

УДК 535.42

## ЛОКАЛІЗОВАНІ МОДИ ГРАДІЄНТНИХ ПЛАНАРНИХ ХВИЛЕВОДІВ. АНАЛОГІЇ В КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ

В. Фітьо<sup>1</sup>, В. Ромах<sup>1</sup>, Я. Бобицький<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Національний університет “Львівська політехніка”,  
вул. С. Бандери, 12, 79013, Львів, Україна.  
*polyana@polynet.lviv.ua*

<sup>2</sup>Інститут техніки Жешувського університету,  
вул. Рейтана, 16б, 35959, Жешув, Польща.  
*bobitski@polynet.lviv.ua*

Розроблено числовий метод для пошуку сталих поширення локалізованих мод планарних симетричних хвилеводів, а також розв’язку стаціонарного рівняння Шредінгера. Метод ґрунтується на перетворенні Фур’є хвильового рівняння, унаслідок чого отримано інтегральне рівняння, у якому інтеграл замінено підсумовуванням. Остаточно отримано задачу лінійної алгебри на власні числа та власні вектори. Метод перевірений на багатьох прикладах.

*Ключові слова:* хвильове рівняння, планарний хвилевод, перетворення Фур’є, рівняння Шредінгера, згортка.

Для визначення сталих поширення локалізованих хвилеводних мод градієнтних планарних хвилеводів використовують низку наближених методів [1], які вперше застосовано для аналізу задач квантової механіки. Зразок найпростішого планарного симетричного хвилеводу показаний на рис. 1.

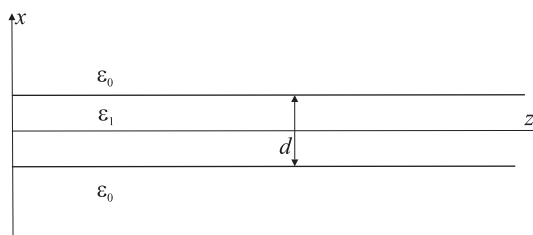


Рис. 1. Зображення планарного симетричного хвилеводу з двома фіксованими значеннями діелектричної проникності.

Якщо у цьому хвилеводі  $\varepsilon_1 > \varepsilon_0$ , то можливе поширення локалізованої хвилеводної моди зі сталою поширення  $\beta$ , причому розподіл поля можна описати такою функцією:

$$E(x, z) = E(x) \exp(-i\beta z). \quad (1)$$

Однак навіть у цьому найпростішому випадку пошук сталої поширення зводиться до розв'язування трансцендентного алгебричного рівняння. Задача суттєво ускладнюється, якщо діелектрична проникність змінюється за складною функцією вздовж осі  $x$ , причому

$$\varepsilon(x) = \varepsilon(-x). \quad (2)$$

Відомі методи пошуку сталих поширення та полів хвилеводних мод є здебільшого аналітичними, достатньо громіздкими, а точність – низька. Також відомі методи розроблені для хвиль ТЕ поляризації, коли вектор напруженості електричної складової електромагнітної хвилі напрямлений уздовж осі  $y$ . Ці методи розроблені (у квантовій механіці) в ті часи, коли комп'ютерів ще не було або вони були малодоступні. Сучасний стан комп'ютерної техніки та розвиненість програмного забезпечення дає змогу застосовувати числові методи пошуку сталих поширення та полів градієнтних планарних хвилеводів.

Мета нашого дослідження – розробка нового числового методу розв'язування одновимірного хвильового рівняння з використанням перетворення Фур'є.

**Одновимірні хвильові рівняння та їхні Фур'є-образи.** Якщо в хвилеводній моді напруженість електричного поля перпендикулярна до площини  $xz$  (ТЕ поляризація), то хвильове рівняння матиме вигляд:

$$\frac{d^2 E(x)}{dx^2} + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \varepsilon(x) E(x) = \beta^2 E(x). \quad (3)$$

Якщо ж у хвилеводі поширюється хвиля ТМ поляризації, то відповідне хвилеводне рівняння відносно напруженості магнітного поля запишемо так:

$$\frac{d^2 H(x)}{dx^2} - \frac{d \ln \varepsilon(x)}{dx} \frac{dH}{dx} + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \varepsilon(x) H(x) = \beta^2 H(x). \quad (4)$$

Одновимірне стаціонарне рівняння Шредінгера має вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + U(x) \psi(x) = E \psi(x). \quad (5)$$

Досить часто в квантовій механіці використовують збезрозмірене рівняння [2], яке отримують шляхом заміни змінних. Збезрозмірене рівняння (5) виглядатиме так:

$$-\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + U(x) \psi(x) = \varepsilon \psi(x). \quad (5a)$$

Як бачимо, квантове рівняння Шредінгера (5a) за структурою дуже близьке до хвильового рівняння для хвиль ТЕ поляризації (5), причому власні значення цих рівнянь  $\beta^2$  та  $\varepsilon$  більші від нуля.

Функції  $E(x)$ ,  $H(x)$ , що описують поля в локалізованих модах хвилеводів, та  $\psi(x)$ , як розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера, а також їхні перші похідні прямують до нуля, якщо  $x \rightarrow \pm\infty$ . Отже, для цих функцій, їхніх перших та других похідних існує

перетворення Фур'є. Напишемо, наприклад, відповідні співвідношення для  $E(x)$ . Фур'є-образи для  $E(x)$ , першої та другої похідної  $E(x)$  такі:

$$E(u) = \int_{-\infty}^{\infty} E(x) \exp(-i2\pi ux) dx, \quad (6)$$

$$i2\pi u E(u) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE(x)}{dx} \exp(-i2\pi ux) dx, \quad (6a)$$

$$-(2\pi u)^2 E(u) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 E(x)}{dx^2} \exp(-i2\pi ux) dx. \quad (6b)$$

Крім того, для функцій, відносно яких існує перетворення Фур'є, тобто  $F\{g(x)\} = G(u)$ ,  $F\{h(x)\} = H(u)$ , справджується ще таке співвідношення:

$$F\{g(x)h(x)\} = \int_{-\infty}^{\infty} G(u-v)H(v)dv, \quad (7)$$

де  $F\{\dots\}$  – перетворення Фур'є. Вираз (7) виражає зміст теореми згортки.

Розглянемо перетворення Фур'є правих і лівих частин рівнянь (3), (4), (5a), у підсумку отримаємо

$$-4\pi^2 u^2 E(u) + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(u-v)E(v)dv = \beta^2 E(u), \quad (8)$$

$$-4\pi^2 u^2 H(u) - 2i\pi u \int_{-\infty}^{\infty} F\left\{\frac{d \ln \varepsilon(x)}{dx}\right\} v H(v) dv + \quad (9)$$

$$+ \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(u-v)H(v)dv = \beta^2 H(u),$$

$$4\pi^2 u^2 \Psi(u) + \int_{-\infty}^{\infty} U(u-v)E(v)dv = \varepsilon \Psi(u). \quad (10)$$

Отже, від диференціальних рівнянь (3), (4), (5a) на власні функції та власні числа ми перейшли до інтегральних (8), (9), (10). У цих рівняннях ми можемо інтеграл замінити сумою. Наприклад, у рівняння Шредінгера внаслідок заміни неперервних значень  $u$  і  $v$  на дискретні отримаємо

$$4\pi^2 (s\Delta)^2 \Psi(s\Delta) + \sum_{k=-(N-1)/2}^{(N-1)/2} U(s\Delta - k\Delta) \Psi(k\Delta) \Delta = \varepsilon \Psi(s\Delta), \quad (11)$$

де  $\Delta = u_{\max} / N$ ,  $u_s = s\Delta$ ,  $v_k = k\Delta$ ,  $-(N-1)/2 \leq s, k \leq (N-1)/2$ .

Значення  $N$  потрібно взяти достатньо великим і зручніше непарним.

Запишемо останнє рівняння для всіх дискретних просторових частот  $u_s = s\Delta$ , причому  $s$  змінюється від  $-(N-1)/2$  до  $(N-1)/2$ , тоді сукупність цих рівнянь можна записати у вигляді матричного рівняння, причому  $\varepsilon$  є спільною для всіх  $s$ :

$$(\mathbf{P} + \mathbf{U})\Psi = \varepsilon\Psi, \quad (12)$$

де  $\mathbf{P}$  – діагональна матриця, елементи якої дорівнюють  $4(\pi s \Delta)^2$ ;  $\mathbf{U}$  – квадратна симетрична матриця, елементи якої дорівнюють  $U(s\Delta - k\Delta)$ ;  $\Psi$  – вектор-стовпець, елементи якого дорівнюють  $\psi(s\Delta)$ .

Отже, у кінцевому підсумку задача звелася до задачі на власні числа (енергія) та власні вектори (дискретний Фур'є-образ  $\psi(x)$ ), що відповідає заданому значенню енергії. Ми можемо мати декілька власних значень та відповідних власних векторів. Виконавши обернене дискретне Фур'є-перетворення власного вектора, ми отримаємо розподіл поля  $E(x)$ , чи власну функцію  $\psi(x)$ , також у дискретній формі. Для квантово-механічних задач усі власні числа є в межах потенціальної ями. Якщо ми маємо потенціальну яму скінченної глибини, то точність визначена  $N$  і  $\Delta$ . Якщо потенціальна енергія змінюється від нуля до нескінченності (наприклад  $U = x^2$ ), то в цьому методі ми змушені обмежувати потенціальну енергію, тобто до певного значення вона йде як  $U(x)$ , а далі набуває сталого значення. Очевидно, що в цьому випадку ми можемо визначити найточніше найнижчі рівні енергії. Таке обмеження для планарних хвилеводів не актуальне, оскільки діелектрична проникність є обмеженою у всьому просторі.

У числових розрахунках, результати яких наведені нижче, ми використали найпростіший спосіб заміни інтегрування на підсумовування, що привело до необхідності виконувати обчислення за великих значень  $N$ , щоб забезпечити високу точність. Якщо ми застосуємо точніші методи заміни інтегрування підсумовуванням, наприклад, правило Сімпсона чи правило Уеддла [4], то можемо зменшити  $N$  для досягнення тієї самої точності, а водночас і тривалість розрахунку, або за того самого  $N$  суттєво підвищити точність.

**Приклади числового моделювання. Приклад 1.** Розраховані сталі поширення локалізованих хвилеводних мод для симетричного хвилеводу відповідно до рис. 1 з такими параметрами:  $\varepsilon_0 = 1,96$ ,  $\varepsilon_1 = 2,25$ ,  $d = 2,25$  мкм,  $\lambda = 1$  мкм і такими параметрами числового процесу:  $N = 401$ ,  $u_{\max} = N\Delta = 25$  мкм<sup>-1</sup>. У цьому хвилеводі можуть поширюватися три моди:  $\beta_1 = 9,370145$  мкм<sup>-1</sup>,  $\beta_2 = 9,208890$  мкм<sup>-1</sup>,  $\beta_3 = 8,957255$  мкм<sup>-1</sup>. Сталі поширення, розраховані традиційним методом [3], такі:  $\beta_1 = 9,370145$  мкм<sup>-1</sup>,  $\beta_2 = 9,208891$  мкм<sup>-1</sup>,  $\beta_3 = 8,957256$  мкм<sup>-1</sup>. Бачимо добрий збіг числових значень сталих поширення, отриманих двома методами.

**Приклад 2.** Планарний симетричний хвилевод, для якого діелектрична проникність змінюється вздовж осі  $x$ , згідно з виразом:  $\varepsilon(x) = 1,96 + 2,25 \exp\left[-\pi(x/1,25)^2\right]$ ,  $x$  вимірюють у мікрометрах. Такий хвилевод має дві локалізовані моди з такими сталими поширення:  $\beta_1 = 9,4186648$  мкм<sup>-1</sup>,  $\beta_2 = 8,8064356$  мкм<sup>-1</sup>. Параметри числового процесу:  $N = 601$ ,  $u_{\max} = 5$  мкм<sup>-1</sup>.

**Приклад 3.** Рівняння Шредінгера згідно з виразом (5а), для якого

$$U = \begin{cases} x^2, & |x| \leq a, \\ a^2, & |x| > a = 5. \end{cases} \quad \text{Параметри числового процесу такі: } N = 501, u_{\max} = 5,01 \text{ мкм}^{-1}.$$

Вигляд потенціальної енергії для такого гармонічного осцилятора, який використовують у цьому числовому методі, показаний на рис. 2.

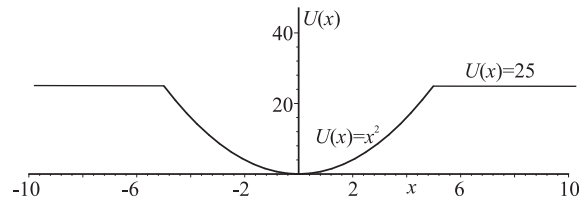


Рис. 2. Залежність потенційної енергії гармонічного осцилятора від координати  $x$  у пропонованому методі.

Унаслідок числового розрахунку отримано 13 власних значень енергії, серед яких:

$$\varepsilon_0 = 1,000000014, \dots, \varepsilon_6 = 13,000000010, \dots, \varepsilon_{12} = 24,99971,$$

що з високою точністю збігається з даними праці [2], де  $\varepsilon_n = 2n + 1$ . На рис. 3 зображено хвильові функції для трьох найнижчих значень енергії. Неперервні криві відповідають точному значенню хвильових функцій, а точки – результатам розрахунку розробленим методом. Бачимо добре накладання точок на неперервні криві.

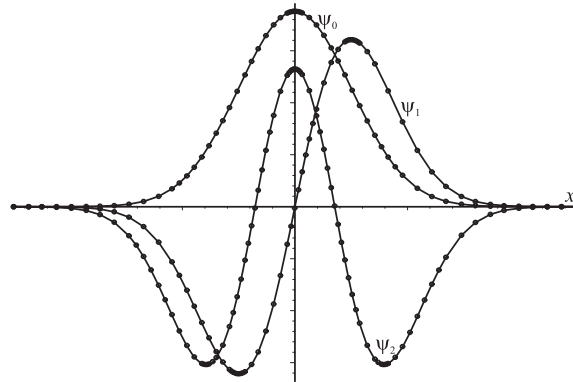


Рис. 3. Хвильові функції (не нормовані) гармонічного осцилятора, що відповідають трьом найнижчим значенням енергії.

**Приклад 4.** Рівняння Шредінгера згідно з виразом (5а), для якого

$$U = \begin{cases} |x|, & |x| \leq a, \\ a, & |x| > a = 16. \end{cases} \quad \text{Параметри числового процесу: } N = 501, u_{\max} = 5,01 \text{ мкм}^{-1}.$$

За таких даних серед найменших 11 власних значень  $\varepsilon$  такі:  $\varepsilon_0 = 1,01879311, \dots$

$\varepsilon_5 = 5,52055983, \dots \varepsilon_{10} = 8,48848676$ . Цю задачу розв'язують точно аналітично [2], причому відповідні точні значення такі:  $\varepsilon_0 = 1,01879297, \dots \varepsilon_5 = 5,52055983, \dots \varepsilon_{10} = 8,48848673$ . Бачимо вражаючий збіг даних, отриманих пропонуваним методом та відомим методом.

**Приклад 5.** Рівняння Шредінгера згідно з виразом (5а), для якого  $U = \begin{cases} x^4, & |x| \leq a, \\ a^4, & |x| > a = 3. \end{cases}$  Параметри числового процесу  $N = 509, u_{\max} = 5,09 \text{ мкм}^{-1}$ . За таких

даних знайдено найменших 11 власних значень  $\varepsilon_n$ , серед яких є такі:

$$\varepsilon_0 = 1,060357758, \dots \varepsilon_5 = 21,23835171, \dots \varepsilon_{10} = 50,24459206.$$

Цю квантову задачу аналітично точно не розв'язувати, тому наближеними методами квантової механіки визначено значення найнижчого рівня енергії:  $\varepsilon_0 \approx 1,156194$  [2]. Тобто наближене значення знайдено з досить великою похибкою.

**Приклад 6.** Перші два наведені приклади стосуються планарних хвилеводів, у яких поширюється хвиля ТЕ поляризації, інші — одновимірного стаціонарного рівняння Шредінгера. В прикладах підібрані такі значення  $\varepsilon(x)$  та  $U(x)$ , для яких легко аналітично знайти Фур'є-образи. Водночас для цих прикладів діелектричної проникності

важко знайти Фур'є-образ  $\frac{d \ln \varepsilon(x)}{dx}$  в аналітичній формі, що необхідно для хвиль ТМ поляризації, проте це можливо зробити для хвилеводу з прикладу 1 (див. рис. 1). Отже, ми можемо виразити похідну від  $\ln \varepsilon(x)$  так:

$$\frac{d \ln \varepsilon(x)}{dx} = \ln(\varepsilon_1 / \varepsilon_0) [\delta(x + d/2) - \delta(x - d/2)], \quad (13)$$

де  $\delta(x)$  – дельта-функція Дірака.

Виконавши Фур'є-перетворення виразу (13), отримаємо

$$F \left\{ \frac{d \ln \varepsilon(x)}{dx} \right\} = 2i \ln(\varepsilon_1 / \varepsilon_0) \sin(\pi u d). \quad (14)$$

Отже, рівняння (9) для заданої зміни  $\varepsilon(x)$  набуде вигляду

$$-4\pi^2 u^2 H(u) + 4\pi \ln(\varepsilon_1 / \varepsilon_0) \int_{-\infty}^{\infty} \sin[\pi d(u-v)] v H(v) dv + \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(u-v) H(v) dv = \beta^2 H(u).$$

Для хвиль ТМ поляризації розраховано сталі поширення локалізованих хвилеводних мод з такими параметрами:  $\varepsilon_0 = 1,96, \varepsilon_1 = 2,25, d = 2,25 \text{ мкм}, \lambda = 1 \text{ мкм}$ , і такими параметрами числового процесу:

$$N = 401, u_{\max} = N\Delta = 25 \text{ мкм}^{-1}.$$

У цьому хвилеводі можуть поширюватися три моди:  $\beta_1 = 9,356815 \text{ мкм}^{-1}, \beta_2 = 9,160410 \text{ мкм}^{-1}, \beta_3 = 8,879432 \text{ мкм}^{-1}$ . Сталі поширення, розраховані традиційним

методом [3], такі:  $\beta_1 = 9,356775 \text{ мкм}^{-1}$ ,  $\beta_2 = 9,160245 \text{ мкм}^{-1}$ ,  $\beta_3 = 8,879127 \text{ мкм}^{-1}$ . Бачимо добру збіжність числових значень сталих поширення, отриманих двома методами, проте дещо гірше, ніж для хвиль ТЕ поляризації. Це погіршення пояснено тим, що у хвильовому рівнянні хвиль ТМ поляризації є ще один член, що вносить додаткову помилку в обчислення. Для підвищення точності потрібно збільшити  $N$  і  $u_{\max}$ .

1. *Marcuse Dietrich*. Light Transmission Optics, Van Nostrand Reinhold Company, New York, 1972. – 520 p.
2. *Вакарчук І.О.* Квантова механіка, видання друге, доповнене, Львівський національний університет імені Івана Франка. Львів, 2004. – 784 с.
3. *Ярив А.* Квантовая электроника, издание второе, пер. с англ. Советское радио, Москва, 1980. – 486 с.
4. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике для научных работников и инженеров, пер. с англ. М.: Наука, 1974. – 832 с.

#### LOCALIZED MODES OF THE GRADIENT PLANAR WAVEGUIDES. ANALOGIES IN THE QUANTUM MECHANICS

**V. Fitio<sup>1</sup>, V. Romakh<sup>1</sup>, Ya. Bobitski<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*Lviv Polytechnic National University,  
S. Bandera Str., 12, UA-79013 Lviv, Ukraine.  
polyana@polynet.lviv.ua*

<sup>2</sup>*Institute of Technology Rzeszow University,  
16b T. Rejtana St., 35959 Rzeszow, Poland.  
bobitski@polynet.lviv.ua*

Numerical method of finding propagation constants of localized modes of the symmetric planar waveguides and solution of the stationary Schrödinger equation is developed. The method is based on Fourier transform of the wave equation and as result is obtained an integral equation, in which the integral is replaced by summation. In of the final case, we obtain of linear algebra problem on the eigenvalues and eigenvectors. The method is tested on many examples.

*Key words:* fourier transforms, wave equation, planar waveguide, Schrödinger equation, convolution.

**ЛОКАЛИЗИРОВАННЫЕ МОДЫ  
ГРАДИЕНТНЫХ ПЛАНАРНЫХ ВОЛНОВОДОВ.  
АНАЛОГИИ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ**

**В. Фітьо<sup>1</sup>, В. Ромах<sup>1</sup>, Я. Бобицький<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*Национальный университет “Львівська політехніка”,  
ул. С. Бандеры, 12, 79013, Львов, Украина.  
polyana@polynet.lviv.ua*

<sup>2</sup>*Институт техники Жешувского университета,  
ул. Рейтана, 166, 35959, Жешув, Польша.  
bobitski@polynet.lviv.ua*

Разработано численный метод поиска постоянных распространения локализованных мод планарных симметричных волноводов, а также решения стационарного уравнения Шредингера. Метод базируется на преобразовании Фурье волнового уравнения, вследствие чего получено интегральное уравнение, в котором интеграл заменен суммированием. Окончательно имеем задачу линейной алгебры на собственные числа и собственные вектора. Метод проверен на многих примерах.

*Ключевые слова:* волновое уравнение, планарный волновод, преобразование Фурье, уравнение Шредингера, свертка.

Стаття надійшла до редколегії 28.04.2011

Прийнята до друку 31.05.2011