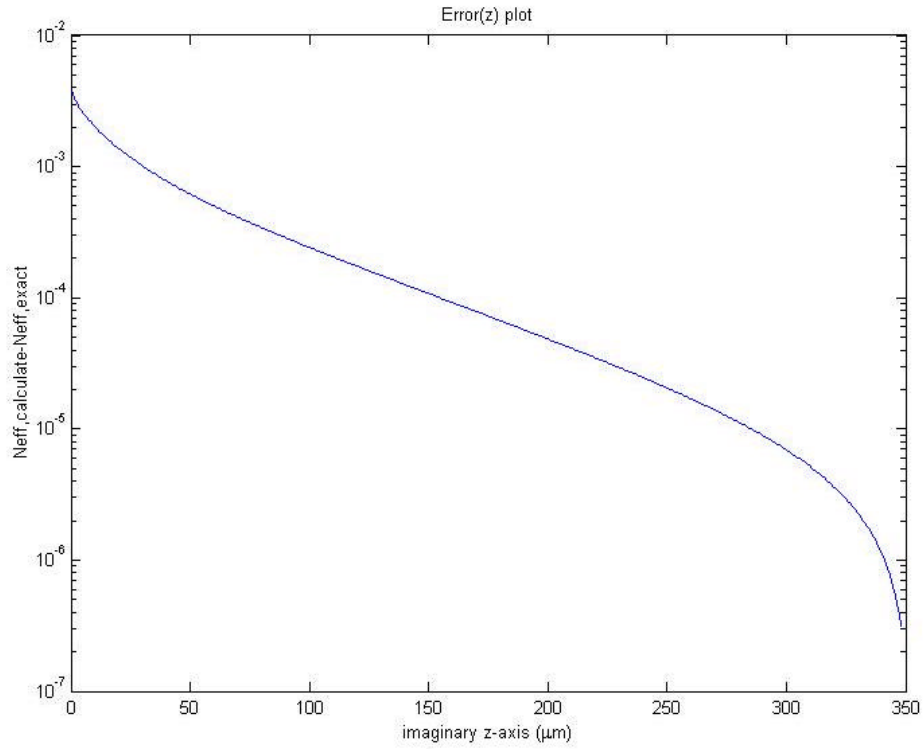


圖 4.6 誤差 ( $n_{eff}(z) - n_{exact}$ ) 隨距離變化的關係圖

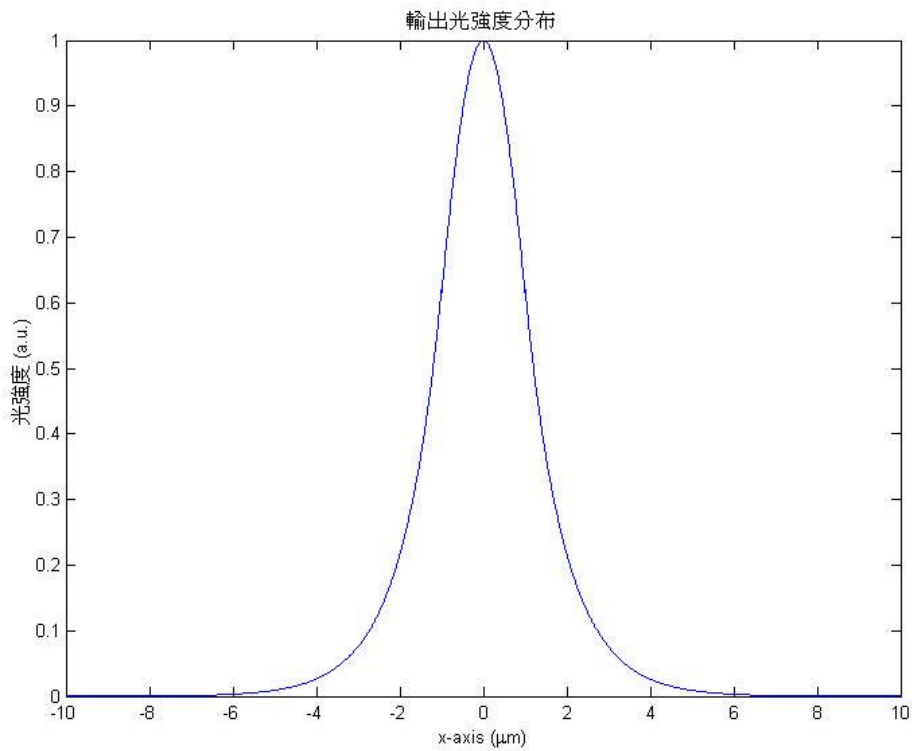


圖 4.7 基本模態的函數分佈圖

## 參考文獻

- [4-1] M.D. Feit and J.A. Fleck, Jr., "Light propagation in grade-index optical fibers," *Appl. Opt.*, vol. 17, pp.3990-3998, 1978.
- [4-2] Y. Chung and N. Dagli, "Assessment of finite difference beam propagation," *IEEE J. Quantum Electron.*, vol.26, pp.1335-1339, 1990.
- [4-3] M. Koshica and Y. Tsuji, "A wide-angle finite element beam propagation method," *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol.8, pp.1208-1210, 1996.
- [4-4] T.M. Benson, P. Sewell, A. Vukovic and D.Z. Djurdjevic, "Advances in finite difference beam propagation method," *Inter. conf. On transparent optical networks*, pp.36-41, 2001.
- [4-5] R. Scarmozzino, A. Gopinath, R. Pregla and S. Helfert, "Numerical techniques for modeling guided-wave photonic devices," *IEEE J. of Sel. Top. In Q. Electron.*, Vol.6, pp.150-162, 2000.
- [4-6] D. Yevick, "A guide to electric field propagation techniques for guided-wave optics," *Opt. Quantum Electron.*, vol.26, pp.185-197, 1994.
- [4-7] W.P. Huang, C.L. Xu, S.T. Chu and S.K. Chaudhuri, "A vector beam propagation method for guided-wave optics," *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol.3, pp.910-913, 1991.
- [4-8] W.P. Huang, C.L. Xu and S.K. Chaudhuri, "A finite-difference vector beam propagation method based on H-fields," *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol.3, pp.1117-1120, 1991.
- [4-9] W.P. Huang, C.L. Xu and S.K. Chaudhuri, "A finite-difference vector beam propagation method for three-dimensional waveguide structures," *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol.4, pp.148-151, 1992.
- [4-10] W.P. Huang, C.L. Xu, S.T. Chu and S.K. Chaudhuri, "The finite-difference vector beam propagation method: analysis and assessment," *J. Lightwave Technol.*, vol.10, pp.295-305, 1992.
- [4-11] W.P. Huang and C.L. Xu, "Simulation of three-dimensional optical waveguides by a full-vector beam propagation method," *IEEE J. of Quantum Electron.*, vol.29, pp.2639-2649, 1993.
- [4-12] C.L. Xu, W.P. Huang, S.K. Chaudhuri and J. Chrostowski, "An unconditionally stable vectorial beam propagation method for 3-D structures," *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol.6, pp.549-551, 1994.
- [4-13] G.R. Hadley, "Wide-angle beam propagation using Padé approximant operators," *Opt. Lett.*, vol. 17, pp. 1426-1428, 1992.

- [4-14] G.R. Hadley, "Multistep Method for wide-angle beam propagation," *Opt. Lett.*, vol. 17, pp. 1743, 1992.
- [4-15] F. Ma, C.L. Xu and W.P. Huang, "Wide-angle full vectorial beam propagation method," *IEE Proc. J.*, vol.143, pp.139-143, 1996.
- [4-16] G.R. Hadley, "Transparent boundary condition for beam propagation method," *Opt. Lett.*, vol. 16, pp. 624-626, 1991.
- [4-17] G.R. Hadley, "Transparent boundary condition for the beam propagation method," *IEEE J. of Quantum Electron.*, vol.28, pp.363-370, 1992.
- [4-18] J.P. Berenger, "A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves," *J. Computational Phys.*, vol.114, pp.185-200, 1994.
- [4-19] W.P. Huang, C.L. Xu, W. Lui and K. Yokoyama, "Perfectly matched layer(PML) boundary condition for the beam propagation method," *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol.8, pp.649-651, 1996.
- [4-20] C.L. Xu, W.P. Huang and S.K. Chaudhuri, "Efficient and accurate vector mode calculations by beam propagation method," *J. of Lightwave Technol.*, vol.11, pp.1209-1215, 1993.
- [4-21] S. Jüngling and J.C. Chen, "A study and Optimization of eigenmode calculations using the imaginary distance beam propagation method," *IEEE J. of Quantum Electron.*, vol.30, pp.2098-2105, 1994.
- [4-22] J. Yamauchi, T. Ando and H. Nakano "Beam-propagation analysis of optical fibers by alternating direction implicit method," *Eletron. Lett.*, vol.27, pp.1663-1665, 1991.
- [4-23] P.L. Liu and B.J. Li "Semivectorial beam-propagation method for analyzing polarized modes of rib waveguides," *IEEE J. of Quantum Electron.*, vol.28, pp.778-782, 1992.
- [4-24] P.L. Liu, S.L. Yang and D.M. Yuan "The semivectorial beam propagation method," *IEEE J. of Quantum Electron.*, vol.29, pp.1205-1211, 1993.
- [4-25] Y.L. Hsueh, M.C. Yang and H.C. Chang, "Three-dimensional noniterative full-vectorial beam propagation method based on the alternating direction implicit method," *J. of Lightwave Technol.*, vol.17, pp.2389-2397, 1999.
- [4-26] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery, *Numerical Recipe*, Cambridge University Press, New York, 1992.
- [4-27] G.R. Hadley, "Wide-angle beam propagation using Padé approximant

- operators,” *Opt. Lett.*, vol. 17, pp. 1426-1428, 1992.
- [4-28] G.R. Hadley, “Multistep Method for wide-angle beam propagation,” *Opt. Lett.*, vol. 17, pp. 1743, 1992.
- [4-29] F. Ma, C.L. Xu and W.P. Huang, “Wide-angle full vectorial beam propagation method,” *IEE Proc. J.*, vol.143, pp.139-143, 1996.
- [4-30] Y.P. Chiou and H.C. Chang, “Efficient beam-propagation method based on Padé approximants in the propagation direction,” *Opt. Lett.*, vol.22, pp.949-951, 1997.
- [4-31] Y.P. Chiou, Y.C.Chiang, and H.C. Chang, "Improved three point formulas considering the interface conditions in the finite-difference analysis of step-index optical devices," *Journal of Lightwave Technology*, vol.18, pp.243-251, 2000.

## 第五章 時域分析法

在之前的幾個章節的討論中，我們所得到的都是穩定態的解，也就是把將  $\partial/\partial t$  替換成  $j\omega$ ，這只有在電磁波是單一頻率之的情況下才成立，所以其應用範圍就有所限制，我們列舉了幾個 BPM 無法處理的問題

- 沒有傳播軸的結構
- 脈衝雷射(寬頻帶)
- 暫態分析
- 非線性效應

因此我們在這一章中將介紹時域分析的技巧—FDTD 與 TD-BPM，來解決上述的問題。

### 5.1 時域有限差分法

在這一小節裡我們介紹 Yee[5-1]所提出的 FDTD，它是在沒有任何近似條件下，直接去處理解馬克斯威爾方程式的方法，也因此它的功能最強大。

#### 5.1.1 電動方程式的離散化

在這裡要討論的是三維空間中的情形，我們由隨時間變化的馬克斯

威爾方程式出發

$$-\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{E} \quad (5.1.1)$$

$$\epsilon_0 \epsilon_r \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{H} \quad (5.1.2)$$

將它改寫成分量的形式後

$$-\mu_0 \frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \quad (5.1.3)$$

$$-\mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \quad (5.1.4)$$

$$-\mu_0 \frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \quad (5.1.5)$$

$$\epsilon_0 \epsilon_r \frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (5.1.6)$$

$$\epsilon_0 \epsilon_r \frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \quad (5.1.7)$$

$$\epsilon_0 \epsilon_r \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \quad (5.1.8)$$

如果我們令  $\Delta x$ 、 $\Delta y$ 、 $\Delta z$  是空間上的間距，而  $\Delta t$  為時間上的間距，則波函

數  $F(x, y, z, t)$  離散化之後就可以寫成

$$F^n(i, j, k) = F(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) = F(x, y, z, t) \quad (5.1.9)$$

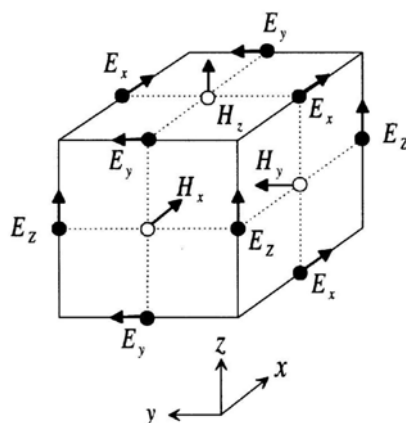


圖 5.1 Yee 晶格示意圖

由於在實作 FDTD 時，中心位置的選取是非常重要的，所以我們先來定義電磁場各個分量的所在位置，而這種取法是由 Yee 所提出的。為了方便解說起見我們用  $\alpha$  來表示像  $x$ 、 $y$ 、 $z$  的空間座標，根據 Yee 的定義：

$$E_{\alpha} \begin{cases} \text{空間座標 } \alpha : \text{半整數} \\ \text{其它空間座標} : \text{整數} \\ \text{時間} : \text{整數} \end{cases} \quad (5.1.10)$$

$$H_{\alpha} \begin{cases} \text{空間座標 } \alpha : \text{整數} \\ \text{其它空間座標} : \text{半整數} \\ \text{時間} : \text{半整數} \end{cases} \quad (5.1.11)$$

我們將之表列如下：

$$(5.1.3) \text{ 式 } H_x \quad x = i\Delta x \quad y = (j+1/2)\Delta y \quad z = (k+1/2)\Delta z \quad t = n\Delta t$$

$$(5.1.4) \text{ 式 } H_y \quad x = (i+1/2)\Delta x \quad y = j\Delta y \quad z = (k+1/2)\Delta z \quad t = n\Delta t$$

$$(5.1.5) \text{ 式 } H_z \quad x = (i+1/2)\Delta x \quad y = (j+1/2)\Delta y \quad z = k\Delta z \quad t = n\Delta t$$

$$(5.1.6) \text{ 式 } E_x \quad x = (i+1/2)\Delta x \quad y = j\Delta y \quad z = k\Delta z \quad t = (n+1/2)\Delta t$$

$$(5.1.7) \text{ 式 } E_y \quad x = i\Delta x \quad y = (j+1/2)\Delta y \quad z = k\Delta z \quad t = (n+1/2)\Delta t$$

$$(5.1.8) \text{ 式 } E_z \quad x = i\Delta x \quad y = j\Delta y \quad z = (k+1/2)\Delta z \quad t = (n+1/2)\Delta t$$

表 5.1 各電磁場分量的中心位置

現在我們就來說明 FDTD 的作法。我們先拿(5.1.3)式作例子，根據表 5.1 的原則，我們可以得到(5.1.3)式等號左邊的有限差分形式為

$$-\frac{\mu_0}{\Delta t} \left[ H_x^{n+1/2} \left( i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) - H_x^{n-1/2} \left( i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (5.1.12)$$

而等號的右邊為

$$\frac{1}{\Delta y} \left[ E_z^n \left( i, j + 1, k + \frac{1}{2} \right) - E_z^n \left( i, j, k + \frac{1}{2} \right) \right] - \frac{1}{\Delta z} \left[ E_y^n \left( i, j + \frac{1}{2}, k + 1 \right) - E_y^n \left( i, j + \frac{1}{2}, k \right) \right] \quad (5.1.13)$$

將兩式相等，並作一些整理之後我們可以得到  $H_x$  為

$$H_x^{n+1/2} \left( i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) = H_x^{n-1/2} \left( i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) - \frac{\Delta t}{\mu_0} \left\{ \frac{1}{\Delta y} \left[ E_z^n \left( i, j + 1, k + \frac{1}{2} \right) - E_z^n \left( i, j, k + \frac{1}{2} \right) \right] - \frac{1}{\Delta z} \left[ E_y^n \left( i, j + \frac{1}{2}, k + 1 \right) - E_y^n \left( i, j + \frac{1}{2}, k \right) \right] \right\} \quad (5.1.14)$$

利用同樣的手法，我們可以得到  $H_y$  與  $H_z$  分別為

$$H_y^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) = H_y^{n-1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) - \frac{\Delta t}{\mu_0} \left\{ \frac{1}{\Delta z} \left[ E_x^n \left( i + \frac{1}{2}, j, k + 1 \right) - E_x^n \left( i + \frac{1}{2}, j, k \right) \right] - \frac{1}{\Delta x} \left[ E_z^n \left( i + 1, j, k + \frac{1}{2} \right) - E_z^n \left( i, j, k + \frac{1}{2} \right) \right] \right\} \quad (5.1.15)$$

$$H_z^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k \right) = H_z^{n-1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k \right) - \frac{\Delta t}{\mu_0} \left\{ \frac{1}{\Delta x} \left[ E_y^n \left( i + 1, j + \frac{1}{2}, k \right) - E_y^n \left( i, j + \frac{1}{2}, k \right) \right] - \frac{1}{\Delta y} \left[ E_x^n \left( i + \frac{1}{2}, j + 1, k \right) - E_x^n \left( i + \frac{1}{2}, j, k \right) \right] \right\} \quad (5.1.16)$$

同樣地，對電場而言作法也是一樣的。我們先拿  $E_x$  作例子，在(5.1.6)

式中等號左邊可以寫成

$$\frac{\epsilon_0 \epsilon_r}{\Delta t} \left[ E_x^{n+1} \left( i + \frac{1}{2}, j, k \right) - E_x^n \left( i + \frac{1}{2}, j, k \right) \right] \quad (5.1.17)$$



而其等號的右邊可以寫成

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta y} \left[ H_z^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k \right) - H_z^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k \right) \right] \\ - \frac{1}{\Delta z} \left[ H_y^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) - H_y^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j, k - \frac{1}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (5.1.18)$$

將兩式相等並整理之後我們可以得到

$$\begin{aligned} E_x^{n+1} \left( i + \frac{1}{2}, j, k \right) = E_x^n \left( i + \frac{1}{2}, j, k \right) + \frac{\Delta t}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \left\{ \frac{1}{\Delta y} \left[ H_z^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k \right) - H_z^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k \right) \right] \right. \\ \left. - \frac{1}{\Delta z} \left[ H_y^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) - H_y^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j, k - \frac{1}{2} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.1.19)$$

利用同樣的手法，我們可以得到  $E_y$  與  $E_z$  分別為

$$\begin{aligned} E_y^{n+1} \left( i, j + \frac{1}{2}, k \right) = E_y^n \left( i, j + \frac{1}{2}, k \right) + \frac{\Delta t}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \left\{ \frac{1}{\Delta z} \left[ H_x^{n+1/2} \left( i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) - H_x^{n+1/2} \left( i, j + \frac{1}{2}, k - \frac{1}{2} \right) \right] \right. \\ \left. - \frac{1}{\Delta x} \left[ H_z^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k \right) - H_z^{n+1/2} \left( i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.1.20)$$

$$\begin{aligned} E_z^{n+1} \left( i, j, k + \frac{1}{2} \right) = E_z^n \left( i, j, k + \frac{1}{2} \right) + \frac{\Delta t}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \left\{ \frac{1}{\Delta x} \left[ H_y^{n+1/2} \left( i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) - H_y^{n+1/2} \left( i - \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2} \right) \right] \right. \\ \left. - \frac{1}{\Delta y} \left[ H_x^{n+1/2} \left( i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) - H_x^{n+1/2} \left( i, j - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.1.21)$$

有了這六個關係式之，再配合其邊界條件之後[5-2], [5-3]，我們就可以模擬電磁波的在空間中隨時間的演歷情形。在一開始設定電磁場的初始值之後，我們就可以算出下一個時間點的磁場，再算下一個時間點的電場，之後再算下一個時間點的磁場…如此循環不已，直到模擬的時間終點。

### 5.1.2 FDTD 的應用情形

目前 FDTD 被普遍的運用在各領域之中，尤其在微波的範圍，由於其頻率為幾個到幾十個 GHz 範圍，所以空間的分割不需要太小，所以記憶體需求還在允許的範圍內，因此被廣泛的運用在天線的分析或微帶型的傳輸線上面。另外我們還可以在一些專書上找到這方面的運用 [5-4]。

### 5.1.3 FDTD 在光學領域應用的瓶頸

然而在光學波段，由於波長太短的限制，使得其應用相對來說是比較少的。像是在面發光雷射 (vertical-cavity surface emitting lasers, VCSELs)，由於其尺度已經與波長相當了，所以正是 FDTD 的最佳適用範圍，

然而對於大部分的三維波導來說，典型的分析空間大小約為  $10\mu\text{m} \times 10\mu\text{m} \times 3\text{mm}$ ，而為了使色散的效果不至於影響到結果的準確度，我們需要使用的格點間距要小於  $\lambda/30$ ，其中  $\lambda$  為波長 [5-6]。所以對於波長為一毫米的光而言，我們需要  $300 * 300 * 90,000 = 8.1 \times 10^9$  個空間格點，而每個空間格點又需要六個向量來表示，在雙精準度的情形下，我們總共需要  $6 * 4 * 8.1 \times 10^9 = 194.4 \text{ GB}$  的記憶體空間來儲存一個時間點的資料。更何況疊代的时间間格還需要受到 Courant-Friedrichs and Lewy (CFL) 的限制 [5-1], [5-5]

$$\Delta t \leq \frac{1}{c_{\max}} \left[ \frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2} \right]^{-1/2} \quad (5.1.1)$$

其中  $c_{\max}$  為光在介質中的速度。也就是說，我們要使用的時間間隔為  $0.06fs$ ，對於一個高斯分佈的脈衝波其半高寬為  $100-fs$ ，它需要  $600fs$  才能完全餵進波導中，也就是需要  $10,000$  個疊代次數。很顯然的，這已經超出了目前超級電腦的能力範圍了[5-6]。也因此我們需要下一小節的 TDBPM 了。

## 5.2 時域光束傳播法

TD-BPM 是在這幾年內被提出來的一個新的想法[5-7]-[5-16]，目前的參考文獻不多，而且應用的例子也不多。但是由於它能不受 FDTD 的 CFL 的限制，所以其疊代的時間  $\Delta t$  可以到達幾個  $\approx fs$  的大小，比 FDTD 大了幾個數量級，因此計算效率能夠提昇不少，也因此引起了我們的興趣。

### 5.2.1 波方程式的推導

由馬克斯威爾方程式我們可以推得

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - \epsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (5.2.1)$$

對於由中心頻率為  $\omega_0$  所構成的脈衝波而言，我們可以令

$$\mathbf{E}(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z, t) e^{-j\omega_0 t} \quad (5.2.2)$$

由上式我們可以推得

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - 2j\omega_0 \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \omega_0^2 \right) e^{-j\omega_0 t} \quad (5.2.3)$$

將上面的結果帶入(5.2.1)式中，我們可以得到

$$\epsilon\mu \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - 2j\epsilon\mu\omega_0 \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\nabla \times \nabla \times \Psi + \epsilon\mu\omega_0^2 \Psi \quad (5.2.4)$$

在 SVEA 的假設下

$$\left| \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \right| \ll 2\omega_0 \left| \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right| \quad (5.2.5)$$

我們可以得到

$$-2j\epsilon\mu\omega_0 \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\nabla \times \nabla \times \Psi + \epsilon\mu\omega_0^2 \Psi \quad (5.2.6)$$

在 WGA 與直角座標的前提下，我們將(5.2.6)式可以改寫成

$$-2j\epsilon\mu\omega_0 \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\nabla^2 + \epsilon\mu\omega_0^2) \Psi \equiv \mathbf{H}\Psi \quad (5.2.7)$$

與 FD-BPM 的波方程式比較之下

$$2j\beta \frac{\partial \Psi}{\partial z} = \nabla_t^2 \Psi + (k^2 - \beta^2) \Psi \quad (5.2.8)$$

我們可以發現它們具有相同的形式，除了 TD-BPM 的維度是屬於四維。也

因此許多 BPM 的技巧都可以運用在此。以上就是 TD-BPM 最常被人使用的

波方程式了，而之後的處理也因人而異，在此我們將拿 Shibayama 等人

[5-14]的論文來作為例子。由於他們處理的是二維結構中 TE 模態，所以

(5.2.7)式會變成

$$-2j\epsilon\mu\omega_0 \frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + \epsilon\mu\omega_0^2 E_y \quad (5.2.9)$$

他們並運用 4.6 小結所介紹的 ADIM 來加速模擬的速度。也就是(5.2.9)

式會分解成

$$\left(-2j\epsilon\mu\omega_0 \frac{\partial E_y}{\partial t}\right)^k = 2\left(\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2}\right)^k + \epsilon\mu\omega_0^2 E_y^k \quad (5.2.10)$$

$$\left(-2j\epsilon\mu\omega_0 \frac{\partial E_y}{\partial t}\right)^{k+1/2} = 2\left(\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2}\right)^{k+1/2} + \epsilon\mu\omega_0^2 E_y^{k+1/2} \quad (5.2.11)$$

這就是完整的 TD-BPM 的作法了。之後他們將這個方法用於計算 FBG

(fiber Bragg grating)的反射係數上，並與 FDTD 所得到的值比對，結

果發現只要花四分之一的計算時間就可以達到同樣的精準度。

### 5.2.2 小結

以上我們推導了 TD-BPM 所使用的波方程式，並介紹 Shibayama 等人的工作，然而由於時間的限制，我們並沒有完成它的程式碼，所以未能有比對的結果，這會在我們的將來工作中討論。

### 參考文獻

- [5-1] K.S. Yee, "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media," IEEE Trans. Antennas Propagag., vol.AP-14, pp.302-307, 1966.
- [5-2] G. Mur, "Absorbing boundary conditions for the finite-difference time-domain approximation of the time domain electromagnetic field equations," IEEE Trans. Electromagn. Compat., vol.EMC-23, pp.377-382, 1981.

- [5-3] J. P. Berenger, "A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves," *J. Computat. Phys.*, vol.114, pp. 185-220,1994.
- [5-4] A. Taflove and S.C. Hagness, *Computational Electrodynamics*, Artech House, 2000.
- [5-5] K.L. Shlager, J.G. Maloney, S.L. Ray and A.F. Peterson, "Relative accuracy of several finite-difference time-domain methods in two and three dimensions," *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol.41, pp.1732-1737, 1993.
- [5-6] H.M. Masoudi and J.M. Arnold, "Parallel beam propagation methods," *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol.6, pp.848-850, 1994.
- [5-7] W.P. Huang, C.L. Xu and J. Chrostowski, "A time-domain propagation scheme for simulation of dynamics of optical guided-wave devices," *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol.5, pp.1071-1073, 1993.
- [5-8] R.Y. Chan and J.M. Liu, "Time-domain wave propagation in optical structures," *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol.6, 1001-1003, 1994.
- [5-9] F. Horst, H.J.W.M. Hoekstra, A. Driessen and T.J.A. Popma, "Time domain beam propagation method for the simulation of temporal solitons in periodic media," *LEOS*, vol.2, pp.27-28, 1995.
- [5-10] P.L. Liu, Q. Zhao and F.S. Choa, "Slow-wave finite-difference beam propagation method," *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol.7, 890-892, 1995.
- [5-11] F. Ma, "Slowly Varying envelope simulation of optical waves in time domain with transparent and absorbing boundary conditions," *J. of Lightwave Technol.*, vol.15, pp.1974-1985, 1997.
- [5-12] G.H. Jin, J. Harari, J.P. Vilcot and Decoster, "An improved time-domain beam propagation method for integrated optics components," *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol.9, pp.348-350, 1997.
- [5-13] H.M. Masoudi, M.A. Al-sunaidi and J.M. Arnold, "Time-domain finite-difference beam propagation method," *IEEE Photon. Lett.*, vol.11, pp.1274-1276, 1999.
- [5-14] J. Shibayama, T. Takahashi, J. Yamauchi and H. Nakano, "Efficient time-domain finite-difference beam propagation methods for the analysis of slab and circularly symmetric waveguides," *J. of Lightwave Technol.*, vol.18, pp.437-442, 2000.
- [5-15] H.M. Masoudi, M.A. Al-Sunaidi and J.M. Arnold, "Efficient time-domain beam propagation method for modeling integrated optical devices," *J. of Lightwave Technol.*, vol.19, pp.759-771, 2001.

## 第六章 總結

在這本論文中，我們回顧了在次波長尺度光學系統設計與模擬中有限差分的各種應用，也完成了許多相對應的程式，並且實際的去模擬一些波導結構，其結果也驗證了程式的正確性。

最後我們並試著延伸到時域的分析方法中，像是 FDTD 與 TDBPM，然而限於時間的關係，我們還未完成其程式的撰寫部分，這將會是我們將來的工作之一。

## 附錄 A 波方程式的推導

電動力學的理论告訴我們，電磁場在空間中傳遞必須要遵守著名的馬克斯威爾方程式(Maxwell equations)[A-1]，其形式如下：

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (\text{A. 1})$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (\text{A. 2})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (\text{A. 3})$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (\text{A. 4})$$

除了(A. 1-4)式之外，還要加上物質方程式(material equation)

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} \quad (\text{A. 5})$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \quad (\text{A. 6})$$

其中  $\varepsilon$  與  $\mu$  分別是在介質中的電介質係數(permittivity)與磁導係數(permeability)，在線性(linear)且等向性(isotropic)的物質中它們可以寫成

$$\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0 \quad (\text{A. 7})$$

$$\mu = \mu_r \mu_0 \quad (\text{A. 8})$$

其中  $\varepsilon_0$  與  $\mu_0$  分別為真空中的電介質係數與磁導係數，其值分別為

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ H/m} \quad (\text{A. 9})$$



$$\varepsilon_0 = \frac{1}{c_0^2 \mu_0} \approx 8.854188 \times 10^{-12} \text{ F/m} \quad (\text{A. 10})$$

而  $\varepsilon_r$  與  $\mu_r$  則是相對於真空的相對電介質係數與相對磁導係數，而且它們是沒有單位的。

在單色光的前提之下，也就是我們假設電磁波是以單一頻率  $\omega$  震盪，我們就可以用相位子(phasor)的方法來表示電磁場，也就是

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \text{Re}\{\bar{\mathbf{E}}(\mathbf{r})\exp(j\omega t)\} \quad (\text{A. 11})$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \text{Re}\{\bar{\mathbf{D}}(\mathbf{r})\exp(j\omega t)\} \quad (\text{A. 12})$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \text{Re}\{\bar{\mathbf{H}}(\mathbf{r})\exp(j\omega t)\} \quad (\text{A. 13})$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \text{Re}\{\bar{\mathbf{B}}(\mathbf{r})\exp(j\omega t)\} \quad (\text{A. 14})$$

為了簡化的緣故，我們使用沒有記號的  $\mathbf{E}$ 、 $\mathbf{H}$ 、 $\mathbf{D}$  與  $\mathbf{B}$  來代表  $\bar{\mathbf{E}}$ 、 $\bar{\mathbf{H}}$ 、 $\bar{\mathbf{D}}$  與  $\bar{\mathbf{B}}$ 。如此一來(A. 1)-(A. 4)式就可以改寫成

$$\nabla \times \mathbf{E} = -j\omega \mathbf{B} = -j\omega \mu_0 \mu_r \mathbf{H} \quad (\text{A. 15})$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = j\omega \mathbf{D} = j\omega \varepsilon_0 \varepsilon_r \mathbf{E} \quad (\text{A. 16})$$

$$\nabla \cdot (\mu_r \mathbf{H}) = 0 \quad (\text{A. 17})$$

$$\nabla \cdot (\varepsilon_r \mathbf{E}) = 0 \quad (\text{A. 18})$$

由於在波導的設計當中是沒有自由電子與自由電荷的存在，所以我們已經令  $\rho = 0$  了。

有了這些條件以後我們就可以開始推導波方程式了，我們首先將  $\nabla \times$  作用到(A. 15)式

$$\begin{aligned}
\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) &= -j\omega\mu_0 \nabla \times (\mu_r \mathbf{H}) = -j\omega\mu_0 (\nabla \mu_r \times \mathbf{H} + \mu_r \nabla \times \mathbf{H}) \\
&= -j\omega\mu_0 (\nabla \mu_r \times \mathbf{H}) - j\omega\mu_0 \mu_r (j\omega\varepsilon_0 \varepsilon_r \mathbf{E}) \\
&= -j\omega\mu_0 (\nabla \mu_r \times \mathbf{H}) - j\omega\mu_0 \mu_r (j\omega\varepsilon_0 \varepsilon_r \mathbf{E})
\end{aligned} \tag{A.19}$$

利用數學公式，我們可以得到

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} \tag{A.20}$$

另外，我們從(A.18)式可以拆成兩項

$$\nabla \cdot (\varepsilon_r \mathbf{E}) = \nabla \varepsilon_r \cdot \mathbf{E} + \varepsilon_r \nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \tag{A.21}$$

移項並同除以  $\varepsilon_r$  之後，我們可以得到

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = -\frac{\nabla \varepsilon_r \cdot \mathbf{E}}{\varepsilon_r} \tag{A.22}$$

再加上從(A.15)式所得到的磁場  $\mathbf{H}$

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{j\omega\mu_0 \mu_r} \nabla \times \mathbf{E} \tag{A.23}$$

最後，將(A.20)、(A.22)與(A.23)三式分別帶入(A.19)式移項並整理之

後，我們可以得到電場的波方程式

$$\nabla^2 \mathbf{E} + \nabla \left( \frac{\nabla \varepsilon_r \cdot \mathbf{E}}{\varepsilon_r} \right) + k_0^2 n_r^2 \mathbf{E} + \left( \nabla \mu_r \times \frac{\nabla \times \mathbf{E}}{\mu_r} \right) = 0 \tag{A.24}$$

其中  $k_0$  為真空中的波數，被定義為

$$k_0 = \omega \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0} = \frac{\omega}{c_0} \tag{A.25}$$

而相對折射率  $n_r$  則被定義為

$$n_r^2 = \mu_r \varepsilon_r \tag{A.26}$$

同樣地，對於磁場的波方程式我們可以將  $\nabla \times$  作用在(A.16)式上

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{H}) = j\omega\varepsilon_0 \nabla \times (\varepsilon_r \mathbf{E}) \quad (\text{A. 27})$$

利用數學公式展開之後，可以得到

$$\begin{aligned} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{H}) - \nabla^2 \mathbf{H} &= j\omega\varepsilon_0 (\nabla \varepsilon_r \times \mathbf{E} + \varepsilon_r \nabla \times \mathbf{E}) \\ &= j\omega\varepsilon_0 (\nabla \varepsilon_r \times \mathbf{E}) + j\omega\varepsilon_0 \varepsilon_r (-j\omega\mu_0 \mu_r \mathbf{H}) \\ &= j\omega\varepsilon_0 (\nabla \varepsilon_r \times \mathbf{E}) + k_0^2 \varepsilon_r \mu_r \mathbf{H} \end{aligned} \quad (\text{A. 28})$$

另外，由(A. 17)式我們可以得到

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = -\frac{1}{\mu_r} (\nabla \mu_r \cdot \mathbf{H}) \quad (\text{A. 29})$$

再加上從(A. 16)式所得到的

$$\mathbf{E} = \frac{1}{j\omega\varepsilon_0 \varepsilon_r} \nabla \times \mathbf{H} \quad (\text{A. 30})$$

最後將(A. 29-30)兩式帶入(A. 28)式並整理之後，我們可以得到磁場的波方程式

$$\nabla^2 \mathbf{H} + \frac{\nabla \varepsilon_r}{\varepsilon_r} \times (\nabla \times \mathbf{H}) + k_0^2 \varepsilon_r \mu_r \mathbf{H} + \frac{1}{\mu_r} [\nabla \mu_r \times (\nabla \times \mathbf{H})] = 0 \quad (\text{A. 31})$$

雖然(A. 24)與(A. 31)式已經是磁場與電場的波方程式，然而在波導的問題中 $\mu_r$ 的變化通常都很小，也就是

$$\nabla \mu_r \approx 0 \quad (\text{A. 32})$$

在這樣的假設之後，我們可以得到電場與磁場的波方程式為

$$\nabla^2 \mathbf{E} + \nabla \left( \frac{\nabla \varepsilon_r \cdot \mathbf{E}}{\varepsilon_r} \right) + k^2 \mathbf{E} = 0 \quad (\text{A. 33})$$

$$\nabla^2 \mathbf{H} + \frac{\nabla \varepsilon_r}{\varepsilon_r} \times (\nabla \times \mathbf{H}) + k^2 \mathbf{H} = 0 \quad (\text{A. 34})$$

其中 $k$ 為介質中的波數，被定義為

$$k = k_0 n_r \quad (\text{A. 35})$$

在均勻介質中，也就是 $\nabla \varepsilon_r = 0$ 的情形下(或 WGA 近似)，我們可以進一步地得到荷姆赫茲方程式(Helmholtz equation)

$$\nabla^2 \Psi + k^2 \Psi = 0 \quad (\text{A. 36})$$

其中 $\Psi$ 可以為電場 $\mathbf{E}$ 或是磁場 $\mathbf{H}$ 。

### 參考文獻

[A-1] J.D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, Wiley, New York, 1999.

附錄 B FDM 的有限差分式係數推導

$$P_{yx}E_x = \left\{ \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r E_x)}{\partial x} \right] - \frac{\partial^2 E_x}{\partial y \partial x} \right\}_{p,q} = ? \quad (\text{B. 1})$$

$$\begin{aligned} (1) \quad \frac{\partial^2 E_x}{\partial y \partial x} \Big|_{p,q} &= \frac{1}{(n+s)} \left[ \frac{\partial E_x}{\partial x} \Big|_{p,q+1} - \frac{\partial E_x}{\partial x} \Big|_{p,q-1} \right] \\ &= \frac{1}{(n+s)} \left[ \frac{E_x(p+1, q+1) - E_x(p-1, q+1)}{(e+w)} - \frac{E_x(p+1, q-1) - E_x(p-1, q-1)}{(e+w)} \right] \\ &= \frac{1}{(n+s)(e+w)} [E_x(p+1, q+1) - E_x(p-1, q+1) - E_x(p+1, q-1) + E_x(p-1, q-1)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (2) \quad \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r E_x)}{\partial x} \right] \Big|_{p,q} &= \frac{1}{(n+s)} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r E_x)}{\partial x} \Big|_{p,q+1} - \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r E_x)}{\partial x} \Big|_{p,q-1} \right] \\ &= \frac{1}{(n+s)} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r(p, q+1)} \frac{\varepsilon_r(p+1, q+1)E_x(p+1, q+1) - \varepsilon_r(p-1, q+1)E_x(p-1, q+1)}{(e+w)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\varepsilon_r(p, q-1)} \frac{\varepsilon_r(p+1, q-1)E_x(p+1, q-1) - \varepsilon_r(p-1, q-1)E_x(p-1, q-1)}{(e+w)} \right] \\ &= \frac{1}{(n+s)(e+w)} \left[ \frac{\varepsilon_r(p+1, q+1)}{\varepsilon_r(p, q+1)} E_x(p+1, q+1) - \frac{\varepsilon_r(p-1, q+1)}{\varepsilon_r(p, q+1)} E_x(p-1, q+1) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\varepsilon_r(p+1, q-1)}{\varepsilon_r(p, q-1)} E_x(p+1, q-1) + \frac{\varepsilon_r(p-1, q-1)}{\varepsilon_r(p, q-1)} E_x(p-1, q-1) \right] \end{aligned}$$

(3) 將(1)與(2)的結果帶入(B. 1)式後，我們可以得到

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r E_x)}{\partial x} \right] - \frac{\partial^2 E_x}{\partial y \partial x} \right\}_{p,q} &= \frac{1}{(n+s)(e+w)} \left[ \frac{\varepsilon_r(p+1, q+1) - \varepsilon_r(p, q+1)}{\varepsilon_r(p, q+1)} E_x(p+1, q+1) \right. \\ &\quad \frac{\varepsilon_r(p, q+1) - \varepsilon_r(p-1, q+1)}{\varepsilon_r(p, q+1)} E_x(p-1, q+1) + \frac{\varepsilon_r(p, q-1) - \varepsilon_r(p+1, q-1)}{\varepsilon_r(p, q-1)} E_x(p+1, q-1) \\ &\quad \left. \frac{\varepsilon_r(p-1, q-1) - \varepsilon_r(p, q-1)}{\varepsilon_r(p, q-1)} E_x(p-1, q-1) \right] \quad (\text{B. 2}) \end{aligned}$$

$$P_{xy}E_y = \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r E_y)}{\partial y} \right] - \frac{\partial^2 E_y}{\partial x \partial y} \right\}_{p,q} = ? \quad (\text{B. 3})$$

$$(1) \quad \left. \frac{\partial^2 E_y}{\partial x \partial y} \right|_{p,q} = \frac{1}{(e+w)} \left[ \left. \frac{\partial E_y}{\partial y} \right|_{p+1,q} - \left. \frac{\partial E_y}{\partial y} \right|_{p-1,q} \right]$$

$$= \frac{1}{(e+w)} \left[ \frac{E_y(p+1, q+1) - E_y(p+1, q-1)}{(n+s)} - \frac{E_y(p-1, q+1) - E_y(p-1, q-1)}{(n+s)} \right]$$

$$= \frac{1}{(e+w)(n+s)} [E_y(p+1, q+1) - E_y(p+1, q-1) - E_y(p-1, q+1) + E_y(p-1, q-1)]$$

$$(2) \quad \left. \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r E_y)}{\partial y} \right] \right|_{p,q} = \frac{1}{(e+w)} \left[ \left. \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r E_y)}{\partial y} \right|_{p+1,q} - \left. \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r E_y)}{\partial y} \right|_{p-1,q} \right]$$

$$= \frac{1}{(e+w)} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r(p+1, q)} \frac{\varepsilon_r(p+1, q+1)E_y(p+1, q+1) - \varepsilon_r(p+1, q-1)E_y(p+1, q-1)}{(n+s)} \right.$$

$$\left. - \frac{1}{\varepsilon_r(p-1, q)} \frac{\varepsilon_r(p-1, q+1)E_y(p-1, q+1) - \varepsilon_r(p-1, q-1)E_y(p-1, q-1)}{(n+s)} \right]$$

$$= \frac{1}{(n+s)(e+w)} \left[ \frac{\varepsilon_r(p+1, q+1)}{\varepsilon_r(p+1, q)} E_y(p+1, q+1) - \frac{\varepsilon_r(p+1, q-1)}{\varepsilon_r(p+1, q)} E_y(p+1, q-1) \right.$$

$$\left. - \frac{\varepsilon_r(p-1, q+1)}{\varepsilon_r(p-1, q)} E_y(p-1, q+1) + \frac{\varepsilon_r(p-1, q-1)}{\varepsilon_r(p-1, q)} E_y(p-1, q-1) \right]$$

(3) 將(1)與(2)的結果帶入(B. 3)式後，我們可以得到

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{\partial(\varepsilon_r E_y)}{\partial y} \right] - \frac{\partial^2 E_y}{\partial x \partial y} \right\}_{p,q} = \frac{1}{(n+s)(e+w)} \left[ \frac{\varepsilon_r(p+1, q+1) - \varepsilon_r(p+1, q)}{\varepsilon_r(p+1, q)} E_y(p+1, q+1) \right.$$

$$\left. + \frac{\varepsilon_r(p+1, q) - \varepsilon_r(p+1, q-1)}{\varepsilon_r(p+1, q)} E_y(p+1, q-1) + \frac{\varepsilon_r(p-1, q) - \varepsilon_r(p-1, q+1)}{\varepsilon_r(p-1, q)} E_y(p-1, q+1) \right.$$

$$\left. + \frac{\varepsilon_r(p-1, q-1) - \varepsilon_r(p-1, q)}{\varepsilon_r(p-1, q)} E_y(p-1, q-1) \right] \quad (\text{B. 4})$$

$$P\psi = \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + k_0^2 \varepsilon_r \mu_r \psi \right)_{p,q} = ? \quad (\text{B. 5})$$

$$(1) \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \Big|_{p,q} = \frac{2}{e(e+w)} \psi_{p+1,q} - \frac{2}{ew} \psi_{p,q} + \frac{2}{w(e+w)} \psi_{p-1,q} \quad (\text{B. 6})$$

$$(2) \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \Big|_{p,q} = \frac{2}{s(s+n)} \psi_{p,q+1} - \frac{2}{ns} \psi_{p,q} + \frac{2}{n(s+n)} \psi_{p,q-1} \quad (\text{B. 7})$$

(3) 將(1)與(2)的結果帶入(B.5)式後，我們可以得到

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + k_0^2 \varepsilon_r \mu_r \psi \right)_{p,q} &= \frac{2}{e(e+w)} \psi_{p+1,q} + \frac{2}{w(e+w)} \psi_{p-1,q} \\ &+ \frac{2}{s(s+n)} \psi_{p,q+1} + \frac{2}{n(s+n)} \psi_{p,q-1} + \left[ -\frac{2}{ew} - \frac{2}{ns} + k_0^2 \varepsilon_r(p,q) \mu_r(p,q) \right] \psi_{p,q} \end{aligned} \quad (\text{B. 8})$$

附錄 C WA-BPM 的係數推導

1. WA-0th order (Fresnel approximation) :

$$\frac{\partial}{\partial z}\bigg|_0 = \frac{-j\mathbf{P}/2\beta}{1 + \frac{j}{2\beta} \frac{\partial}{\partial z}\bigg|_{-1}} = -j \frac{\mathbf{P}}{2\beta} \quad (\text{C.1})$$

2. WA-1st order:

$$\frac{\partial}{\partial z}\bigg|_1 = \frac{-j\mathbf{P}/2\beta}{1 + \frac{j}{2\beta} \frac{\partial}{\partial z}\bigg|_0} = \frac{-j\mathbf{P}/2\beta}{1 + \frac{j}{2\beta} \left(-\frac{j\mathbf{P}}{2\beta}\right)} = -j \frac{\mathbf{P}/2\beta}{1 + \mathbf{P}/4\beta^2} \quad (\text{C.2})$$

3. WA-2nd order

$$\frac{\partial}{\partial z}\bigg|_2 = \frac{-j\mathbf{P}/2\beta}{1 + \frac{j}{2\beta} \frac{\partial}{\partial z}\bigg|_1} = \frac{-j\mathbf{P}/2\beta}{1 + \frac{j}{2\beta} \left(\frac{-j\mathbf{P}/2\beta}{1 + \mathbf{P}/4\beta^2}\right)} = -j \frac{\mathbf{P}/2\beta + \mathbf{P}^2/8\beta^3}{1 + \mathbf{P}/2\beta^2} \quad (\text{C.3})$$

4. WA-3rd order

$$\frac{\partial}{\partial z}\bigg|_3 = \frac{-j\mathbf{P}/2\beta}{1 + \frac{j}{2\beta} \frac{\partial}{\partial z}\bigg|_2} = \frac{-j\mathbf{P}/2\beta}{1 + \frac{j}{2\beta} \left(\frac{-j(\mathbf{P}/2\beta + \mathbf{P}^2/8\beta^3)}{1 + \mathbf{P}/2\beta^2}\right)} = -j \frac{\mathbf{P}/2\beta + \mathbf{P}^2/4\beta^3}{1 + 3\mathbf{P}/4\beta^2 + \mathbf{P}^2/16\beta^4} \quad (\text{C.4})$$

5. WA-4th order

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z}\bigg|_4 &= \frac{-j\mathbf{P}/2\beta}{1 + \frac{j}{2\beta} \frac{\partial}{\partial z}\bigg|_3} = \frac{-j\mathbf{P}/2\beta}{1 + \frac{j}{2\beta} \left(\frac{-j(\mathbf{P}/2\beta + \mathbf{P}^2/4\beta^3)}{1 + 3\mathbf{P}/4\beta^2 + \mathbf{P}^2/16\beta^4}\right)} \\ &= -j \frac{\mathbf{P}/2\beta + 3\mathbf{P}^2/8\beta^3 + \mathbf{P}^3/32\beta^5}{1 + \mathbf{P}/\beta^2 + 3\mathbf{P}^2/16\beta^4} \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

6. WA-5th order

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z}\bigg|_5 &= \frac{-j\mathbf{P}/2\beta}{1 + \frac{j}{2\beta} \frac{\partial}{\partial z}\bigg|_4} = \frac{-j\mathbf{P}/2\beta}{1 + \frac{j}{2\beta} \left(\frac{-j(\mathbf{P}/2\beta + 3\mathbf{P}^2/8\beta^3 + \mathbf{P}^3/32\beta^5)}{1 + \mathbf{P}/\beta^2 + 3\mathbf{P}^2/16\beta^4}\right)} \\ &= -j \frac{\mathbf{P}/2\beta + \mathbf{P}^2/2\beta^3 + 3\mathbf{P}^3/32\beta^5}{1 + 5\mathbf{P}/4\beta^2 + 3\mathbf{P}^2/8\beta^4 + \mathbf{P}^3/64\beta^6} \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

7. WA-6th order



$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial}{\partial z}\right|_6 &= \frac{-j\mathbf{P}/2\beta}{1 + \frac{j}{2\beta} \left.\frac{\partial}{\partial z}\right|_5} = \frac{-j\mathbf{P}/2\beta}{1 + \frac{j}{2\beta} \left( \frac{-j(\mathbf{P}/2\beta + \mathbf{P}^2/2\beta^3 + 3\mathbf{P}^3/32\beta^5)}{1 + 5\mathbf{P}/4\beta^2 + 3\mathbf{P}^2/8\beta^4 + \mathbf{P}^3/64\beta^6} \right)} \\ &= -j \frac{\mathbf{P}/2\beta + 5\mathbf{P}^2/8\beta^3 + 3\mathbf{P}^3/16\beta^5 + \mathbf{P}^4/128\beta^7}{1 + 3\mathbf{P}/2\beta^2 + 5\mathbf{P}^2/8\beta^4 + \mathbf{P}^3/16\beta^6}\end{aligned}\quad (\text{C.7})$$

8. WA-7th order

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial}{\partial z}\right|_7 &= \frac{-j\mathbf{P}/2\beta}{1 + \frac{j}{2\beta} \left.\frac{\partial}{\partial z}\right|_6} = \frac{-j\mathbf{P}/2\beta}{1 + \frac{j}{2\beta} \left( \frac{-j(\mathbf{P}/2\beta + 5\mathbf{P}^2/8\beta^3 + 3\mathbf{P}^3/16\beta^5 + \mathbf{P}^4/128\beta^7)}{1 + 3\mathbf{P}/2\beta^2 + 5\mathbf{P}^2/8\beta^4 + \mathbf{P}^3/16\beta^6} \right)} \\ &= -j \frac{\mathbf{P}/2\beta + 3\mathbf{P}^2/4\beta^3 + 5\mathbf{P}^3/16\beta^5 + \mathbf{P}^4/32\beta^7}{1 + 7\mathbf{P}/4\beta^2 + 15\mathbf{P}^2/16\beta^4 + 5\mathbf{P}^3/32\beta^6 + \mathbf{P}^4/256\beta^8}\end{aligned}\quad (\text{C.8})$$

其中廣角的階數  $n$  與 Padé 近似子的階數  $(p, q)$  之間的關係為

$$n = p + q - 1 \quad (\text{C.9})$$

其中  $p = 1, 2, \dots, n$  而  $q = p$  or  $p - 1$ 。接下來，我們要推導 WABPM 各階近似的係數  $\xi_i$

1. WA-0th order [Padé(1,0), Fresnel approximation] :

由(C.1)式我們可以得到

$$\mathbf{D} = 1, \quad \mathbf{N} = \frac{\mathbf{P}}{2\beta} \quad (\text{C.10})$$

所以

$$\mathbf{D} - j \frac{\Delta z}{2} \mathbf{N} = 1 - j \frac{\Delta z}{2} \left( \frac{\mathbf{P}}{2\beta} \right) \quad (\text{C.11})$$

比較係數之後我們可以得到，

$$\xi_0 = 1, \quad \xi_1 = -\frac{j\Delta z}{4\beta^2} \quad (\text{C.12})$$

2. WA-1st order [Padé(1,1)] : 由 (C.2)式我們可以得到

$$\mathbf{D} = 1 + \frac{\mathbf{P}}{4\beta^2}, \quad \mathbf{N} = \frac{\mathbf{P}}{2\beta} \quad (\text{C.13})$$

所以

$$\mathbf{D} - j\frac{\Delta z}{2}\mathbf{N} = 1 + \frac{\mathbf{P}}{4\beta^2} - j\frac{\Delta z}{2}\left(\frac{\mathbf{P}}{2\beta}\right) = 1 + \frac{1 - j\beta\Delta z}{4\beta^2}\mathbf{P} \quad (\text{C.14})$$

比較係數之後我們可以得到，

$$\xi_0 = 1, \quad \xi_1 = \frac{1 - j\beta\Delta z}{4\beta^2} \quad (\text{C.15})$$

3. WA-2nd order [Padé(2,1)]：由(C.3)式我們可以得到

$$\mathbf{D} = 1 + \frac{\mathbf{P}}{2\beta^2}, \quad \mathbf{N} = \frac{\mathbf{P}}{2\beta} + \frac{\mathbf{P}^2}{8\beta^3} \quad (\text{C.16})$$

所以

$$\mathbf{D} - j\frac{\Delta z}{2}\mathbf{N} = 1 + \frac{\mathbf{P}}{2\beta^2} - j\frac{\Delta z}{2}\left(\frac{\mathbf{P}}{2\beta} + \frac{\mathbf{P}^2}{8\beta^3}\right) = 1 + \frac{2 - j\beta\Delta z}{4\beta^2}\mathbf{P} - \frac{j\Delta z}{16\beta^3}\mathbf{P}^2 \quad (\text{C.17})$$

比較係數之後我們可以得到，

$$\xi_0 = 1, \quad \xi_1 = \frac{2 - j\beta\Delta z}{4\beta^2}, \quad \xi_2 = \frac{-j\Delta z}{16\beta^3} \quad (\text{C.18})$$

4. WA-3rd order [Padé(2,2)]：由(C.4)式我們可以得到

$$\mathbf{D} = 1 + \frac{3\mathbf{P}}{4\beta^2} + \frac{\mathbf{P}^2}{16\beta^4}, \quad \mathbf{N} = \frac{\mathbf{P}}{2\beta} + \frac{\mathbf{P}^2}{4\beta^3} \quad (\text{C.19})$$

所以，

$$\begin{aligned} \mathbf{D} - j\frac{\Delta z}{2}\mathbf{N} &= 1 + \frac{3\mathbf{P}}{4\beta^2} + \frac{\mathbf{P}^2}{16\beta^4} - j\frac{\Delta z}{2}\left(\frac{\mathbf{P}}{2\beta} + \frac{\mathbf{P}^2}{4\beta^3}\right) \\ &= 1 + \frac{3 - j\beta\Delta z}{4\beta^2}\mathbf{P} + \frac{1 - j2\beta\Delta z}{16\beta^4}\mathbf{P}^2 \end{aligned} \quad (\text{C.20})$$

比較係數之後我們可以得到，

$$\xi_0 = 1, \quad \xi_1 = \frac{3 - j\beta\Delta z}{4\beta^2}, \quad \xi_2 = \frac{1 - j2\beta\Delta z}{16\beta^4} \quad (\text{C.21})$$

5. WA-4th order [Padé(3,2)] : 由式子(4.70)我們可以得到

$$\mathbf{D} = 1 + \frac{\mathbf{P}}{\beta^2} + \frac{3\mathbf{P}^2}{16\beta^4}, \quad \mathbf{N} = \frac{\mathbf{P}}{2\beta} + \frac{3\mathbf{P}^2}{8\beta^3} + \frac{\mathbf{P}^3}{32\beta^5}$$

所以，

$$\begin{aligned} \mathbf{D} - j\frac{\Delta z}{2}\mathbf{N} &= 1 + \frac{\mathbf{P}}{\beta^2} + \frac{3\mathbf{P}^2}{16\beta^4} - j\frac{\Delta z}{2}\left(\frac{\mathbf{P}}{2\beta} + \frac{3\mathbf{P}^2}{8\beta^3} + \frac{\mathbf{P}^3}{32\beta^5}\right) \\ &= 1 + \frac{4 - j\beta\Delta z}{4\beta^2}\mathbf{P} + \frac{3 - j3\beta\Delta z}{16\beta^4}\mathbf{P}^2 - \frac{j\Delta z}{64\beta^5}\mathbf{P}^3 \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

比較係數之後我們可以得到，

$$\xi_0 = 1, \quad \xi_1 = \frac{4 - j\beta\Delta z}{4\beta^2}, \quad \xi_2 = \frac{3 - j3\beta\Delta z}{8\beta^4}, \quad \xi_3 = \frac{-j\Delta z}{64\beta^5} \quad (\text{C.23})$$

6. WA-5th order [Padé(3,3)] : 由 (C.6)式我們可以得到

$$\mathbf{D} = 1 + \frac{5\mathbf{P}}{4\beta^2} + \frac{3\mathbf{P}^2}{8\beta^4} + \frac{\mathbf{P}^3}{64\beta^6}, \quad \mathbf{N} = \frac{\mathbf{P}}{2\beta} + \frac{\mathbf{P}^2}{2\beta^3} + \frac{3\mathbf{P}^3}{32\beta^5}$$

所以，

$$\begin{aligned} \mathbf{D} - j\frac{\Delta z}{2}\mathbf{N} &= 1 + \frac{5\mathbf{P}}{4\beta^2} + \frac{3\mathbf{P}^2}{8\beta^4} + \frac{\mathbf{P}^3}{64\beta^6} - j\frac{\Delta z}{2}\left(\frac{\mathbf{P}}{2\beta} + \frac{\mathbf{P}^2}{2\beta^3} + \frac{3\mathbf{P}^3}{32\beta^5}\right) \\ &= 1 + \frac{5 - j\beta\Delta z}{4\beta^2}\mathbf{P} + \frac{3 - j2\beta\Delta z}{8\beta^4}\mathbf{P}^2 + \frac{1 - j3\beta\Delta z}{64\beta^6}\mathbf{P}^3 \end{aligned} \quad (\text{C.24})$$

比較係數之後我們可以得到，

$$\xi_0 = 1, \quad \xi_1 = \frac{5 - j\beta\Delta z}{4\beta^2}, \quad \xi_2 = \frac{3 - j2\beta\Delta z}{8\beta^4}, \quad \xi_3 = \frac{1 - j3\beta\Delta z}{64\beta^6} \quad (\text{C.25})$$

7. WA-6th order [Padé(4,3)] : 由(C.7)式我們可以得到

$$\mathbf{D} = 1 + \frac{3\mathbf{P}}{2\beta^2} + \frac{5\mathbf{P}^2}{8\beta^4} + \frac{\mathbf{P}^3}{16\beta^6}, \quad \mathbf{N} = \frac{\mathbf{P}}{2\beta} + \frac{5\mathbf{P}^2}{8\beta^3} + \frac{3\mathbf{P}^3}{16\beta^5} + \frac{\mathbf{P}^4}{128\beta^7}$$

所以，

$$\begin{aligned} \mathbf{D} - j \frac{\Delta z}{2} \mathbf{N} &= 1 + \frac{3\mathbf{P}}{2\beta^2} + \frac{5\mathbf{P}^2}{8\beta^4} + \frac{\mathbf{P}^3}{16\beta^6} - j \frac{\Delta z}{2} \left( \frac{\mathbf{P}}{2\beta} + \frac{5\mathbf{P}^2}{8\beta^3} + \frac{3\mathbf{P}^3}{16\beta^5} + \frac{\mathbf{P}^4}{128\beta^7} \right) \\ &= 1 + \frac{6 - j\beta\Delta z}{4\beta^2} \mathbf{P} + \frac{10 - j5\beta\Delta z}{16\beta^4} \mathbf{P}^2 + \frac{2 - j3\beta\Delta z}{32\beta^6} \mathbf{P}^3 - \frac{j\Delta z}{256\beta^7} \mathbf{P}^4 \quad (\text{C.26}) \end{aligned}$$

比較係數之後我們可以得到，

$$\xi_0 = 1, \quad \xi_1 = \frac{6 - j\beta\Delta z}{4\beta^2}, \quad \xi_2 = \frac{10 - j5\beta\Delta z}{16\beta^4}, \quad \xi_3 = \frac{2 - j3\beta\Delta z}{32\beta^6}, \quad \xi_4 = \frac{-j\Delta z}{256\beta^7} \quad (\text{C.27})$$

8. WA-7th order [Padé(4,4)]：由(C.8)式我們可以得到

$$\mathbf{D} = 1 + \frac{7\mathbf{P}}{4\beta^2} + \frac{15\mathbf{P}^2}{16\beta^4} + \frac{5\mathbf{P}^3}{32\beta^6} + \frac{\mathbf{P}^4}{256\beta^8}, \quad \mathbf{N} = \frac{\mathbf{P}}{2\beta} + \frac{3\mathbf{P}^2}{4\beta^3} + \frac{5\mathbf{P}^3}{16\beta^5} + \frac{\mathbf{P}^4}{32\beta^7}$$

所以，

$$\begin{aligned} \mathbf{D} - j \frac{\Delta z}{2} \mathbf{N} &= 1 + \frac{7\mathbf{P}}{4\beta^2} + \frac{15\mathbf{P}^2}{16\beta^4} + \frac{\mathbf{P}^3}{32\beta^6} + \frac{\mathbf{P}^4}{256\beta^8} - j \frac{\Delta z}{2} \left( \frac{\mathbf{P}}{2\beta} + \frac{3\mathbf{P}^2}{4\beta^3} + \frac{5\mathbf{P}^3}{16\beta^5} + \frac{\mathbf{P}^4}{32\beta^7} \right) \\ &= 1 + \frac{7 - j\beta\Delta z}{4\beta^2} \mathbf{P} + \frac{15 - j6\beta\Delta z}{16\beta^4} \mathbf{P}^2 + \frac{5 - j5\beta\Delta z}{32\beta^6} \mathbf{P}^3 + \frac{1 - j4\beta\Delta z}{256\beta^8} \mathbf{P}^4 \quad (\text{C.28}) \end{aligned}$$

比較係數之後我們可以得到，

$$\xi_0 = 1, \quad \xi_1 = \frac{7 - j\beta\Delta z}{4\beta^2}, \quad \xi_2 = \frac{15 - j6\beta\Delta z}{16\beta^4}, \quad \xi_3 = \frac{5 - j5\beta\Delta z}{32\beta^6}, \quad \xi_4 = \frac{1 - j4\beta\Delta z}{256\beta^8} \quad (\text{C.29})$$