

含时 Schrödinger 方程的高阶辛 FDTD 算法研究*

沈晶^{1)2)†} 沙威³⁾ 黄志祥¹⁾ 陈明生²⁾ 吴先良¹⁾

1) (安徽大学计算智能与信号处理教育部重点实验室, 合肥 230039)

2) (合肥师范学院电子信息工程学院, 合肥 230061)

3) (香港大学电机电子工程学院, 香港, 薄扶林道)

(2012 年 2 月 6 日收到; 2012 年 4 月 10 日收到修改稿)

提出了一种新的算法——高阶辛时域有限差分法 (SFDTD(3, 4): symplectic finite-difference time-domain) 求解含时薛定谔方程. 在时间上采用三阶辛积分格式离散, 空间上采用四阶精度的同位差分格式离散, 建立了求解含时薛定谔方程的高阶离散辛框架; 探讨了高阶辛算法的稳定性及数值色散性. 通过理论上的分析及数值算例表明: 当空间采用高阶同位差分格式时, 辛积分可提高算法的稳定度; SFDTD(3, 4) 法和 FDTD(2, 4) 法较传统的 FDTD(2, 2) 法数值色散性明显改善. 对二维量子阱和谐振子的仿真结果表明: SFDTD(3, 4) 法较传统的 FDTD(2, 2) 法及高阶 FDTD(2, 4) 法有着更好的计算精度和收敛性, 且 SFDTD(3, 4) 法能够保持量子系统的能量守恒, 适用于长时间仿真.

关键词: 辛积分, 高阶同位差分, 薛定谔方程, 数值稳定性和色散性

PACS: 02.70.Bf, 42.50.Nn

1 引言

开发精确和高效求解 Schrödinger 方程的数值方法是现代纳米器件建模和优化的重要目标^[1], 而分析大部分纳米器件特性的切入点是确定器件结构的能量本征值和能量本征态. 例如, 弹道电子传输主要取决于导电沟道的横向本征态, 这一点和非平衡格林函数紧密相关^[1], 在微观电子传输中各种有趣的现象, 如谐振隧穿效应^[2]、Fano 谐振^[3]等等, 这些现象取决于特征模的激励以及不同特征模之间的耦合. 因此, 一种准确有效的计算特征态和特征频率的方法在器件物理的设计中起着举足轻重的作用. 此外, 特征模和特征频率的提取可满足量子 CAD 建模的工业需求. FDTD 方法——时域有限差分法, 是求解含时 Schrödinger 方程最常用的

方法之一^[4,5], 但其缺点是无法克服在长时间仿真中产生的色散误差.

大量的物理现象可通过时间演变辛变换的 Hamilton 微分方程描述^[6-8]. 辛算法通过使用不同的时间差分方法保持了 Hamilton 系统向空间全局辛结构. 大量实验已证明辛算法在 Hamilton 系统数值计算中的优势, 该优势在长时间仿真中最为显著. 三阶辛算法已经成功用于求解 Schrödinger 方程: 对于含时 Schrödinger 方程, 一种方法是将其复波函数分成实数部分和虚数部分^[9-11], 另一种方法是将其 Hamilton 系统分成动能算子和势能算子^[11,12]. 而对于稳态 Schrödinger 方程, 如果使用的是广义坐标 (复波函数) 和广义速度 (复波函数的空间导数), 那么, 也可以使用辛算法^[13,14]. 此外, 辛算法亦可用于求解非线性 Schrödinger 方程^[15,16].

本文针对 Schrödinger 方程, 建立了求

* 国家自然科学基金 (批准号: 60931002, 61101064, 61001033)、安徽省高校自然科学研究重点项目 (批准号: KJ2011A242, KJ2011A002)、安徽省杰出青年基金 (批准号: 1108085J01)、安徽省优秀青年人才基金一般项目 (批准号: 2011SQRL130) 和安徽省自然科学基金青年基金 (批准号: 10040606Q51) 资助的课题.

† E-mail: jingvicky1028@yahoo.com.cn

解 Schrödinger 方程的高阶辛 FDTD 算法 — SFDTD(3, 4) 法, 系统地讨论了 SFDTD 法的稳定性及数值色散性.

2 Schrödinger 方程的离散辛框架

2.1 Schrödinger 方程的基本形式

含时 Schrödinger 方程表达式如下:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

其中, ψ 为波函数, \mathbf{r} 和 t 分别为该粒子在量子系统中的位置和时间, m^* 为粒子的质量, $-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2$ 为该系统动能算子, $V(\mathbf{r})$ 为稳态势能, $-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V$ 为 Hamiltonian 算子. 为了避免使用复数, 将波函数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ 分为实数部分和虚数部分, 即

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_R(\mathbf{r}, t) + i\psi_I(\mathbf{r}, t). \quad (2)$$

将 (2) 式代入 (1) 式, 我们可以得到如下对偶的等式:

$$\begin{aligned} & \hbar \frac{\partial \psi_R(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{\partial^2 \psi_I(\mathbf{r}, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_I(\mathbf{r}, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi_I(\mathbf{r}, t)}{\partial z^2} \right] \\ & \quad + V(\mathbf{r}) \psi_I(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & \hbar \frac{\partial \psi_I(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{\partial^2 \psi_R(\mathbf{r}, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_R(\mathbf{r}, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi_R(\mathbf{r}, t)}{\partial z^2} \right] \\ & \quad - V(\mathbf{r}) \psi_R(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (4)$$

波函数的实数部分和虚数部分在第 n 个时间步的离散表达式为

$$\begin{aligned} \psi_R(\mathbf{r}, t) &\approx \psi_R^n(i, j, k) \\ &= \psi_R(i\Delta_x, j\Delta_y, k\Delta_z, n\Delta_t), \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \psi_I(\mathbf{r}, t) &\approx \psi_I^n(i, j, k) \\ &= \psi_I(i\Delta_x, j\Delta_y, k\Delta_z, n\Delta_t), \end{aligned} \quad (6)$$

其中, Δ_x, Δ_y 和 Δ_z 分别为 x, y, z 方向的网格空间步, Δ_t 为时间步, i, j, k 为整数标号. 一阶时间导数可以通过二阶精度的显式中心分离离散. 利用同位差分离散 (3) 式和 (4) 式中的二阶 Laplace 算子, 不

同于 Maxwell 方程中的 Yee 网格^[17,18]. 经离散后, 波函数实部和虚部的迭代表达式为

$$\begin{aligned} & \psi_R^{n+1}(i, j, k) \\ &= \psi_R^n(i, j, k) - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{\hbar}{2m^*} [\psi_I^{n+1/2}(i+1, j, k) \\ & \quad - 2\psi_I^{n+1/2}(i, j, k) + \psi_I^{n+1/2}(i-1, j, k)] \\ & \quad - \frac{\Delta t}{(\Delta y)^2} \frac{\hbar}{2m^*} [\psi_I^{n+1/2}(i, j+1, k) \\ & \quad - 2\psi_I^{n+1/2}(i, j, k) + \psi_I^{n+1/2}(i, j-1, k)] \\ & \quad - \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \frac{\hbar}{2m^*} [\psi_I^{n+1/2}(i, j, k+1) \\ & \quad - 2\psi_I^{n+1/2}(i, j, k) + \psi_I^{n+1/2}(i, j, k-1)] \\ & \quad + \frac{V(i, j, k) \Delta t}{\hbar} \times \psi_I^{n+1/2}(i, j, k), \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} & \psi_I^{n+1/2}(i, j, k) \\ &= \psi_I^{n-1/2}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{\hbar}{2m^*} [\psi_R^n(i+1, j, k) \\ & \quad - 2\psi_R^n(i, j, k) + \psi_R^n(i-1, j, k)] \\ & \quad + \frac{\Delta t}{(\Delta y)^2} \frac{\hbar}{2m^*} [\psi_R^n(i, j+1, k) \\ & \quad - 2\psi_R^n(i, j, k) + \psi_R^n(i, j-1, k)] \\ & \quad + \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \frac{\hbar}{2m^*} [\psi_R^n(i, j, k+1) - 2\psi_R^n(i, j, k) \\ & \quad + \psi_R^n(i, j, k-1)] \\ & \quad - \frac{V(i, j, k) \Delta t}{\hbar} \times \psi_R^n(i, j, k). \end{aligned} \quad (8)$$

2.2 Schrödinger 方程的高阶辛算法

任一点波函数在第 n 个时间步第 l 级步进的离散表达式

$$\psi(i, j, k) = \psi^{n+l/m}(i\Delta_x, j\Delta_y, k\Delta_z, (n + \tau_l)\Delta_t), \quad (9)$$

这里, 每个时间步需要 m 级时间步进, 且第 l 级步进对应的的时间增量为 $\tau_l \Delta_t$.

我们用 q 阶同位差分离散空间二阶导数

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 \psi^{n+l/m}}{\partial \delta^2} \right)_h &= \sum_{r=-q/2}^{q/2} W_r \psi^{n+l/m}(h+r) \\ & \quad + O(\Delta_\delta^{q+1}), \end{aligned} \quad (10)$$

这里, $\delta = x, y, z, h = i, j, k, W_r$ 为空间差分系数, W_r 的取值如表 1 所示.

根据 (3) 式和 (4) 式, Schrödinger 方程可改写成如下矩阵形式:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_I \end{pmatrix} = L \begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_I \end{pmatrix} = (A + B) \begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_I \end{pmatrix}, \quad (11)$$

$$A = \begin{pmatrix} 0 & K \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -K & 0 \end{pmatrix}, \quad (12)$$

$$K = -\frac{\hbar}{2m^*} \left(\frac{\partial}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z^2} \right) + \frac{V}{\hbar}, \quad (13)$$

其中, 当 $v \geq 2$ 时, $A^v = 0$ 且 $B^v = 0$. 很容易证明, (11) 式中的 L 算子具有反对称性, 而且 Schrödinger 方程从 0 时刻到 t 时刻的解析解是 $\exp(tL)$, 为一正交算子. 也就是说, Schrödinger 方程的时间步进本质上旋转了归一化的波函数, 并且完美地保持了量子系统的能量守恒. 我们通过使用 m 级 p 阶辛积分来近似 (11) 式的时间演化矩阵 $\exp(\Delta_t(A + B))$, 即

$$\begin{aligned} & \exp(\Delta_t(A + B)) \\ &= \prod_{l=1}^m \exp(d_l \Delta_t B) \exp(c_l \Delta_t A) + O(\Delta_t^{p+1}) \\ &= \prod_{l=1}^m (1 + d_l \Delta_t B)(1 + c_l \Delta_t A) + O(\Delta_t^{p+1}), \quad (14) \end{aligned}$$

这里, c_l 和 d_l 为辛算子, p 为近似阶数.

表 1 q 阶中心差分系数 (Yee 网格)

阶数 (q)	W_{-2}	W_{-1}	W_0	W_1	W_2
2		1	-2	1	
4	-1/12	4/3	-5/2	4/3	-1/12

常见辛算子满足时间可逆或者对称条件 [9,19,20]. 本文中, 选择 $m = 3$, $p = 3$, 我们构造出三步三阶的显式辛算法 [19], 即 SFDTD(3, 4) 方法. 该方法可以保证 Schrödinger 方程能量守恒性, 没有幅度误差. 波函数实数部分的迭代公式如下:

$$\begin{aligned} & \psi_R^{n+l/m}(i, j, k) \\ &= \psi_R^{n+(l-1)/m}(i, j, k) + \frac{V(i, j, k) \Delta t}{\hbar} \Psi_I^{n+l/m}(i, j, k) \\ & \quad - \alpha_{x1} [\psi_I^{n+l/m}(i+1, j, k) - 2\psi_I^{n+l/m}(i, j, k) \\ & \quad + \psi_I^{n+l/m}(i-1, j, k)] \\ & \quad - \alpha_{x2} [\psi_I^{n+l/m}(i+2, j, k) - 2\psi_I^{n+l/m}(i, j, k) \\ & \quad + \psi_I^{n+l/m}(i-2, j, k)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & - \alpha_{y1} [\psi_I^{n+l/m}(i, j+1, k) - 2\psi_I^{n+l/m}(i, j, k) \\ & \quad + \psi_I^{n+l/m}(i, j-1, k)] \\ & \quad - \alpha_{y2} [\psi_I^{n+l/m}(i, j+2, k) - 2\psi_I^{n+l/m}(i, j, k) \\ & \quad + \psi_I^{n+l/m}(i, j-2, k)] \\ & \quad - \alpha_{z1} [\psi_I^{n+l/m}(i, j, k+1) - 2\psi_I^{n+l/m}(i, j, k) \\ & \quad + \psi_I^{n+l/m}(i, j, k-1)] \\ & \quad - \alpha_{z2} [\psi_I^{n+l/m}(i, j, k+2) - 2\psi_I^{n+l/m}(i, j, k) \\ & \quad + \psi_I^{n+l/m}(i, j, k-2)], \quad (15) \end{aligned}$$

$$\alpha_{x1} = \frac{4}{3} c_l S_x, \quad \alpha_{y1} = \frac{4}{3} c_l S_y, \quad \alpha_{z1} = \frac{4}{3} c_l S_z, \quad (16)$$

$$\alpha_{x2} = \frac{-1}{12} c_l S_x, \quad \alpha_{y2} = \frac{-1}{12} c_l S_y, \quad \alpha_{z2} = \frac{-1}{12} c_l S_z, \quad (17)$$

$$S_x = \frac{\hbar}{2m^*} \frac{\Delta_t}{\Delta_x^2}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2m^*} \frac{\Delta_t}{\Delta_y^2}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2m^*} \frac{\Delta_t}{\Delta_z^2}. \quad (18)$$

3 数值稳定性和色散性分析

3.1 数值稳定性分析

根据冯·诺依曼稳定性条件, 假设波函数为平面波, 可表示为

$$\psi(x, y, z, t) = A_0 \exp(-j_0(i\Delta_x k_x + j\Delta_y k_y + k\Delta_z k_z)),$$

$$\begin{aligned} k_x &= k_0 \sin \theta \cos \varphi, \quad k_y = k_0 \sin \theta \sin \varphi, \\ k_z &= k_0 \cos \theta, \end{aligned} \quad (19)$$

其中 $k_0 = \frac{p}{\hbar}$ 为波数, p 为动能, θ, φ 为球面角. 这里, 我们使用 q 阶同位差分离散二阶空间导数, 即

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} &\approx \sum_{r=-q/2}^{q/2} W_r \frac{\psi(i, j, k+r)}{\Delta_z^2} \\ &= \sum_{r=-q/2}^{q/2} W_r \frac{\exp(-j_0 r k_z \Delta_z)}{\Delta_z^2} \psi(i, j, k) \\ &= \eta_z \psi, \end{aligned} \quad (20)$$

其中

$$\eta_z = \sum_{r=-q/2}^{q/2} W_r \frac{\exp(-j_0 r k_z \Delta_z)}{\Delta_z^2}.$$

我们假设一维 Schrödinger 方程其势能为 0, 则

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\hbar}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\ \frac{\hbar}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_I \end{pmatrix}. \quad (21)$$

对应的空间差分形式为

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\hbar}{2m^*} \eta_z \\ \frac{\hbar}{2m^*} \eta_z & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_I \end{pmatrix}. \quad (22)$$

经高阶辛积分后, 系统时间演化矩阵的离散形式 L^d 为

$$L^d = \begin{pmatrix} l_{11} & l_{12} \\ l_{21} & l_{22} \end{pmatrix} = \prod_{l=1}^m \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{\hbar}{2m^*} \eta_z d_l \Delta t & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\hbar}{2m^*} \eta_z c_l \Delta t \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (23)$$

矩阵特征值 λ 对应的特征方程为

$$\lambda^2 - \text{tr}(L^d)\lambda + \det(L^d) = 0, \quad (24)$$

其中, $\text{tr}(L^d)$ 和 $\det(L^d)$ 分别为矩阵的迹和行列式. 考虑到离散矩阵是行列式值为 1 的辛矩阵, 特征方程可简化为

$$\lambda^2 - \text{tr}(L^d)\lambda + 1 = 0, \quad (25)$$

其解为, $\lambda_{1,2} = \frac{\text{tr}(L^d) \pm j_0 \sqrt{4 - \text{tr}(L^d)^2}}{2}$. 稳定性条件要求 $|\lambda_{1,2}| = 1$, 所以只要 $|\text{tr}(L^d)| \leq 2$ 即可.

将 (23) 式依次相乘, 我们求出

$$\text{tr}(L^d) = 2 + \sum_{l=1}^m (-1)^l g_l \left(\left(\frac{\hbar}{2m^*} \right)^2 \Delta_t^2 \eta_z^2 \right)^l, \quad (26)$$

$$g_l = \sum_{\substack{1 \leq i_1 \leq j_1 < i_2 \leq j_2 < \dots \\ < i_l \leq j_l \leq m}} c_{i_1} d_{j_1} c_{i_2} d_{j_2} \dots c_{i_l} d_{j_l} + \sum_{\substack{1 \leq i_1 < j_1 \leq i_2 < j_2 \leq \dots \\ \leq i_l < j_l \leq m}} d_{i_1} c_{j_1} d_{i_2} c_{j_2} \dots d_{i_l} c_{j_l}. \quad (27)$$

以上的结果可进一步推广到三维零势能 Schrödinger 方程的数值稳定性, 即

$$\text{tr}(L^d) = 2 + \sum_{l=1}^m (-1)^l g_l \left[\left(\frac{\hbar}{2m^*} \right)^2 \times \Delta_t^2 (\eta_x + \eta_y + \eta_z)^2 \right]^l, \quad (28)$$

因此, 可以得到

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m^*} \frac{\Delta_t}{\Delta_s^2}} \leq \text{CFL}, \quad (29)$$

其中, CFL 为稳定度常数. 表 2 列出了传统的 FDTD(2, 2) 法, 高阶 FDTD(2, 4) 法以及 SFDTD(3, 4) 法的最大稳定度. 其中, SFDTD(3, 4) 法使用如下对称辛算子:

$$c_1 = 0.26833010, \quad c_2 = -0.18799162, \\ c_3 = 0.91966152, \quad d_l = c_{m-l+1} \quad (1 \leq l \leq m).$$

表 2 各种算法的最大稳定度比较, $d = 1, 2, 3$, 表示维数

算法	CFL
FDTD(2,2)	$1/\sqrt{d}$
FDTD(2,4)	$0.8660/\sqrt{d}$
SFDTD(3,4)	$1.3019/\sqrt{d}$

分析表 2, 当空间采用高阶同位差分格式时, 高阶辛积分可提高算法稳定度.

3.2 数值色散性分析

Maxwell 方程中, 自由空间光子的色散性关系为

$$\omega = c|\mathbf{k}_0|, \quad (30)$$

其中, c 为光速, $\mathbf{k}_0 = (k_x, k_y, k_z)$ 为幅度为 k_0 的波矢. 不同于自由光子的圆锥形三维色散关系, 自由电子的色散关系是一个抛物面, 即

$$\omega = \left(\frac{\hbar}{2m^*} \right) |\mathbf{k}_0|^2. \quad (31)$$

类比 Maxwell 方程, 我们可以定义 Schrödinger 方程的速度 $v_0 = \left(\frac{\hbar}{2m^*} \right)$, 因此 (31) 式可以改写成

$$\omega = v_0 |\mathbf{k}_0|^2. \quad (32)$$

根据平面波展开和辛算法的能量守恒特性, 自由电子的色散关系可以写成

$$\omega \Delta_t = a \cos [\text{tr}(L^d)/2], \quad (33)$$

相速度的相对误差为

$$\eta = 20 \log_{10} \left| \frac{v_p - v_0}{v_0} \right|, \quad (34)$$

其中, $v_p = \frac{\omega}{k_0^2}$, ω 可以根据 (33) 式计算.

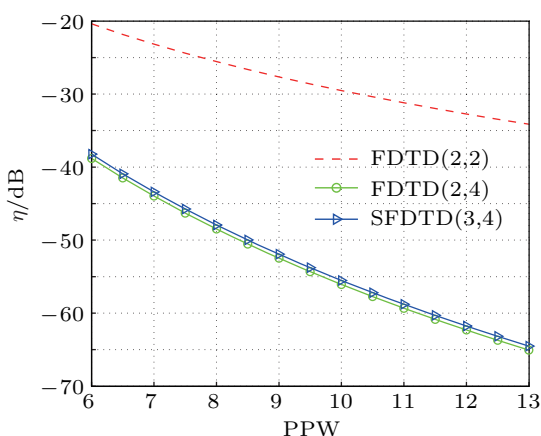


图 1 相速度误差随空间分辨率的变化 (这里, 平面波入射角 $\theta = 0^\circ$, $\varphi = 0^\circ$, 稳定性常数 $S_\delta = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{\hbar}{2m^*} = 0.125$)

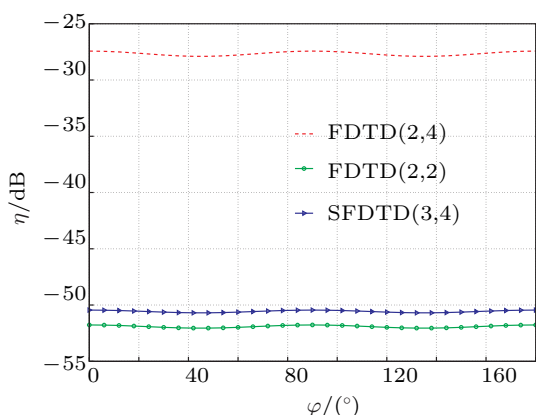


图 2 相速度误差随球面角 φ 的变化 (这里, 入射角 $\theta = 30^\circ$, 空间分辨率 $PPW = 7$, 稳定性常数 $S_\delta = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{\hbar}{2m^*} = 0.125$)

设定稳定性常数 $S_\delta = \frac{\Delta t}{\Delta \delta^2} \frac{\hbar}{2m^*} = 0.125$. 图 1 给出了相速度误差随空间分辨率的变化. 这里, 平面波入射角度 $\theta = 0^\circ$, $\phi = 0^\circ$. 接着, 我们选择相同的空间分辨率, 图 2 给出了相速度误差随传播角度 ϕ 的变化. 这里, 入射角度 $\theta = 30^\circ$, 空间分辨率 $PPW = 7$. 根据图 1 和图 2, 我们可以看出:SFDTD(3,4) 法和 FDTD(2,4) 法比传统的 FDTD(2,2) 法具有更优越的数值色散性. 相应地, 在同样的精度条件下, 高阶同位差分可以使用更粗的网格, 因此节约了 CPU 计算时间和存储空间. 然而, 和低阶辛算子相比, 高阶辛算子不能减少数值色散, 这一点和 Maxwell 方程大不相同, 有待进一步研究.

4 数值结果及讨论

4.1 二维量子阱

假设计算区域 $D = [0, L_x] \times [0, L_y] = [0, 29] \times [0, 29]$, $\Delta_\delta = 1$, $S_\delta = \frac{\Delta t}{\Delta z^2} \frac{\hbar}{2m} = 0.1$, 迭代步数 $N_{\max} = 40000$, 边界条件为一侧导数差分法. 特征能量如下式所示:

$$E_{n_x, n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right), \quad (35)$$

其中, (n_x, n_y) 表示特征模数. 表 3 列出了各种算法对特征频率的数值结果, 各种算法对特征态 $\psi_{3,3}$ 的仿真结果如图 3 所示. 由计算结果可见, 对于二维量子阱的仿真, 高阶辛算法 SFDTD(3,4) 法比 FDTD(2,4) 法以及 FDTD(2,2) 法更加准确.

表 3 各种算法仿真结果比较 —— 二维量子阱的特征频率

	FDTD(2,2)	FDTD(2,4)	SFDTD(3,4)	解析解
$\omega_{1,1}$	254	267	272	272
$\omega_{1,2}$	662	670	679	679
$\omega_{2,2}$	1072	1080	1088	1088
$\omega_{1,3}$	1366	1380	1388	1388

图 4 给出了各种算法对特征态 $\psi_{2,2}$ 仿真误差的 L_2 范数. 高阶辛算法 SFDTD(3,4) 收敛性最好.

4.2 谐振子

对于二维谐振子的仿真, 假定势能 $V(x, y) = \frac{1}{2}k(x^2 + y^2)$, 其他参数和二维粒子相同. 波函数的表达式和对应的特征能量如下式:

$$\psi(x, y, t) = \sqrt{\frac{1}{\pi 2^{n_x} n_x! 2^{n_y} n_y!}} \times e^{-iE_{n_x, n_y} t} \times e^{-\frac{x^2}{2}} e^{-\frac{y^2}{2}} H_{n_x}(x) H_{n_y}(y), \quad (36)$$

$$E_{n_x, n_y} = (n_x + n_y + 1) \hbar \omega. \quad (37)$$

表 4 列出了三种算法对谐振子特征频率的仿真结果. 对于复杂的势能分布情况, 高阶辛算法 SFDTD(3, 4) 最准确, 能够满足量子器件的仿真要求.

表 4 各种算法仿真结果比较 —— 二维谐振子的特征频率

	FDTD(2,2)	FDTD(2,4)	SFDTD(3,4)	解析解
$\omega_{1,1}$	352	363	360	360
$\omega_{1,2}$	773	788	785	785
$\omega_{2,2}$	1210	1218	1189	1189

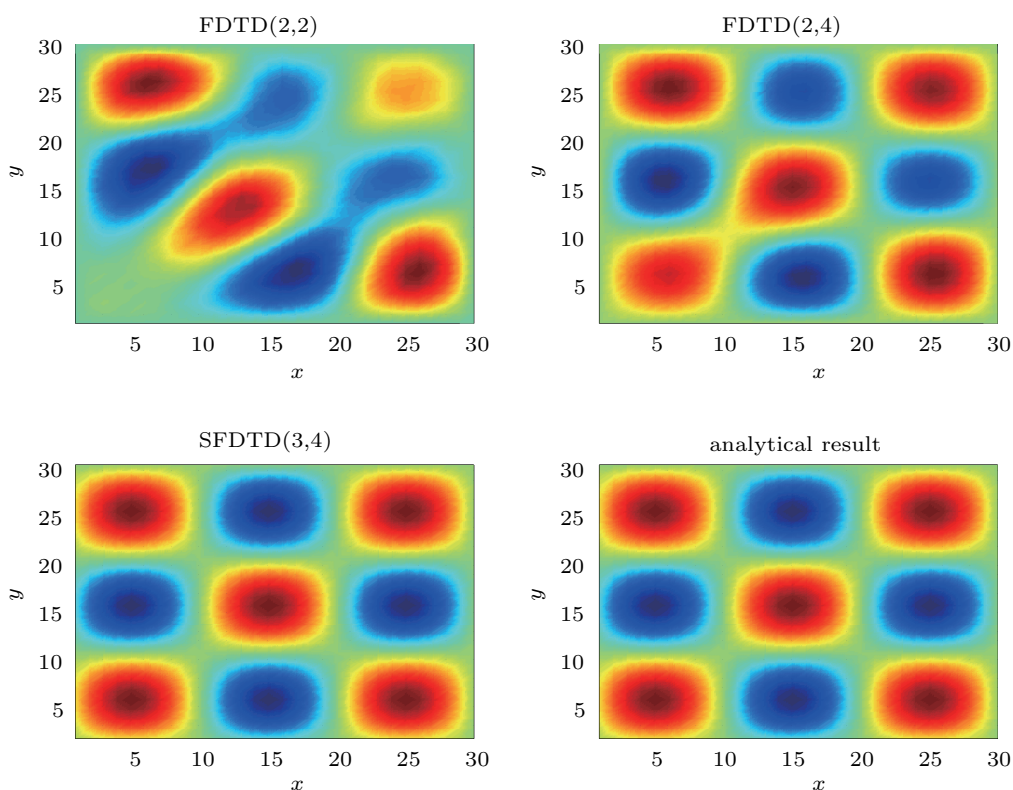


图3 二维量子阱的特征态 (复波函数的实数部分) ($n_x = 3, n_y = 3$)

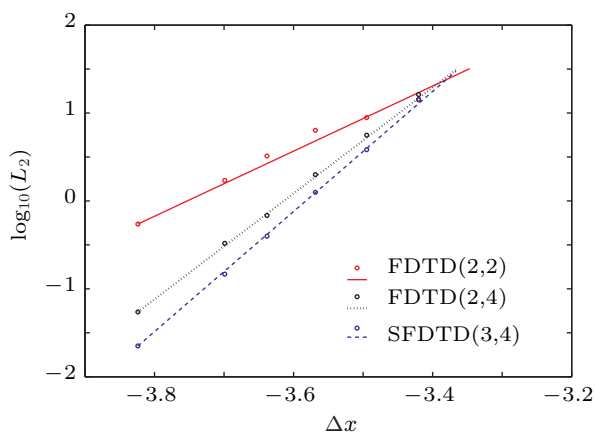


图4 对特征态 $\psi_{2,2}$ 各种算法的仿真结果和解析解间的误差 L_2 范数

5 结论

高阶辛 FDTD(3, 4) 方法, 是一种空间四阶精度, 时间三阶精度, 能量守恒, 且条件稳定的算法. 一方面, 该算法使用空间高阶同位差分和一侧导数边界条件可获得高阶精度. 另一方面, 该算法结合辛算子, 更适用于长时间仿真. 在本文中, 我们研究了 SFDTD(3, 4) 方法的数值稳定性和色散性, 并将该算法用于求解薛定谔方程的特征值问题. 数值仿真结果证明了 SFDTD(3, 4) 方法在精度、收敛性等方面的优势. 因此, 该算法在量子器件仿真中将有较广阔的应用前景.

[1] Datta S 2005 *Quantum Transport: Atom to Transistor* (New York: Cambridge University Press)
 [2] Griffiths D J 2004 *Introduction to Quantum Mechanics* (Second Edition Addison-Wesley) (Boston)
 [3] Joe Y S, Satanin A M, Kim C S 2006 *Phys. Scr.* **74** 259
 [4] Soriano A, Navarro E A, Porti J A, Such V 2004 *J. Appl. Phys.* **95** 8011

[5] Sullivan D M, Citrin D S 2005 *J. Appl. Phys.* p97
 [6] Sanz-Serna J M, Calvo M P 1994 *Numerical Hamiltonian Problems* (London: Chapman & Hall)
 [7] Wen G Y 1999 *Journal of Microwave* **15**(1) 68 (in Chinese) [文炯 — 1999 微波学报 **15**(1) 68]
 [8] Feng K 2003 *Symplectic Geometric Algorithms for Hamiltonian Systems* (Hangzhou: Zhejiang Science and Technology Publishing

- House) p358–359 (in Chinese) [冯康 2003 哈密尔顿系统的辛几何算法 (杭州: 浙江科学技术出版社) 第 358—359 页]
- [9] Gray S K, Manolopoulos D E 1996 *J. Chem. Phys.* **104** 7099
- [10] Liu X Y, Ding P Z, Hong J L, Wang L J 2005 *Comput. Math. Appl.* **50** 637
- [11] Blanes S, Casas F, Murua A 2006 *J. Chem. Phys.* p124
- [12] Chin S A, Chen C R 2002 *J. Chem. Phys.* **117** 1409
- [13] Liu X S, Liu X Y, Zhou Z Y, Ding P Z, Pan S F 2000 *Int. J. Quantum. Chem.* **79** 343
- [14] Monovasilis T, Kalogiratos Z, Simos T E 2008 *Phys. Lett. A* **372** 569
- [15] Islas A L, Karpeev D A, Schober C M 2001 *J. Comput. Phys.* **173** 116
- [16] Wang T C, Nie T, Zhang L M 2009 *J. Comput. Appl. Math.* **231** 745
- [17] Sullivan D M 2000 *Electromagnetic Simulation Using the FDTD Method* (New York: IEEE Press)
- [18] Taflov A, Hagness S C 2005 *Computational Electrodynamics: the Finite-Difference Time-Domain Method* (3rd Ed.) (Boston: Artech House)
- [19] Yoshida H 1990 *Phys. Lett. A* **150** 262
- [20] Sha W, Huang Z X, Chen M S, Wu X L 2008 *IEEE Trans. Antennas Propag.* **56** 493

High-order symplectic FDTD scheme for solving time-dependent Schrödinger equation*

Shen Jing^{1)2)†} Sha Wei E. I.³⁾ Huang Zhi-Xiang¹⁾ Chen Ming-Sheng²⁾
Wu Xian-Liang¹⁾

1) (Key Laboratory of Intelligent Computing & Signal Processing, Anhui University, Hefei 230039, China)

2) (Department of Electronic Engineering, Hefei Normal College, Lianhua Road, Hefei 230601, China)

3) (Department of Electrical and Electronic Engineering, The University of Hong Kong, Pokfulam Road, Hong Kong, China)

(Received 6 February 2012; revised manuscript received 11 April 2012)

Abstract

Using three-order symplectic integrators and fourth-order collocated spatial differences, a high-order symplectic finite-difference time-domain (SFDTD(3, 4)) scheme is proposed to solve the time-dependent Schrödinger equation. First, high-order symplectic framework for discretizing the Schrödinger equation is described. The numerical stability and dispersion analyses are provided for the FDTD(2, 2), FDTD(2, 4) and SFDTD(3, 4) schemes. The results are demonstrated in terms of theoretical analyses and numerical simulations. The spatial high-order collocated difference reduces the stability that can be improved by the high-order symplectic integrators. The SFDTD(3, 4) scheme and FDTD(2, 4) approach show better numerical dispersion than the traditional FDTD(2, 2) method. The simulation results of a two-dimensional quantum well and harmonic oscillator strongly confirm the advantages of the SFDTD(3, 4) scheme over the traditional FDTD(2, 2) method and other high-order approaches. The explicit SFDTD(3, 4) scheme, which is high-order-accurate and energy-conserving, is well suited for long-term simulation.

Keywords: symplectic integrator, high-order collocated difference, Schrödinger equation, numerical stability and dispersion

PACS: 02.70.Bf, 42.50.Nn

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60931002, 61101064, 61001033), the Provincial Natural Science Research Project of Anhui Colleges (Grant Nos. KJ2011A242, KJ2011A002), the Excellent Youth Foundation of Anhui Province (Grant No. 1108085J01), the Excellent Youth Foundation of Anhui (Grant No.2011SQRL130), and the Natural Science Foundation of Anhui (Grant No. 10040606Q51).

† E-mail: jingvicky1028@yahoo.com.cn