

# BPM 方法在 SOI 结构中的应用\*

张小峰 余金中 王启明 魏红振

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

**摘要:** 采用交错隐式算子分裂(ADI)算法, 设计、实现了一种高速、高精度的波束传播方法(BPM)来模拟 SOI 波导中不同偏振态的光传输, 研究了 PML 边界层的选取对虚传播计算基模和基模传播常数的影响, 给出了大光腔 SOI 波导结构不同偏振的基模传播常数。

**关键词:** BPM 方法; ADI 方法; PML 边条件; SOI 结构; 光开关; 虚传播方法; 最小残差方法

**PACC:** 4200

中图分类号: TN814<sup>+</sup>.6

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2002)02-0169-05

## 1 引言

随着集成光电子行业的发展和对新结构研究的不断深入, 以及对于降低开发成本的考虑, 要求在设计之初就要对器件的性能特性和可行性做出合理而定量的分析和预测, 这就对器件和系统级的模拟提出了很高的要求。现在国际上通常采用 BPM (beam propagation method)、FDTD(时间域有限差分分析)、FED(有限元方法)<sup>[1,2]</sup>来分析给定的复杂结构。随着 PC 机的普及, BPM 方法由于其灵活性, 而深受人喜爱。在实际器件的设计中, 尤其是对于有波节结构如 MMI、Direct Coupler、MZI, 或者对于有很大纵向变化的波导结构如 Taper 来说, 精确预计波节出现的空间位置是器件设计成功的关键, 尤其是基模的传播常数更是重要。另外, 精确的模拟对于分析器件特性与容差的关系, 以及器件的优化都是至关重要的。

本文模拟采用了几项计算中关键的新技术, 包括 ADI 方法<sup>[3]</sup>、边界条件、C-N(crank-nicholson)等隐式和显示计算。分析中用到了一些适用技巧和方法, 并将该方法应用于计算 SOI (silicon on insulator) 结构中基模式和传播常数, 并给出了较为详尽的说明。模拟的结构表明 SOI 大光腔结构不会

导致 TE、TM 波基模传播常数过大差异, 以后可以采用更加快速的二维 BPM 方法进行模拟。

## 2 基本麦克斯韦方程的差分形式

对于像 SOI 结构这样的存在大折射率差的边界结构, 在模拟中采用了磁矢量来描述电磁波的传播, 消除了对于强限制波导结构边界上电矢量不连续带来的数值噪声, 非常适合脊型波导结构, 而且保证了计算格式的统一, 提高了计算速度。在各向同性介质中, Maxwell 方程磁矢量形式可以写成:

$$\nabla \times \nabla \times H - n^2 k^2 H - \frac{1}{n^2} \nabla n^2 \times (\nabla \times H) = 0$$

在介质波导中, 对于满足缓变近似(SVEA)的行波解, 可以设为快变高频函数和缓变包络函数的乘积形式。设波沿 z 方向传播, 由于波导结构一般满足  $n^2$  在 z 方向上缓变, 所以可以省略含有  $\frac{\partial n^2}{\partial z}$  的项, 则可以将上述算子方程简写为耦合方程组的形式。

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} = B_{xx}H_x + B_{xy}H_y$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial z} = B_{yx}H_x + B_{yy}H_y$$

其中  $H_x, H_y$  分别为偏振方向为 x 方向和 y 方向的磁矢量;  $n_0$  为参考折射率, 即磁矢量中的高频振

\* 国家自然科学基金(批准号 69990540 及 69896260-06) 和科技部 973 资助项目(合同号 G20000366)

张小峰 男, 1976 年出生, 硕士研究生, 现从事硅基 SOI 波导开关及其理论的研究。

2001-03-29 收到, 2001-06-29 定稿

©2002 中国电子学会

动成分;  $k$  为真空中的波数;  $n$  为三维波导结构中折射率的分布函数.

对于实际的三维波导结构, 严格地说, 不同偏振态之间存在耦合, 所以波导中传播的应该是混合模, 但实际上这种耦合非常微弱, 而且除非采用专门的同步技术, 否则现象并不明显<sup>[3]</sup>. 所以通常忽略耦合项, 分别独立处理不同两种偏振波, 这就是所谓半矢量方法, 忽略不同偏振之间的耦合, 即  $B_{xy}$  和  $B_{yx}$  项为零. 采用 C-N 差分格式, 保证了误差满足  $O(dz^2) + O(dx^2) + O(dy^2)$ , 用 ADI 方法进行算子分裂, 分别按照  $x$ 、 $y$  分量进行分解, 这样就可以通过连续分别求解  $m_y$  个  $m_x$  维的三对角方程组和  $m_x$  个  $m_y$  维的三对角方程组来简化求解过程, 提高计算效率. 但在通常情况下, 大光腔 SOI 结构三对角矩阵的条件数较大约 40 左右, 随  $z$  方向步长变化. 在  $dx = 0.1\mu\text{m}$ ,  $dy = 0.1\mu\text{m}$  的情况下, 随着  $d$  的增大, 而迅速变大. 因此在单步的计算过程中我们采用了稀疏三对角矩阵的直接解法和最小残差方法相结合的办法, 由直接解法得到迭代的初值, 然后通过少量高效的迭代提高计算精度. 一般地说, 当矩阵很大时, 迭代法比较费时, 但精度反而高于直接解法. 由于已经得到了相当好的初值, 只需通过很少次数的迭代, 就可获得令人满意的结果, 在以下的模拟中, 其单步迭代误差的无穷范数小于  $1 \times 10^{-13}$ .

### 3 边界条件的选择原则

BPM 方法确实是一种模拟单向传播波场的好方法, 它可以给出波场在空间的具体分布. 但从原理上看, 它描述的是非常广阔的空间或者是无界空间中波场的行为, 而实际我们所能模拟的空间受计算速度和能力等计算机硬件资源的限制, 必然模拟的是有界空间的情况, 因此必须建立一种人为边界条件来模拟无界空间的情况. 在实际应用中通常采用的人造边界条件包括: TBC(transparent boundary condition)<sup>[4]</sup>、ABC (absorbing boundary condition)<sup>[5, 6]</sup>、PML(perfect match layer)<sup>[7]</sup>、COM(complementary operator method)<sup>[8, 9]</sup>等边界条件. 各种吸收边界条件从原理上讲, 都是通过在计算的边界上加上一个人造吸收层; 但具体到实际的结构, 吸收层的选取是非常讲究的, 既要保证实现相当好的吸收, 又要保证吸收系数的梯度要足够光滑, 不致引起伪反射的出现. 具体应用在 SOI 的大光腔结构

上, 为了解决强限制带来的数值发散问题, 我们采用了 PML 边界条件(PML 原理见附录). 引入 PML 边界层以后, 当电吸收系数采用抛物线分布时,

$$S_{x,y} = 1 - j \frac{3\lambda_0\rho^2}{4\pi n d^3} \ln(1/R)$$

其中  $d$  为 PML 层厚度;  $\rho$  为距离计算窗口和 PML 层边界的距离;  $n$  为介质折射率;  $R$  为理论计算要求的发射率. 可以通过使波束沿虚轴传播几十微米即可求得传播常数和基模分布.

### 4 光场模式计算原理和光场传播常数计算原理

Yevick 和 Bardyszewski<sup>[10]</sup> 证明了可以通过沿虚轴传播方法得到基模分布和传播常数, 并且证明了这种方法和变分有限差分方法等价.

对于满足傍轴近似的全矢量波动方程<sup>[11]</sup>,

$$\frac{\partial \Psi}{\partial z} = -jH\Psi$$

其中  $H = \begin{bmatrix} H_{xx} & H_{xy} \\ H_{yx} & H_{yy} \end{bmatrix}$ ,  $\Psi = \begin{bmatrix} \Psi_x \\ \Psi_y \end{bmatrix}$ . 对于直波导, 形式解可以表述为  $\Psi(x, y, z) = \exp(-jzH)\Psi(x, y, 0)$ . 对于任意形式的输入波函数都可以写成该结构的本征模式的叠加  $\Psi(x, y, 0) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \Phi_m(x, y)$ , 此叠加中包含了所有的导模式和辐射模式.

$H\Phi_m(x, y) = \lambda_m\Phi_m(x, y)$ . 不妨设本征值满足  $\lambda_0 > \lambda_1 > \dots > \lambda_m > \dots$ , 则  $m$  阶模的本征值和其传播常数之间的关系满足:  $\lambda_m = \beta_m - n_0 k$ , 其中  $n_0$  是参考折射率,  $k$  是真空中的波数.

利用上面的关系可以很容易得到:

$$\Psi(x, y, z) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \exp(-j\lambda_m z) \Phi_m(x, y)$$

当波沿着虚轴传播时,  $z = j\tau$ , 上式可以简化为:

$$\Psi(x, y, \tau) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \exp(\lambda_m \tau) \Phi_m(x, y)$$

当  $n_0 = \beta_0/k$  时(在实际计算中只要保持两者相近), 这时  $\lambda_0 = 0$ , 而其它的本征值都小于零, 所以有  $\lim_{\tau \rightarrow \infty} \Psi(x, y, \tau) = a_0 \Phi_0(x, y)$ . 这意味着所有高阶模将沿虚轴传播方向指数衰减, 只有基模基本保持不变. 所以沿虚轴传播一定距离以后, 基模将成为主项, 所有的高阶模都将消失. 在实际计算中可以采用如下

方法:

$$\beta(\tau) = n_0 k + \frac{\ln \left[ \int \Psi(x, y, \tau + \Delta\tau) dx dy \right] - \ln \left[ \int \Psi(x, y, \tau) dx dy \right]}{\Delta\tau},$$

逐步自适应地得到。采用上述方法可以在较短的虚轴距离内求得有效折射率。在基本达到结果时会出现衰减的小幅振荡。

收敛的判据可以采用标准差:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{10} \sum_{n_z=9}^{n_z} [n_{\text{eff}}(i) - n_{\text{eff}}]^2}, n_{\text{eff}} = \frac{1}{10} \sum_{n_z=9}^{n_z} n_{\text{eff}}(i)$$

## 5 基本结果

### 5.1 算法稳定性验证

首先验证一下本方法的精度,对于经典的结构<sup>[3]</sup>(见图 1), $D_1 = 3$ , $D_2 = 0.5$ , $H = 0.5$ , $n_1 = 1$ , $n_2 = 3.44$ , $n_3 = 3.4$ ,计算结果见表 1。其中 $n_0$ 为初始值, $t$ 为计算时间,NHX、NHY 为计算精度的相对误差,即 NHX、NHY 代表了用本文采用的方法得到的 $H_x$ 、 $H_y$ 分量的有效传播常数分别和文献[3]中结果的差的绝对值和衬底折射率的比值,它基本上代表了计算的精度。 $dx$ 、 $dy$ 、 $dz$  分别为格点划分尺度,单位为  $\mu\text{m}$ , $I$  表示的是纯虚数单位。PMLR<sub>max</sub>为 PML 区的最大反射系数。

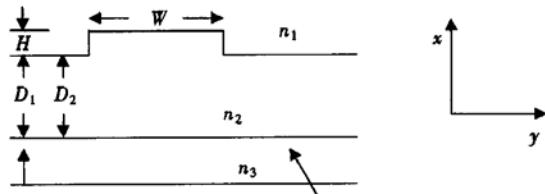


图 1 经典波导结构

Fig. 1 Classical waveguides structure profile

表 1 算法验证表

Table 1 The verification table of the algorithm

$dx$	$dy$	$dz$	NHX/%	NHY/%	$t/\text{s}$	$n_0$	PMLR <sub>max</sub>
0.1	0.1	$0.1 \times I$	< 0.202	< 0.110	$2.67 \times 10^2$	3.44	$10^{-12}$
0.1	0.1	$0.1 \times I$	< 0.197	< 0.131	$1.84 \times 10^2$	3.4	$10^{-12}$
0.1	0.1	$1 \times I$	< 0.0876	< 0.0294	$4.62 \times 10^2$	3.4	$10^{-12}$

### 5.2 SOI 波导结构的模拟

SOI 结构如图 2 所示,其中 $n_1 = 1$ 是空气介质, $n_2 = 3.5$ 是硅介质, $n_3 = 1.45$ 是二氧化硅介质。由于

存在大折射率差的界面,我们采用大光腔结构<sup>[12]</sup>实现了波导结构,来保证传输的单模特性。 $D_1 = 1\mu\text{m}$ 为 SOI 结构底层二氧化硅的厚度(图中结构包含了 PML 边界层折射率的实部,因此从等高线分布图上看,和底层二氧化硅的折射率相同), $D_2 = 4\mu\text{m}$ , $H = 2\mu\text{m}$ , $W = 5\mu\text{m}$ 。工作波长是  $1.55\mu\text{m}$ ,采用不同 PML 和不同传播方向步长对该结构进行了分析。 $dx = 0.1$ , $dy = 0.1$ , $num$  为模式计算中判断收敛的取样点个数,sigma 为判断收敛的标准差。这里采用虚轴传播方法得到了 SOI 波导的基模场分布和基模传播常数(见表 2(a) 和(b))。

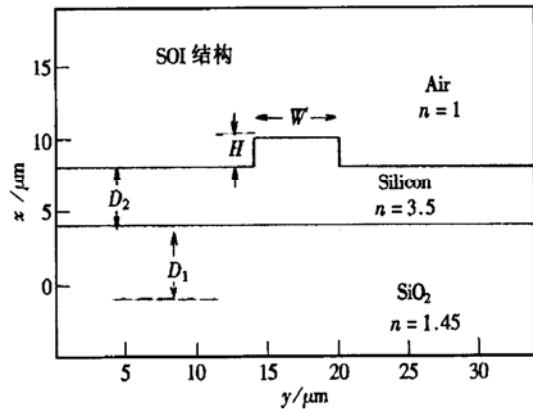


图 2 SOI 结构及其参数

Fig. 2 SOI structure parameters

表 2(a) PML 边界条件

Table 2(a) PML boundary condition

PML( $H_x/H_y$ )	$10^{-13}$	$10^{-8}$	$10^{-5}$	$10^0$
$DZ = 0.2 \times I$	3.496701	3.496701	3.496701	3.496701
	3.496618	3.496618	3.496618	3.496618
$DZ = 0.5 \times I$	3.496579	3.496579	3.496579	3.496579
	3.496511	3.496511	3.496511	3.496511
$DZ = 1 \times I$	3.496457	3.496457	3.496457	3.496457
	3.496393	3.496393	3.496393	3.496393
$DZ = 2 \times I$	3.496368	3.496368	3.496368	3.496368
	3.496301	3.496301	3.496301	3.496301
$DZ = 5 \times I$	3.496251	3.496251	3.496251	3.496251
	3.496182	3.496182	3.496182	3.496182
GMRES	$10^{-13}$	$10^{-13}$	$10^{-13}$	$10^{-13}$
num	6	6	6	6
sigma	0.000010	0.000010	0.000010	0.000010

表 2(b) PML 边界条件  
Table 2(b) PML boundary condition

PML( $H_x/H_y$ )	$10^{-100}$	$10^{-60}$	$10^{-36}$	$10^{-21}$
DZ= 0.2*I	3.496671	3.496701	3.496701	3.496701
	3.496597	3.496618	3.496618	3.496618
DZ= 0.5*I	3.496574	3.496579	3.496579	3.496579
	3.496507	3.496511	3.496511	3.496511
DZ= 1*I	3.496454	3.496457	3.496457	3.496457
	3.496389	3.496393	3.496393	3.496393
DZ= 2*I	3.496368	3.496368	3.496368	3.496368
	3.496301	3.496301	3.496301	3.496301
DZ= 5*I	3.496240	3.496251	3.496251	3.496251
	3.496172	3.496182	3.496182	3.496182
GM RES	$10^{-13}$	$10^{-13}$	$10^{-13}$	$10^{-13}$
num	8	6	6	6
sigma	$5 \times 10^{-6}$	0.000010	0.000010	0.000010

从图 3 中可以看出, TE、TM 的基模形状基本相同, 它们的能量分布和总能量也基本相同, 基模的有效传播常数相差约 0.00007, 基本可以忽略不计。所以今后可采用更加简化的办法来处理 SOI 大光腔结构。计算平台是在 128M 内存、PIII 的计算机上。

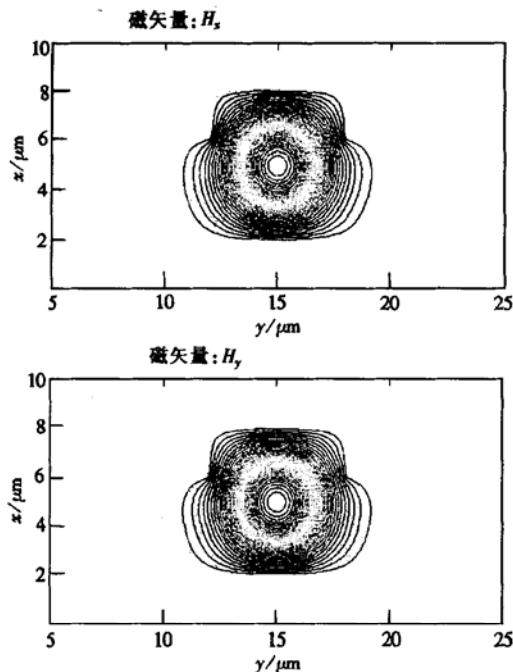


图 3  $H_x$  和  $H_y$  的基模模式图

Fig. 3 The base mode profile of  $H_x$  and  $H_y$  fields

实现的。操作系统是 Windows98SE 版。典型计算时间 761.54s, 对于三维的 BPM 方法是相当快的, 这种方法基本可以满足用户人机交互的时间要求。同

样, 还可以通过标准的正交化方法求出更高阶的模式, 求出所有感兴趣的高阶模的模场分布和相应的传播常数, 再通过更为简单的分析方法来处理。这种思路尤其适合 MMI 结构的分析。不过, 不同偏振波的传播常数毕竟有所不同, 当传播距离很长时, 只满足单模条件的最低要求已经不够了, 还应考虑要在保证单模条件的前提下, 进行深法刻蚀, 尽可能保持波导的对称性, 也就是要保证不同偏振传播常数的差尽可能小。

## 6 总结

采用 PML 边条件以及 C-N 差分格式, 以 ADI 和迭代相结合的方法较为精确的得到了 SOI 大光腔结构的基模传播常数。从计算的结果可以看出该结构的基模传播常数对于偏振不敏感。大约在小数点后的第五位才发生变化。所以, SOI 大光腔结构非常适合通讯中对光开关要求。从实际的模拟计算中可以得到: 模拟结果与 PML 边条件的设置不是十分敏感, 采用对三对角稀疏矩阵直接求逆和最小残差法有效的结合, 既大大节省了计算时间, 又有效地保证了计算精度。

## 附录: PML 原理

以二维结构为例, 采用 TE 波的 Helmholtz 方程  $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\Psi + \frac{n_p^2 - \omega^2}{c^2}\Psi = 0$ 。在 PML 区内,

$$\frac{1}{1 - j\sigma_x / (\omega\epsilon_0 n_p^2)} \times \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{1 - j\sigma_x / (\omega\epsilon_0 n_p^2)} \times \frac{\partial\Psi}{\partial x} \right] + \frac{1}{1 - j\sigma_z / (\omega\epsilon_0 n_p^2)} \times \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{1 - j\sigma_z / (\omega\epsilon_0 n_p^2)} \times \frac{\partial\Psi}{\partial z} \right] + \frac{n_p^2 - \omega^2}{c^2}\Psi = 0$$

可以看出来 PML 介质是把上面的 Helmholtz 方程通过一个各向异性的复变换得到的。这种人工介质的一个特点是, 它可以精确的匹配计算窗口的所有发散波。

$$\Psi_1 = \exp(-jk_{x1}x - jk_{z1}z) + R \exp(jk_{x1}x - jk_{z1}z)$$

$$\Psi_2 = T \exp(-jk_{x2} - jk_{z2}z)$$

$$k_{xi} = (1 - j\sigma_x / (\omega\epsilon_0 n_p^2)) n_p k \cos\theta_i$$

$$k_{zi} = (1 - j\sigma_z / (\omega\epsilon_0 n_p^2)) n_p k \sin\theta_i$$

$$R = \frac{\cos\theta_1 - \cos\theta_2}{\cos\theta_1 + \cos\theta_2}$$

由连续条件:

$$(1 - j\sigma_{z1}/(\omega_0 n_p^2)) n_p k \sin \theta_1 = (1 - j\sigma_{z2}/(\omega_0 n_p^2)) \times n_p k \sin \theta_2$$

如果  $\sigma_{z1} = \sigma_{z2}$ , 就可以有  $R = 0$ . 在 PML 区中的波可以写为:

$$\Psi_2 = \exp(-jn_p k(x \cos \theta + z \sin \theta)) \times \exp(-\sigma_{z2} n_p^{-1} \cos(\theta \sqrt{\mu_0/\epsilon_0} x))$$

PML 边界层的最外面由一全反射层包围作为边界条件.

对于频谱很窄且小角度偏离传播方向的波, TBC 边界条件工作得较好. PML 有很强的适应性, 非常适合于大角度以及频谱范围较宽的波传播的模拟, 也很适合对多模波导的模拟.

## 参考文献

- [1] Jin G H, Harari J, Vilcot J P, et al. An improved time-domain beam propagation method for integrated optics components. *IEEE Photon Technol Lett*, 1997, 9: 348
- [2] Ma F. Slowly varying envelope simulation of optical waves in time domain with transparent and absorbing boundary conditions. *J Lightwave Technol*, 1997, 15(10): 1974
- [3] Hsueh Yuli, Yang Minchuan, Chang Hungchun. Three-dimensional noniterative full-vectorial beam propagation method based on the alteration direction implicit method. *Lightwave Technol*, 1999, 17(11): 2389
- [4] Hadley G R. Transparent boundary condition for the beam propagation method. *IEEE Photon Technol Lett*, 1996, 8(5): 649
- [5] Vassallo C, Van der Keur J M. Comparison of a few transparent boundary conditions for finite-difference optical mode-solvers. *J Lightwave Technol*, 1997, 15(2): 379
- [6] Vassallo C, Van der Keur J M. Highly efficient transparent boundary conditions for finite difference beam propagation method at order four. *J Lightwave Technol*, 1997, 15(10): 1958
- [7] Huang W P, Xu C L, Yokoyama K. The perfectly matched layer (PML) boundary condition for the beam propagation method. *IEEE Photon Technol Lett*, 1996, 8(5): 649
- [8] Dhiou YihPeng, Chang Hungchun. Complementary operators method as the absorbing boundary condition for the beam propagation method. *IEEE Photon Technol Lett*, 1998, 10(7): 976
- [9] Law C T, Zhang X. Concurrent complementary operator boundary conditions for optical beam propagation. *IEEE Photon Technol Lett*, 2000, 12(1): 56
- [10] Yevick D, Bardyszewski W. Correspondence of variational finite-difference (relaxation) and imaginary-distance propagation methods for modal analysis. *Opt Lett*, 1992, 17(5): 329
- [11] Xu C L, Huang W P, Chaudhuri S K. Efficient and accurate vector mode calculations by beam propagation method. *J Lightwave Technol*, 1993, 11(7): 1209
- [12] Wei Hongzhen, Yu Jinzhong, Liu Zhongli, et al. SOI-based 3dB MMI splitter. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2000, 21(11): 1055

## Beam Propagation Method and Its Application in SOI Structures\*

Zhang Xiaofeng, Yu Jinzhong, Wang Qiming and Wei Hongzhen

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

**Abstract:** A fast and accurate ADI-BPM program is implemented to simulate the optical transmission at different polarizations. Influence of the selection of PML boundary profile on the base mode field distribution and the base mode propagation constant is investigated. The base mode propagation constant at the different polarizations for the SOI structure waveguides is given.

**Key words:** BPM; ADI; PML; SOI; opto-switches; imaginary distance; GMRES

**PACC:** 4200

**Article ID:** 0253-4177(2002)02-0169-05

\* Project supported by National Natural Science Foundation of China (Nos. 69896260 and 69990540)

Zhang Xiaofeng male, was born in 1976. He is currently pursuing his master degree. His interests are in integrated optoelectronics devices.

Received 29 March 2001, revised manuscript received 29 June 2001

© 2002 The Chinese Institute of Electronics