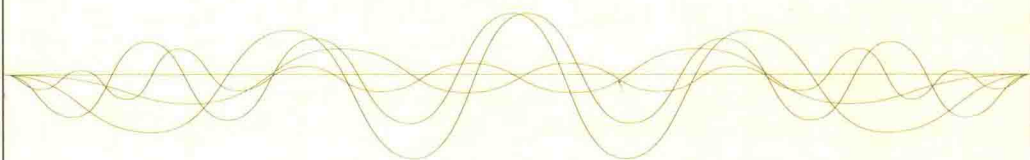


Numerical Computation of Light Waves
in Periodic Structures



周期结构中 光波的数值计算

袁利军 著



西南财经大学出版社

重庆市基础与前沿计划（一般）项目cstc2016jcyjA0491
重庆市教育委员会科学技术研究项目KJ1706155

周期结构中 光波的数值计算

Numerical Computation of Light Waves
in Periodic Structures

袁利军 著



西南财经大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

周期结构中光波的数值计算/袁利军著. —成都:西南财经大学出版社,
2017. 6

ISBN 978 - 7 - 5504 - 2941 - 3

I. ①周… II. ①袁… III. ①光—传播—数值计算 IV. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 088801 号

周期结构中光波的数值计算

ZHOUQI JIEGOU ZHONG GUANGBO DE SHUZHJ JISUAN

袁利军 著

责任编辑:何春梅

责任校对:金欣蕾

封面设计:墨创文化

责任印制:封俊川

出版发行	西南财经大学出版社(四川省成都市光华村街 55 号)
网 址	http://www.bookej.com
电子邮件	bookej@foxmail.com
邮政编码	610074
电 话	028 - 87353785 87352368
照 排	四川胜翔数码印务设计有限公司
印 刷	四川五洲彩印有限责任公司
成品尺寸	165mm × 230mm
印 张	11
插 页	8
字 数	150 千字
版 次	2017 年 6 月第 1 版
印 次	2017 年 6 月第 1 次印刷
书 号	ISBN 978 - 7 - 5504 - 2941 - 3
定 价	68.00 元



1. 版权所有,翻印必究。
2. 如有印刷、装订等差错,可向本社营销部调换。

前 言

人造周期电介质光学结构具有控制光波传播的能力，是近年来研究的一个重要内容。周期光学结构被称为光子晶体。光子晶体最重要的一个性质是存在“光子带隙”，即频率在某个特定区间的光波不能在周期结构中传播。光子晶体的“光子带隙”与半导体中“电子带隙”类似，所以光子晶体为光子计算机的研发提供了最基本的理论。此外，基于光子晶体的“光子带隙”，可以设计出很多重要的光学元器件，例如：光子晶体光纤、低阈值激光器、无损耗弯曲光路和反射镜、低功率非线性开关以及频率滤波器等。光子晶体如此重要，甚至有人认为它带来的技术变革和影响可以与当年的半导体相提并论。

三维光子晶体可以同时三个方向上控制光波的传播。但是，微米级的三维光子晶体的制备非常困难。在实际应用中，人们更加关注光子晶体平板结构的研究。光子晶体平板是一种在垂直方向上厚度有限，在另外两个方向上周期的结构。光子晶体平板也可以同时三个方向上控制光波的传播：在垂直方向上，通过全反射控制；在两个周期方向上，通过“光子带隙”控制。虽然光子晶体平板控制光波的能力不如三维光子晶体，但是它非常容易制备，是构成集成光路的基本元件。

数值模拟光波在介质中的传播是一个非常热门的研究方向。有很多学者做出了杰出的贡献。研究方法主要包括频率域中的有限元法、有限差分法、模式展开法等，以及时域中的时域差分法等。计算数学领域的研究者比较倾向于传统的有限元法等方法，而光学领域的研究者更加喜欢用简单的时域差分法，主要原因是有限元法对光学领域的研究者来说太复杂了。目前这些方法在模拟周期结构时都存在一些困难，特别是在处理周期边界条件时具有很大困难，而且总的计算量太大，精度不高。

对于周期结构，利用周期性可以开发快速算法。我自进入硕士研究生阶段，一直致力于开发各种周期光学结构的快速算法。本书集合了我在博士期间对光子晶体平板波导引导模式的计算问题、有限光子晶体平板的散射问题和交叉光栅散射问题所做的工作。本书通过构造电磁场在单位区域内的解析解，避免区域内部的离散，从而减少未知量的个数，而且精度非常高，编程也比较简单。

要掌握本书中的知识，需要具备一些基本的计算数学、偏微分方程数值解和光学的知识。本书可作为广大从事麦克斯韦方程组数值解的研究者和光学数值模拟的研究者的参考书籍，以及计算数学专业高年级本科学生和研究生学习资料。

本书的研究成果主要在我的导师——香港城市大学陆雅言教授的指导下完成，在此表示衷心感谢。陆雅言教授不仅是我的授业恩师，也是人生道路上的导师。

本书能顺利完成，特别要感谢我的妻子谢文艳女士。她无私的支持和爱是我完成本书的动力。还要感谢我的儿子带来的无限欢乐。

最后，要感谢重庆市基础与前沿计划（一般）项目 cstc2016jcyjA0491 和重庆市教育委员会科学技术研究项目 KJ1706155 的大力支持。

由于作者水平有限，撰写仓促，书中难免存在错误和不足之处，敬请读者批评指正。

袁利军

2017 年 2 月

目 录

1 麦克斯韦方程组 / 1

1.1 基本方程 / 1

1.2 电磁场的边界条件 / 6

1.3 线性无耗散均匀介质中的麦克斯韦方程组 / 7

1.4 二维和一维结构中麦克斯韦方程组的简化 / 8

1.4.1 二维结构 / 8

1.4.2 一维结构 / 11

1.5 线性均匀介质中的解 / 12

1.5.1 平面波解 / 12

1.5.2 柱面波解 / 14

1.6 能量 / 17

1.7 本章小结 / 19

2 平板波导结构中的解 / 21

2.1 麦克斯韦方程组在平板波导结构中的解 / 22

2.1.1 横电波解 / 23

2.1.2 横磁波解 / 27

2.2 垂直模式 / 28

2.2.1 横电波垂直模式 / 29

2.2.2 横磁波垂直模式 / 33

2.2.3 引导模式的正交关系 / 36

2.3 完美匹配层 / 36

2.3.1 基本原理 / 37

2.3.2 厚度有限的完美匹配层 / 41

2.3.3 用完美匹配层截断无穷区间 / 42

2.4 三点四阶有限差分格式 / 44

2.4.1 界面条件 / 46

2.4.2 横电波垂直模式的差分格式 / 47

2.4.3 横磁波垂直模式的差分格式 / 56

2.4.4 数值实验 / 59

2.5 本章小结 / 61

3 光子晶体平板散射问题的数值计算 / 62

3.1 已有的数值计算方法 / 64

3.2 散射问题的描述 / 67

3.2.1 入射波 / 68

3.2.2 反射波和透射波 / 69

3.2.3 边界条件 / 72

3.3	算子递推法 /	76
3.3.1	算子的定义 /	76
3.3.2	DtN 算子及递推格式 /	79
3.4	算子的垂直模式表示 /	82
3.5	正常子区域 DtN 算子的构造 /	86
3.6	数值实验 /	93
3.7	降维技术 /	99
3.7.1	垂直模式选择法 /	100
3.7.2	数值算例 /	103
3.8	本章小结 /	104
4	光子晶体平板波导特征值问题的数值计算 /	106
4.1	已有的数值计算方法 /	107
4.2	问题描述 /	108
4.3	线性特征值问题 /	111
4.4	非线性特征值问题 /	113
4.5	数值实验 /	118
4.6	本章小结 /	121
5	交叉光栅散射问题的数值计算 /	122
5.1	已有的数值计算方法 /	123
5.2	瑞利展开 /	124

5.3 光栅层的特征模式 / 128

5.3.1 特征值问题的描述 / 129

5.3.2 DtN 算子法 / 132

5.3.3 DtN 算子的构造 / 134

5.4 最小二乘法 / 138

5.5 数值实验 / 142

5.6 本章小结 / 151

参考文献 / 152

后 记 / 169

1 麦克斯韦方程组

麦克斯韦方程组是电磁场理论的核心，描述了电场和磁场之间的相互转化关系，以及电磁场与电荷、电流之间的关系。从麦克斯韦方程组出发可以推导出电磁波的存在，而光波就是特定频率范围内的电磁波，所以要研究光波在介质中的传播就必须从麦克斯韦方程组出发。本章主要介绍麦克斯韦方程组的基本知识。第一节介绍了麦克斯韦方程组的基本方程，第二节介绍了电磁场在不同介质界面上的边界条件，第三节和第四节分别介绍麦克斯韦方程组在均匀介质以及二维、一维结构中的简化，第五节介绍均匀介质中麦克斯韦方程组的平面波解和柱面波解，第六节介绍了光波的能量。

1.1 基本方程

光波在介质中的传播满足麦克斯韦方程组。在非磁性介质中，时域麦克斯韦方程组的微分方程形式可写为^[1-3]

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (1.1a)$$

$$\nabla \times \tilde{\mathbf{H}} = \frac{\partial \tilde{\mathbf{D}}}{\partial t} + \tilde{\mathbf{J}}_e \quad (1.1b)$$

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{D}} = \tilde{\rho} \quad (1.1c)$$

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{H}} = 0 \quad (1.1d)$$

其中, 矢量 $\tilde{\mathbf{E}}$ 是电场强度, 单位为伏特每米 (V/m); 矢量 $\tilde{\mathbf{D}}$ 为电位移矢量, 单位为库伦每平方米 (C/m²); 矢量 $\tilde{\mathbf{H}}$ 为磁场强度, 单位为安培每米 (A/m)。

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} (\text{Ns}^2/\text{C}^2)$$

μ_0 为真空磁导率; $\tilde{\mathbf{J}}_e$ 为传导电流密度, 单位为安培每平方米 (A/m²); 标量 $\tilde{\rho}$ 为自由电荷密度。由于电场强度 $\tilde{\mathbf{E}}$, 磁场强度 $\tilde{\mathbf{H}}$ 和电位移矢量 $\tilde{\mathbf{D}}$ 都是三维向量, 方程组 (1.1) 共含有 11 个未知量, 但是只有 8 个方程, 而且这 8 个方程并不是相互独立的。例如方程式 (1.1d) 可由方程式 (1.1a) 求散度得到, 所以只有 7 个方程是相互独立的。要求解上述方程组还需要 4 个方程。

从电位移矢量 $\tilde{\mathbf{D}}$ 与电场强度 $\tilde{\mathbf{E}}$ 的物态关系可以得到另外 3 个条件。电位移矢量 $\tilde{\mathbf{D}}$ 可以分为电场强度 $\tilde{\mathbf{E}}$ 的非线性和线性部分, 其方程分别为方程 (1.2)、(1.3):

$$\tilde{\mathbf{D}} = \tilde{\mathbf{D}}^{(1)} + \varepsilon_0 \tilde{\mathbf{P}}^{(NL)} \quad (1.2)$$

$$\tilde{\mathbf{D}}^{(1)} = \varepsilon_0 (1 + \chi^{(1)}) \tilde{\mathbf{E}} \quad (1.3)$$

其中, $\chi^{(1)}$ 为线性电极化率, 其在各向异性介质中是一个张量, 在各向同性介质中退化为一个标量。该标量为:

$$\varepsilon_0 = 8.854\,19 \times 10^{-12} (\text{C}^2/\text{Nm}^2)$$

ε_0 为真空中的介电常数。非线性极化强度 $\tilde{\mathbf{P}}^{(NL)}$ 可展开成电场强度 $\tilde{\mathbf{E}}$ 的高次幂:

$$\tilde{\mathbf{P}}^{(NL)} = \chi^{(2)} : \tilde{\mathbf{E}}\tilde{\mathbf{E}} + \chi^{(3)} : \tilde{\mathbf{E}}\tilde{\mathbf{E}}\tilde{\mathbf{E}} + \dots$$

其中, $\chi^{(2)}$ 为二阶非线性电极化率, 是一个三阶张量; $\chi^{(3)}$ 是三阶非线性电极化率, 是一个四阶张量; 符号 “:” 与 “ $\vdots$ ” 分别表示三阶与四阶张量的乘法运算。在线性介质中所有的非线性电极化率都为零, 非线性极化强度也为零。

最后一个条件可由传导电流密度 $\tilde{\mathbf{J}}_c$ 与电场强度 $\tilde{\mathbf{E}}$ 的物态关系给出:

$$\tilde{\mathbf{J}}_c = \sigma \tilde{\mathbf{E}} \quad (1.4)$$

其中, σ 为电导率, 是常数且只与介质有关。对于绝缘体 (即无耗散介质), 有 $\sigma = 0$ 。对方程式 (1.1b) 求散度, 可得传导电流密度 $\tilde{\mathbf{J}}_c$ 与电荷密度 $\tilde{\rho}$ 满足方程 $\nabla \cdot \tilde{\mathbf{J}}_c + \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} = 0$ 。

上述方程表示电荷是守恒的。完整的麦克斯韦方程组包含方程式 (1.1)、式 (1.2) 和式 (1.4), 共有 11 个独立的方程和未知量。在某些特殊的介质中, 麦克斯韦方程组可以进行简化。

在各向同性、非磁的线性介质中, 非线性电极化率为零。这时方程式 (1.1b) 可简化为

$$\nabla \times \tilde{\mathbf{H}} = \varepsilon_0 (1 + \chi^{(1)}) \frac{\partial \tilde{\mathbf{E}}}{\partial t} + \sigma \tilde{\mathbf{E}} \quad (1.5)$$

方程式 (1.1c) 可由方程式 (1.5) 求散度得到。

通过傅里叶变换, 时域麦克斯韦方程组可以转化为频率域麦克斯韦方程组。有时, 在频率域中求解麦克斯韦方程组相对简单。假设单频率

光波关于时间的依赖为 $e^{-i\omega t}$ ，则频率域中的量与时域中的量的关系为

$$\tilde{\mathbf{E}} = \text{Re}\{\mathbf{E}e^{-i\omega t}\}, \quad \tilde{\mathbf{H}} = \text{Re}\{\mathbf{H}e^{-i\omega t}\} \quad (1.6)$$

$$\tilde{\mathbf{D}} = \text{Re}\{\mathbf{D}e^{-i\omega t}\}, \quad \tilde{\rho} = \text{Re}\{\rho e^{-i\omega t}\} \quad (1.7)$$

其中, $\omega = 2\pi f$ 是角频率, f 是频率, 单位为赫兹 (Hz)。可见光的频率在 10^{14} 赫兹左右, 对应波长在 10^{-6} 米左右。将上述关系应用于方程式 (1.1a)、式 (1.5)、式 (1.1c) 与式 (1.1d), 从而得到频率域中的线性麦克斯韦方程组为

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu_0\mathbf{H} \quad (1.8a)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon_r\mathbf{E} \quad (1.8b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (1.8c)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \quad (1.8d)$$

其中,

$$\varepsilon_r = 1 + \chi^{(1)} + i \frac{\sigma}{\omega\mu_0}$$

ε_r 为相对介电常数。

在无耗散介质中有 $\sigma = \rho = 0$, 此时 ε_r 为实数, 且

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0\varepsilon_r\mathbf{E} \quad (1.9)$$

真空中 $\varepsilon_r = 1$ 。为方便起见, 将磁场进行无量纲化处理, 即在式 (1.8)

中用 $\sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}\mathbf{H}$ 代替 $\mathbf{H}$, 从而得到无量纲线性麦克斯韦方程组:

$$\nabla \times \mathbf{E} = ik_0\mathbf{H} \quad (1.10a)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -ik_0\varepsilon_r\mathbf{E} \quad (1.10b)$$

$$\nabla \cdot (\varepsilon_r\mathbf{E}) = 0 \quad (1.10c)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \quad (1.10d)$$

其中,

$$k_0 = \frac{\omega}{c}$$

k_0 为真空中波数, c 为真空中光速, 且

$$c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}}$$

除特别指出外, 本书后面部分所说的麦克斯韦方程组都是指方程组 (1.10)。

三维空间中, 电场强度 $\mathbf{E}$ 和磁场强度 $\mathbf{H}$ 都是含有三个分量的向量, 即

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{bmatrix} H_x \\ H_y \\ H_z \end{bmatrix}$$

在各向同性、非磁的、绝缘介质中, 这六个分量只有 2 个分量是独立的。例如, 电场强度的 x 与 y 分量是独立的, 因为电场强度的 z 分量可由式 (1.10c) 得到, 磁场强度可由式 (1.10a) 得到。所以在方程组 (1.10) 包含的 8 个方程式中只有 2 个是相互独立的。本书主要研究频率域中的麦克斯韦方程组的数值解。

1.2 电磁场的边界条件

实际应用时, 需要考虑光波在不同介质中的传播。在不同介质的交界面上, 由于介质的突然变化, 电场与磁场也会发生突变。所以需要知道界面两侧的电场与磁场有何关系。对于非磁性材料, 磁场在界面上是连续的。电场分量中与界面相切的分量都是连续的, 与界面垂直的分量是不连续的。但是, 电位移矢量与界面垂直的分量是连续的。设界面为 Γ , ν 是界面的单位法向量, 则电场与磁场在界面上的边界条件为:

$$\nu \times (\tilde{E}_1 - \tilde{E}_2) = \vec{0}$$

$$\nu \times (\tilde{H}_1 - \tilde{H}_2) = \vec{0}$$

$$\nu \cdot (\tilde{D}_1 - \tilde{D}_2) = 0$$

$$\nu \cdot (\tilde{H}_1 - \tilde{H}_2) = 0$$

其中, 下标“1”和“2”分别表示各种场在界面两边的极限值, $\vec{0}$ 表示零向量。频率域中, 界面上的边界条件为:

$$\nu \times (E_1 - E_2) = \vec{0} \quad (1.11a)$$

$$\nu \times (H_1 - H_2) = \vec{0} \quad (1.11b)$$

$$\nu \cdot (D_1 - D_2) = 0 \quad (1.11c)$$

$$\nu \cdot (H_1 - H_2) = 0 \quad (1.11d)$$

其中, ε_1 和 ε_2 分别表示界面两边介质的相对介电常数。

1.3 线性无耗散均匀介质中的麦克斯韦方程组

一般情况下, 相对介电函数 ε_r 是空间变量的函数。但是在均匀介质中, ε_r 是一个常数。这时麦克斯韦方程组 (1.10) 可简化为相互独立的三维亥姆霍兹方程。对方程式 (1.10a) 的左右两边求旋度, 得

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = ik_0 \nabla \times \mathbf{H} \quad (1.12)$$

将方程式 (1.10b) 代入上式, 有

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = k_0^2 \varepsilon_r \mathbf{E} \quad (1.13)$$

另有,

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \Delta \mathbf{E} \quad (1.14)$$

在线性无耗散均匀介质中, 方程式 (1.10c) 隐含

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (1.15)$$

将方程式 (1.14) 和式 (1.15) 带入式 (1.13) 中, 得亥姆霍兹方程:

$$\Delta \mathbf{E} + k_0^2 \varepsilon_r \mathbf{E} = 0 \quad (1.16)$$

同理, 磁场强度 $\mathbf{H}$ 也满足亥姆霍兹方程:

$$\Delta \mathbf{H} + k_0^2 \varepsilon_r \mathbf{H} = 0 \quad (1.17)$$

均匀介质中的时域线性麦克斯韦方程组可以简化为三维波动方程:

$$\frac{\varepsilon_r}{c^2} \frac{\partial^2 \tilde{\mathbf{E}}}{\partial t^2} = \Delta \tilde{\mathbf{E}} \quad (1.18)$$