

# 高阶 SF-SFDTD 方法在含时薛定谔方程求解中的应用研究\*

谢国大<sup>1)2)</sup> 潘攀<sup>1)2)</sup> 任信钢<sup>1)2)</sup> 冯乃星<sup>1)2)</sup>  
方明<sup>1)2)</sup> 李迎松<sup>1)2)</sup> 黄志祥<sup>1)2)†</sup>

1) (安徽大学电子信息工程学院, 合肥 230601)

2) (安徽大学, 智能计算与信号处理教育部重点实验室, 合肥 230601)

(2023 年 5 月 12 日收到; 2023 年 10 月 15 日收到修改稿)

时域有限差分方法 (finite-difference time-domain, FDTD(2, 2)) 被广泛用于量子力学中薛定谔方程的求解, 然而受 Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) 条件的影响, 计算空间中的网格尺寸会限制时间步长的取值范围, 极大降低了 FDTD(2, 2) 方法的数值计算效率. 另外, FDTD(2, 2) 方法在时间域和空间域只具有二阶数值精度, 在计算中往往会导致较大的误差累计, 影响仿真结果的正确性. 为了克服这些问题, 结合空间滤波方法 (spatial filtering, SF) 和高阶辛时域有限差分 (symplectic finite-difference time-domain, SFDTD(3, 4)) 方法 (3 和 4 分别表示时间和空间数值精度), 提出了一种时间稳定性条件可扩展的 SF-SFDTD(3, 4) 方法用于求解含时薛定谔方程. SF-SFDTD(3, 4) 方法无需对传统 SFDTD(3, 4) 方法的迭代公式进行进一步的推导, 只需要在每一次的数值迭代过程中加入空间滤波操作, 滤除因采用不满足 CFL 条件的步长而产生的不稳定空间域高频分量, 保证数值方法的稳定性, 因此所提方法与传统 SFDTD(3, 4) 方法具有较高的兼容性. 同时, 理论分析了 SF-SFDTD(3, 4) 方法的数值色散误差. 最后, 通过数值算例验证了本文所提方法的正确性和有效性.

**关键词:** 辛时域有限差分方法, 空间滤波方法, 时间稳定性条件, 薛定谔方程

**PACS:** 02.70.Bf, 42.50.Nn

**DOI:** 10.7498/aps.73.20230771

## 1 引言

计算电磁学在当今各种电子设备中电磁效应 (辐射、散射或传播) 的建模和仿真中占据重要地位<sup>[1,2]</sup>. 其应用包括但不限于通信、生物成像和诊断、电磁兼容性或干扰、信号完整性分析等领域<sup>[3,4]</sup>. 近年来, 由于现代电子技术的飞速发展, 集成电路相关元器件的特征尺寸已经缩小到纳米级别, 这大大提高了单位体积内物质存储和信息处理的效率, 为智能化、小型化电子设备的发展提供了强有力的支持<sup>[5,6]</sup>. 又因为纳米器件本身尺寸极小, 结构中粒子

的量子效应明显, 这导致基于经典电磁理论的建模方案难以描述微观粒子的量子特性. 另外, 采用实验方法直接测量器件的各种性能又十分困难, 且成本较高. 因此, 如何准确、高效地研究纳米器件的相关特性, 已成为当今纳米器件建模和设计的关键挑战.

对于分析大部分纳米器件的特性, 确定器件结构电子的本征值和本征态是一个重要的切入点. 例如, 在研究弹道输运时, 需要考虑传导通道的横向本征态, 这一点与非平衡格林函数密切相关<sup>[7]</sup>. 此外, 微观电子传输中本征态的激发或不同本征态之间的相互作用, 会产生各种有趣的现象, 如 Fano 共振<sup>[8]</sup>、共振隧穿效应<sup>[9]</sup>等. 因此, 准确而有效地计算纳米结构中的本征态和特征频率对理解微纳

\* 国家自然科学基金 (批准号: 62201003, 2022YFA1404003, 62101002, U20A20164, 61901001) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zxhuang@ahu.edu.cn

结构系统中各种微观现象的物理机制和优化器件性能起着重要作用。而薛定谔方程可以描述物质粒子的运动和特性,通过数值求解薛定谔方程,可以确定纳米器件的本征值与本征态,这就使得薛定谔方程的数值解变得越来越重要<sup>[7]</sup>。在时间和空间上具有二阶数值精度的时域有限差分 (finite-difference time-domain, FDTD(2, 2)) 方法被证明是求解含时薛定谔方程的最有效和最简单的方法之一<sup>[10,11]</sup>。这是因为 FDTD(2, 2) 方法无需对薛定谔方程作进一步的推导,只需要直接对控制方程中的时间和空间偏导项进行中心差分离散,最后导出数值迭代公式。然而, FDTD(2, 2) 方法在时间和空间上只具有二阶精度,在长时间的数值迭代中产生较大的误差累计,导致仿真结果不正确或与理论结果差距较大。另外, FDTD(2, 2) 方法中时间步长的取值范围受时间稳定性条件的影响,即最大时间步长受计算区域中网格尺寸大小的限制,这极大地限制了采用 FDTD(2, 2) 方法求解薛定谔方程的计算效率。

为了克服传统 FDTD(2, 2) 方法数值色散大的问题,一些高阶 FDTD(2, 4) 方法被应用于求解含时薛定谔方程<sup>[12,13]</sup>,数值计算误差有明显改善。然而高阶 FDTD(2, 4) 方法对控制方程的离散是一种非辛离散形式,在长时间的数值仿真中难以保证系统的能量守恒特性。由于薛定谔方程的时间演化,本质上是归一化波函数的多次旋转。文献<sup>[14]</sup>提出了采用高阶辛 FDTD(3, 4) (symplectic finite-difference time-domain, SFDTD(3, 4)) 方法求解含时薛定谔方程,所推导出来的辛算子具有对称属性,确保离散方程在时间演化过程中保持能量守恒,没有幅度误差。然而,高阶辛 FDTD(3, 4) 方法也是一种显式迭代算法,虽然具有比传统 FDTD 方法更宽松的 Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) 稳定性条件<sup>[15]</sup>,但计算效率有待进一步的提高。为了突破 CFL 稳定性条件的限制,一些隐式无条件稳定的 FDTD 方法被开发出来并用于薛定谔方程的数值求解,但隐式算法往往需要对控制方程进行特殊的离散处理及繁琐的公式推导和数值计算:包括对时间偏导数的隐式离散、时间步长分裂处理及矩阵求逆计算等。另外,采用较大的时间步长会导致隐式 FDTD 方法的数值色差较大,在实际应用中,需要根据实际的计算需求选择合适的时间步长来平衡计算精度和计算效率。

鉴于传统 FDTD(2, 2) 方法及其优化算法在

计算效率和计算精度两方面所存在的问题,本文提出了一种稳定性条件可控的空间滤波 (spatial filtering)-SFDTD(3, 4)(SF-SFDTD(3, 4)) 方法。在 SFDTD(3, 4) 方法中采用不满足稳定性条件的时间步长会导致空间频域中高频电磁分量幅值呈现指数倍增长并导致数值结果发散,因此,在数值迭代过程中采用空间滤波方法<sup>[16-18]</sup>能够有效地滤除这些不稳定的高频分量,保证计算结果的稳定性。又因为当时间步长的取值满足 CFL 稳定性条件时,高频分量的幅值几乎为零,因此对计算结果的精确性影响较小。采用不满足 CFL 稳定性条件的时间步长导致高频分量的幅值增加,但这一结果只会影响计算结果的稳定性,滤除这些不稳定的高频分量几乎不会对计算结果的精度造成影响。另外, SF-SFDTD(3, 4) 方法与传统 SFDTD(3, 4) 方法采用相同的迭代公式,只需要在每一次的数值迭代过程中加入滤波操作。因此,它保留了传统 SFDTD(3, 4) 方法的简洁性和有效性,同时提高了计算效率。

论文的组织结构如下:第 2 节介绍了基于含时薛定谔方程的 SF-SFDTD(3, 4) 方法的基本原理,包括扩展 SFDTD(3, 4) 方法的 CFL 条件限制,归一化低通滤波器半径的定义及滤波处理过程,第 3 节给出了 SF-SFDTD(3, 4) 方法的数值色散分析,第 4 节通过几种典型的数值算例来验证 SF-SFDTD(3, 4) 方法的正确性和有效性。最后给出本文工作的总结与展望。

## 2 方法

### 2.1 SFDTD 方法求解薛定谔方程的迭代公式

具有静态电位  $V(r, t) = V(r)$  的含时薛定谔方程表达式为<sup>[9]</sup>

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

其中  $\psi$  是与空间  $r$  和时间  $t$  有关的波函数,  $m^*$  是粒子的质量,  $-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V$  是哈密顿算符。为避免在数值计算中使用复数,将  $\psi(r, t)$  分解为实分量和虚分量,即:

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

将 (2) 式代入 (1) 式中,得到以下方程组:

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

根据文献 [14], 采用 3 步 3 阶的显式辛算法, 即 SFDTD(3, 4) 方法数值求解含时薛定谔方程, 其实部和虚部波函数的迭代公式可离散成如下形式:

$$\begin{aligned}\psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k) &= \psi_{\text{R}}^{n+\frac{(l-1)}{m}}(i, j, k) + \frac{V(i, j, k)\Delta t}{\hbar} \times \psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k) \\ &\quad - \alpha_{\text{Rx}1} \times \left[ \psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i+1, j, k) - 2\psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k) + \psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i-1, j, k) \right] \\ &\quad - \alpha_{\text{Rx}2} \times \left[ \psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i+2, j, k) - 2\psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k) + \psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i-2, j, k) \right] \\ &\quad - \alpha_{\text{Ry}1} \times \left[ \psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j+1, k) - 2\psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k) + \psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j-1, k) \right] \\ &\quad - \alpha_{\text{Ry}2} \times \left[ \psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j+2, k) - 2\psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k) + \psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j-2, k) \right] \\ &\quad - \alpha_{\text{Rz}1} \times \left[ \psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k+1) - 2\psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k) + \psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k-1) \right] \\ &\quad - \alpha_{\text{Rz}2} \times \left[ \psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k+2) - 2\psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k) + \psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k-2) \right],\end{aligned}\quad (4)$$

$$\alpha_{\text{Rx}1} = \frac{4}{3}c_l \times S_x, \quad \alpha_{\text{Ry}1} = \frac{4}{3}c_l \times S_y, \quad \alpha_{\text{Rz}1} = \frac{4}{3}c_l \times S_z, \quad (5)$$

$$\alpha_{\text{Rx}2} = -\frac{1}{12}c_l \times S_x, \quad \alpha_{\text{Ry}2} = -\frac{1}{12}c_l \times S_y, \quad \alpha_{\text{Rz}2} = -\frac{1}{12}c_l \times S_z, \quad (6)$$

$$S_x = \frac{\hbar\Delta t}{2m^*\Delta x^2}, \quad S_y = \frac{\hbar\Delta t}{2m^*\Delta y^2}, \quad S_z = \frac{\hbar\Delta t}{2m^*\Delta z^2}, \quad (7)$$

$$\begin{aligned}\psi_{\text{I}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k) &= \psi_{\text{I}}^{n+\frac{(l-1)}{m}}(i, j, k) - \frac{V(i, j, k)\Delta t}{\hbar} \times \psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k) \\ &\quad + \alpha_{\text{Ix}1} \times \left[ \psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i+1, j, k) - 2\psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k) + \psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i-1, j, k) \right] \\ &\quad + \alpha_{\text{Ix}2} \times \left[ \psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i+2, j, k) - 2\psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k) + \psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i-2, j, k) \right] \\ &\quad + \alpha_{\text{Iy}1} \times \left[ \psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j+1, k) - 2\psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k) + \psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j-1, k) \right] \\ &\quad + \alpha_{\text{Iy}2} \times \left[ \psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j+2, k) - 2\psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k) + \psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j-2, k) \right] \\ &\quad + \alpha_{\text{Iz}1} \times \left[ \psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k+1) - 2\psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k) + \psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k-1) \right] \\ &\quad + \alpha_{\text{Iz}2} \times \left[ \psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k+2) - 2\psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k) + \psi_{\text{R}}^{n+\frac{l}{m}}(i, j, k-2) \right],\end{aligned}\quad (8)$$

$$\alpha_{\text{Ix}1} = \frac{4}{3}d_l \times S_x, \quad \alpha_{\text{Iy}1} = \frac{4}{3}d_l \times S_y, \quad \alpha_{\text{Iz}1} = \frac{4}{3}d_l \times S_z, \quad (9)$$

$$\alpha_{\text{Ix}2} = -\frac{1}{12}d_l \times S_x, \quad \alpha_{\text{Iy}2} = -\frac{1}{12}d_l \times S_y, \quad \alpha_{\text{Iz}2} = -\frac{1}{12}d_l \times S_z, \quad (10)$$

$$S_x = \frac{\hbar\Delta t}{2m^*\Delta x^2}, \quad S_y = \frac{\hbar\Delta t}{2m^*\Delta y^2}, \quad S_z = \frac{\hbar\Delta t}{2m^*\Delta z^2}, \quad (11)$$

其中  $c_l, d_l$  为辛传播因子 [14];  $n$  表示时间步,  $m$  代表单个时间迭代中子迭代步数,  $l$  表示在  $m$  个子迭代步数中的第  $l$  步计算,  $i, j, k$  表示坐标.

## 2.2 SFDTD(3, 4) 方法稳定性条件的扩展

不失一般性, 假定  $V(r) = 0$ , 等式 (3) 的空间四阶差分形式可以写成如下形式:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\hbar}{2m^*}(\eta_x + \eta_y + \eta_z) \\ \frac{\hbar}{2m^*}(\eta_x + \eta_y + \eta_z) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_I \end{pmatrix}, \quad (12)$$

其中,

$$\begin{aligned} \eta_x + \eta_y + \eta_z = & -4 \times \left\{ \left( \frac{1}{\Delta x} \right)^2 \left[ \frac{4}{3} \sin^2 \left( \frac{k_x \Delta x}{2} \right) - \frac{1}{12} \sin^2 (k_x \Delta x) \right] + \left( \frac{1}{\Delta y} \right)^2 \left[ \frac{4}{3} \sin^2 \left( \frac{k_y \Delta y}{2} \right) \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{12} \sin^2 (k_y \Delta y) \right] + \left( \frac{1}{\Delta z} \right)^2 \left[ \frac{4}{3} \sin^2 \left( \frac{k_z \Delta z}{2} \right) - \frac{1}{12} \sin^2 (k_z \Delta z) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (13)$$

这里  $k_x, k_y, k_z$  表示相应方向的波数.

对 (12) 式进行 3 阶时间辛积分近似处理, 则其系统时间演化矩阵的离散形式  $\mathbf{S}$  为

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \begin{bmatrix} l_{11} & l_{12} \\ l_{21} & l_{22} \end{bmatrix} \\ &= \prod_{l=1}^m \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{\hbar}{2m^*}(\eta_x + \eta_y + \eta_z) d_l \Delta t & 1 \end{pmatrix} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\hbar}{2m^*}(\eta_x + \eta_y + \eta_z) c_l \Delta t \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (14)$$

由于离散矩阵是行列式值为 1 的辛矩阵, 矩阵特征值  $\lambda$  对应的特征方程可以写为

$$\lambda^2 - \text{tr}(\mathbf{S})\lambda + 1 = 0, \quad (15)$$

(15) 式的解为

$$\lambda_{1,2} = \frac{\text{tr}(\mathbf{S}) \pm j_0 \sqrt{4 - \text{tr}(\mathbf{S})^2}}{2}. \quad (16)$$

稳定性条件要求  $|\lambda_{1,2}| = 1$ , 矩阵  $\mathbf{S}$  的迹满足如下条件:

$$|\text{tr}(\mathbf{S})| \leq 2. \quad (17)$$

将 (14) 式依次相乘, 得到

$$\text{tr}(\mathbf{S}) = 2 + \sum_{l=1}^m (-1)^l g_l \left[ \left( \frac{\hbar}{2m^*} \right)^2 \Delta t^2 (\eta_x + \eta_y + \eta_z)^2 \right]^l, \quad (18)$$

$$\begin{aligned} g_l &= \sum_{1 \leq i_1 \leq j_1 < i_2 \leq j_2 < \dots < i_l \leq j_l \leq m} c_{i_1} d_{j_1} c_{i_2} d_{j_2} \dots c_{i_l} d_{j_l} \\ &+ \sum_{1 \leq i_1 < j_1 \leq i_2 < j_2 \leq \dots \leq i_l < j_l \leq m} d_{i_1} c_{j_1} d_{i_2} c_{j_2} \dots d_{i_l} c_{j_l}, \end{aligned} \quad (19)$$

其中  $g_l$  的值可以通过辛传播因子  $c_l$  和  $d_l$  来计算,  $m$  是单个时间迭代中子迭代步数.

令  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \Delta$  和

$$\begin{aligned} Q &= \left\{ \left[ \frac{4}{3} \sin^2 \left( \frac{k_x \Delta x}{2} \right) - \frac{1}{12} \sin^2 (k_x \Delta x) \right] \right. \\ &\quad + \left[ \frac{4}{3} \sin^2 \left( \frac{k_y \Delta y}{2} \right) - \frac{1}{12} \sin^2 (k_y \Delta y) \right] \\ &\quad \left. + \left[ \frac{4}{3} \sin^2 \left( \frac{k_z \Delta z}{2} \right) - \frac{1}{12} \sin^2 (k_z \Delta z) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (20)$$

将其代入 (17) 式和 (18) 式, 则关于时间步长  $\Delta t$  的不等式需满足如下形式:

$$\Delta t \leq 2.26 \times \frac{m^* \Delta^2}{\hbar} \times \frac{1}{Q}. \quad (21)$$

为确保数值稳定性, 时间步长  $\Delta t$  应小于 (21) 式右边函数的最小值, 令函数  $Q$  中  $\sin^2 \left( \frac{k_u \Delta u}{2} \right) = 1$ ,  $\sin^2 (k_u \Delta u) = 0$  ( $u = x, y, z$ ), 可得传统 SFDTD(3, 4) 算法的 CFL 稳定性条件:

$$\Delta t \leq 0.565 \times \frac{m^* \Delta^2}{\hbar}. \quad (22)$$

(22) 式是确保 SFDTD(3, 4) 方法中所有空间频域场分量保持稳定, 然而根据文献 [16,17], 只有空间频域中一部分的低频分量对计算结果有影响, 而剩余部分的高频分量的幅值较小, 同时对数值计算结果的正确性影响几乎为零. 然而, 若采用较大的时间步长, 会导致空间频域中高频分量的幅值呈现指数增加, 并导致计算结果发散. 基于此, 将 SFDTD(3, 4) 方法中空间频域场分量限制在一个范围, 即在 (21) 式中, 将波函数限制在一个以  $k_{\max}$  为半径的球形区域内:

$$(k_x, k_y, k_z) \\ = (k_{\max} \sin \theta \cos \varphi, k_{\max} \sin \theta \sin \varphi, k_{\max} \cos \theta). \quad (23)$$

然后将 (23) 式代入 (20) 式得

$$Q(\theta, \varphi) \\ = \left\{ \left[ \frac{4}{3} \sin^2(q \sin \theta \cos \varphi) - \frac{1}{12} \sin^2(2q \sin \theta \cos \varphi) \right] \right. \\ + \left[ \frac{4}{3} \sin^2(q \sin \theta \sin \varphi) - \frac{1}{12} \sin^2(2q \sin \theta \sin \varphi) \right] \\ \left. + \left[ \frac{4}{3} \sin^2(q \cos \theta) - \frac{1}{12} \sin^2(2q \cos \theta) \right] \right\}, \quad (24)$$

其中  $q = k_{\max} \Delta / 2$ , 则关于时间步长的不等式可写成如下形式:

$$\Delta t \leq 2.26 \times \frac{m^* \Delta^2}{\hbar} \times \frac{1}{Q(\theta, \varphi)}. \quad (25)$$

根据 (25) 式, 时间步长  $\Delta t$  与函数  $Q$  中的  $\theta$  和  $\varphi$  有关,  $Q(\theta, \varphi)$  随  $\theta, \varphi$  的变化如图 1 所示, 通过数值求解得到函数  $Q(\theta, \varphi)$  在  $\theta = 0.304\pi$ ,  $\varphi = 0.25\pi$  取得最大值. 将  $\theta = 0.304\pi$ ,  $\varphi = 0.25\pi$  代入 (20) 式得到  $Q_{\max}(0.304\pi, 0.25\pi)$ , 然后根据 (21) 式得到关于时间步长的不等式为

$$\Delta t_{\text{SF}} \leq 2.26 \times \frac{m^* \Delta^2}{\hbar} \times \frac{1}{Q_{\max}(0.304\pi, 0.25\pi)} \\ = \Delta t_{\text{CFL}} \times \text{CE}, \quad (26)$$

$$\text{CE} = 4 / (Q_{\max}(0.304\pi, 0.25\pi)), \quad (27)$$

其中  $\Delta t_{\text{CFL}}$  是传统 SFDTD(3, 4) 方法求解薛定谔方程的最大离散时间步长; CE 表示传统 SFDTD(3, 4) 算法的 CFL 条件被扩展的倍数. 图 2 是关于 CE 的数值变化曲线, 可以发现 CE 大于 1. 这表明通过滤除 SFDTD(3, 4) 方法中空间频域场分量中的高频分量, 可以使得传统 SFDTD(3, 4) 方法的 CFL 得到进一步扩展.

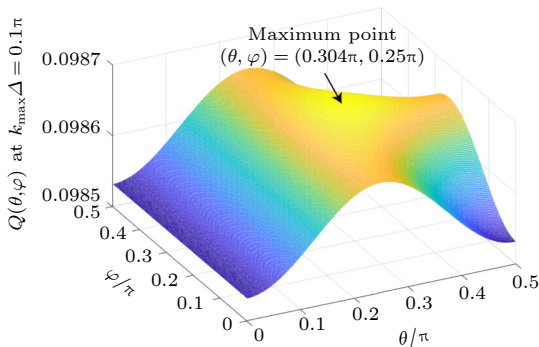


图 1  $k_{\max} \Delta = 0.1\pi$  时,  $Q(\theta, \varphi)$  随  $\theta, \varphi$  的变化  
Fig. 1. Variation of  $Q(\theta, \varphi)$  with  $\theta, \varphi$  at  $k_{\max} \Delta = 0.1\pi$ .

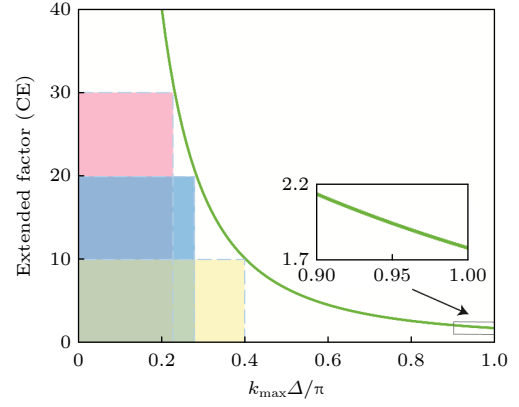


图 2 扩展因子 CE 随  $k_{\max} \Delta$  的变化  
Fig. 2. Value of CE varying with  $k_{\max} \Delta$ .

当 CE 的值确定后, 根据 (24) 式和 (27) 式可以得到  $k_{\max} \Delta$  的值, 然后定义低通滤波器半径  $R$ , 其计算公式为

$$R = \frac{k_{\max} \Delta}{2\pi}. \quad (28)$$

图 3 为采用不同 CE ( $\text{CE}_1 < \text{CE}_2 < \text{CE}_3 < \text{CE}_4$ ) 的值所确定的滤波半径  $R$  ( $R_1 > R_2 > R_3 > R_4$ ). 根据图 2 和图 3 可知, CE 的值越大时,  $R$  越小. 这表明若采用较大的时间步长, 需要滤除更多的空间频域高频分量来保证数值算法的稳定性.

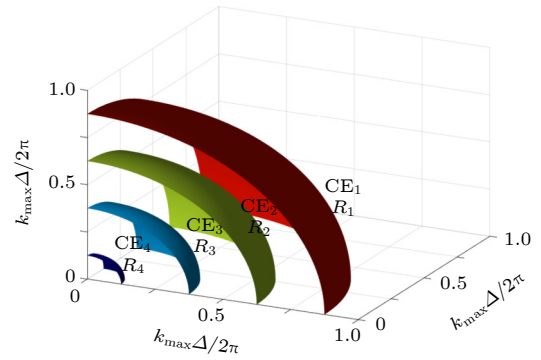


图 3 不同 CE 的值所确定的滤波半径  
Fig. 3. Filter radius determined by different values of CE.

### 3 色散分析

根据文献 [14], SFDTD(3, 4) 方法求解薛定谔方程的数值色散方程为

$$\tilde{\omega} \Delta t = \arccos[\text{tr}(\mathbf{S})/2]. \quad (29)$$

另外, 薛定谔方程的解析色散关系式为 [19]

$$\omega = \frac{\hbar}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2). \quad (30)$$

定义数值色散误差  $\text{Err}_\omega$  :

$$\text{Err}_\omega = \left| \frac{\omega - \tilde{\omega}}{\omega} \right|. \quad (31)$$

令  $\Delta = A/k_{\max}$ , 每个波长的网格数由  $2\pi/A$  给出. 同时将 (26) 式, (29) 式和 (30) 式代入 (31) 式得

$$\text{Err}_\omega = \left| 1 - \frac{1}{0.2825A^2\text{CE}} \arccos \left( 1 + 0.5 \sum_{l=1}^m (-1)^l g_l \right) \times \left[ (1.13 \times \text{CE} \times Q)^2 \right]^l \right|, \quad (32)$$

其中

$$Q = \left\{ \left[ \frac{4}{3} \sin^2 \left( \frac{A \sin \theta \cos \varphi}{2} \right) - \frac{1}{12} \sin^2 (A \sin \theta \cos \varphi) \right] + \left[ \frac{4}{3} \sin^2 \left( \frac{A \sin \theta \sin \varphi}{2} \right) - \frac{1}{12} \sin^2 (A \sin \theta \sin \varphi) \right] + \left[ \frac{4}{3} \sin^2 \left( \frac{A \cos \theta}{2} \right) - \frac{1}{12} \sin^2 (A \cos \theta) \right] \right\}. \quad (33)$$

图 4(a), (b) 分别为 FDTD 方法和 SFDTD 方法在  $\text{CE} = 1$  情况下的数值色散误差. 这里需要说

明的, SF-SFDTD 方法在  $\text{CE} = 1$  情况下的色散误差与 SFDTD 方法的色散误差是相同的. 这是因为 SF-SFDTD 方法与 SFDTD 方法采用相同的数中额外加入滤波操作过程. 若  $\text{CE} = 1$ , 此时时间步长满足时间稳定性条件, 则不需要采用滤波操作, 则 SF-SFDTD 方法与 SFDTD 方法具有相同的计算过程, 两种方法所具有的数值色散误差也是相同的.

为了进一步比较三种方法的数值色散误差, 图 4(c), (d) 给出了 SF-SFDTD 方法在  $\text{CE} = 5$  和  $\text{CE} = 10$  情况下的数值色散误差. 可以发现, SF-SFDTD 方法的数值色散误差略大于 SFDTD 方法的数值色散误差, 这是因为随着时间步长的增加, 时间域上的采样分辨率下降, 导致数值色散误差增加. 但需要说明的是, 随着时间步长的增加, SF-SFDTD(3, 4) 方法的数值色散误差增加不明显, 与传统方法的数值色散误差处于同一量级. 值得注意的是: 即使在  $\text{CE} = 10$  的情况下, SF-SFDTD(3, 4) 方法相较于 FDTD(2, 2) 方法仍具有较低的数值色散误差. 这表明在 SF-SFDTD(3, 4) 方法中采用

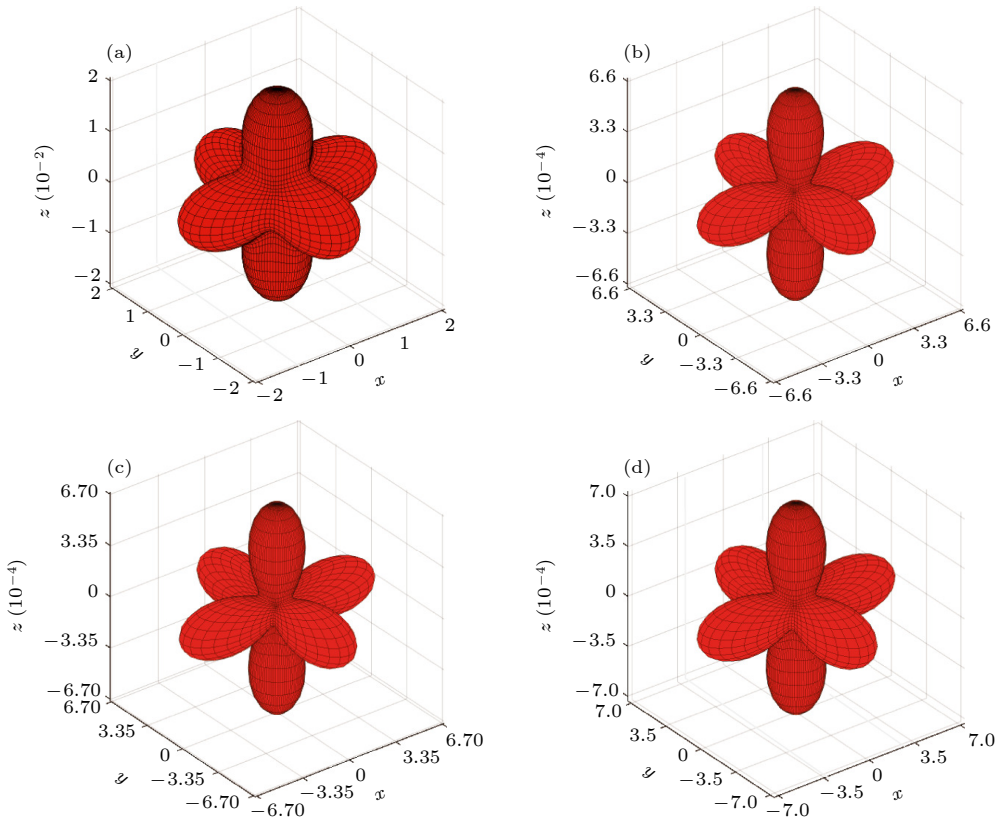


图 4 FDTD(2, 2), SFDTD(3, 4) 和 SF-SFDTD(3, 4) 方法的数值色散误差 (a) FDTD(2, 2)( $\text{CE} = 1$ ); (b) SFDTD(3, 4)( $\text{CE} = 1$ ); (c) SF-SFDTD(3, 4)( $\text{CE} = 5$ ); (d) SF-SFDTD(3, 4)( $\text{CE} = 10$ )

Fig. 4. Curves of numerical dispersion error for the FDTD(2, 2), SFDTD(3, 4) and SF-SFDTD(3, 4) method: (a) FDTD(2, 2) ( $\text{CE} = 1$ ); (b) SFDTD(3, 4)( $\text{CE} = 1$ ); (c) SF-SFDTD(3, 4)( $\text{CE} = 5$ ); (d) SF-SFDTD(3, 4)( $\text{CE} = 10$ ).

较大的时间步长求解含时薛定谔方程, 仍能得到十分准确的数值结果.

## 4 数值计算

为了验证本文所提 SF-SFDTD(3, 4) 方法的正确性和有效性, 通过数值求解二维和三维薛定谔方程, 计算量子阱结构的本征态和特征频率, 并将计算结果与其他方法所得计算结果进行对比.

### 4.1 二维量子阱

二维量子阱模型的尺寸为  $L_x = L_y = 2.9$  mm, 空间步长  $\Delta x = \Delta y = 0.1$  mm, 采用镜像原理构建边界条件<sup>[20]</sup>, 边界条件  $\psi(0, y) = \psi(L_x, y) = \psi(x, 0) = \psi(x, L_y) = 0$ , 系统的势能  $V(r) = 0$ .

图 5 和图 6 分别给出了传统 SFDTD(3, 4) 方法 (CE = 1) 和 SF-SFDTD(3, 4) 方法 (CE = 2, 4, 5) 计算所得二维量子阱结构的特征频率和本征态  $\psi_{2,2}$ . 数值结果表明, SF-SFDTD(3, 4) 方法采用不同的时间步长 (CE = 2, 4, 5) 计算所得结果与传统 SFDTD(3, 4) 方法 (CE = 1) 计算所得结果一致. 另外, 图 5 还给出了 FDTD(2, 2) 方法的计算结果, 结果表明 SF-SFDTD(3, 4) 方法相较于 FDTD

(2, 2) 方法具有更高的数值计算精度. 对比以上不同方法的计算结果, 进一步验证了本文所提 SF-SFDTD(3, 4) 方法的正确性.

表 1 对比了 SFDTD(3, 4) 方法和 SF-SFDTD(3, 4) 方法的数值计算效率. 由表 1 可以看出, 当 CE = 5 时, SF-SFDTD(3, 4) 方法的仿真时间小于传统 SFDTD(3, 4) 方法的仿真时间, 这表明在取较大的时间步长情况下, SF-SFDTD(3, 4) 方法在计算效率方面相较于 SFDTD(3, 4) 方法更具有优势.

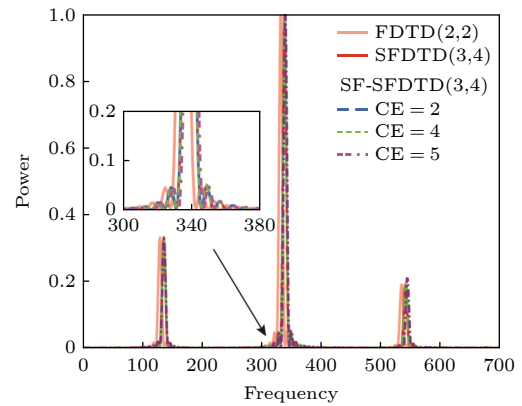


图 5 二维薛定谔方程的特征频率

Fig. 5. Eigenfrequencies of the two-dimensional Schrödinger equation.

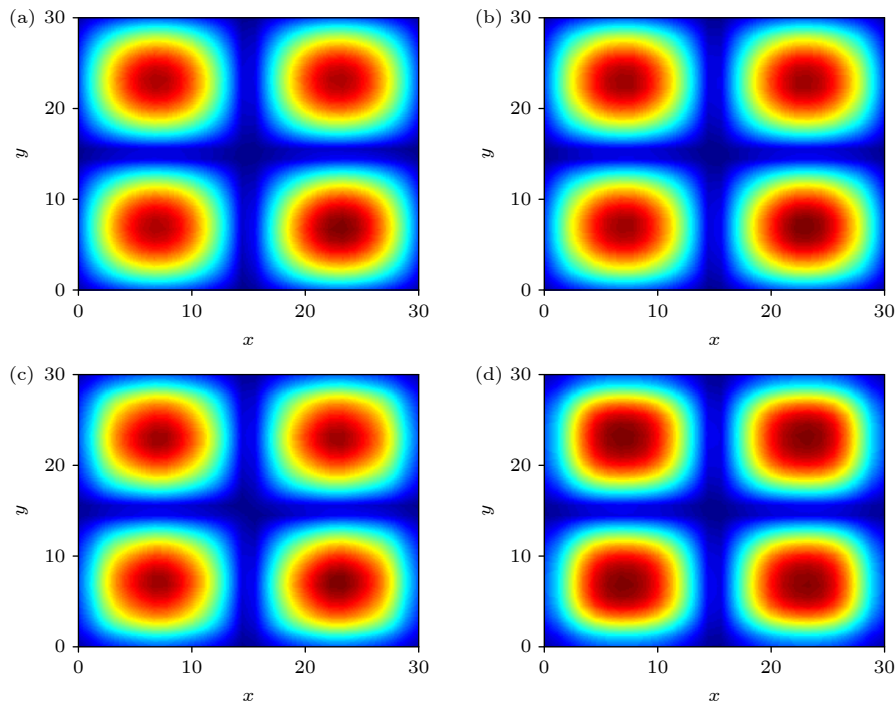


图 6 二维薛定谔方程在不同时间步长下的本征态 ( $\psi_{2,2}$ ) (a) CE = 1; (b) CE = 2; (c) CE = 4; (d) CE = 5

Fig. 6. Eigenstates of two-dimensional Schrödinger equation at different time steps ( $\psi_{2,2}$ ): (a) CE = 1; (b) CE = 2; (c) CE = 4; (d) CE = 5.

表 1 SFDTD(3, 4) 和 SF-SFDTD(3, 4) 方法数值求解二维薛定谔方程的运行时间

Table 1. Execution time(s) for SFDTD(3, 4) and SF-SFDTD(3, 4) methods for solving two-dimensional Schrödinger equation.

计算方法	CE	迭代步数	运行时间/s
SFDTD(3, 4)	1	40000	7.78
SF-SFDTD(3, 4)	2	20000	16.18
SF-SFDTD(3, 4)	4	10000	7.98
SF-SFDTD(3, 4)	5	8000	4.51

### 4.2 三维量子阱

三维量子阱模型的尺寸为  $L_x = L_y = L_z = 3 \text{ mm}$ , 空间步长  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.1 \text{ mm}$ , 边界条件  $\psi(0, y, z) = \psi(L_x, y, z) = \psi(x, 0, z) = \psi(x, L_y, z) = \psi(x, y, 0) = \psi(x, y, L_z) = 0$ , 其势能  $V(r) = 0$ .

图 7 和图 8 分别给出了 FDTD(2, 2) 方法 (CE = 1), SFDTD(3, 4) 方法 (CE = 1) 和 SF-SFDTD(3, 4) 方法 (CE = 2, 4, 6) 计算所得三维量子阱结构的特征频率和本征态  $\psi_{2,2,2}$ . 由图 7 和图 8 可知, 当 SF-SFDTD(3, 4) 方法所采用的时间步长是传统 SFDTD(3, 4) 方法最大离散时间步长

的 6 倍时, SF-SFDTD(3, 4) 方法和 SFDTD(3, 4) 方法的数值计算结果仍较为一致, 同时可以发现 FDTD(2, 2) 方法的计算结果偏离其他两种方法的计算结果, 再一次验证了本文所提方法的正确性.

为了定量分析 FDTD(2, 2) 方法、SFDTD(3, 4) 方法和 SF-SFDTD(3, 4) 方法计算特征频率结果的相对误差, 定义相对计算误差:

$$G_r = \frac{|G(f) - G_{\text{analysis}}(f)|}{G_{\text{analysis}}(f)}, \quad (34)$$

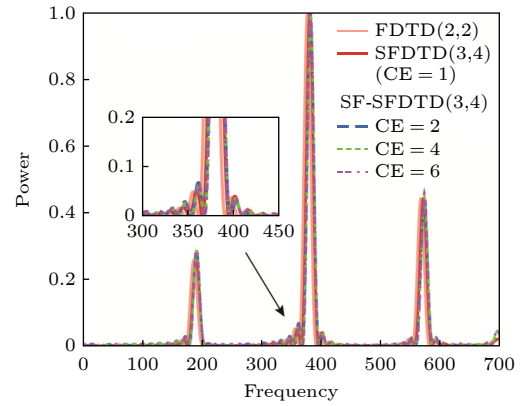


图 7 三维薛定谔方程的特征频率

Fig. 7. Eigenfrequencies of the three-dimensional Schrödinger equation.

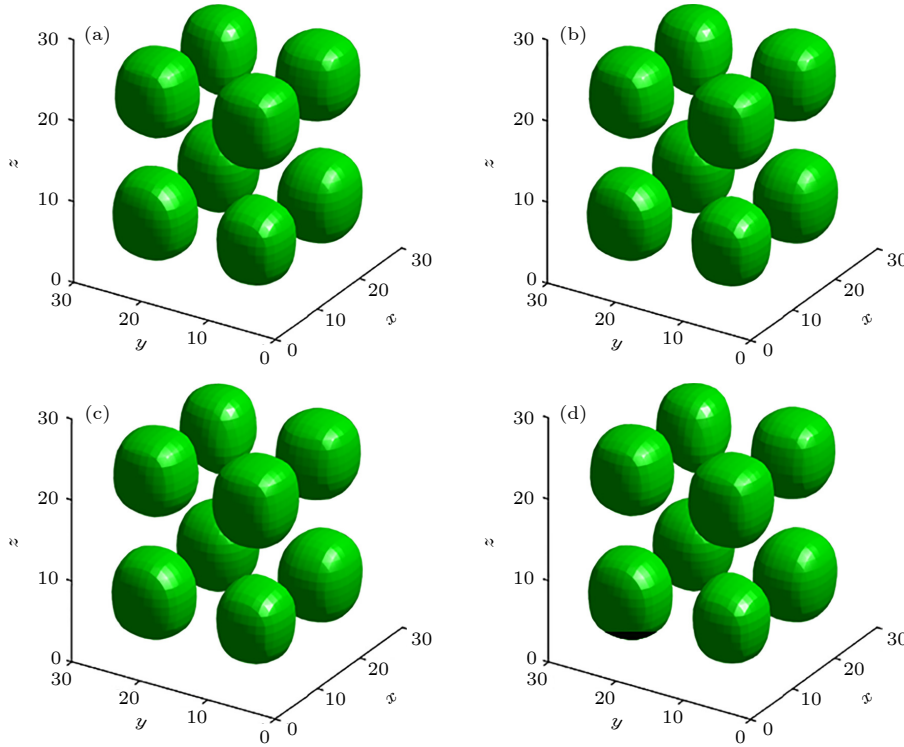


图 8 三维薛定谔方程在不同时间步下的本征态 ( $\psi_{2,2,2}$ ) (a) CE = 1; (b) CE = 2; (c) CE = 4; (d) CE = 6

Fig. 8. Eigenstates of three-dimensional Schrödinger equation at different time steps ( $\psi_{2,2,2}$ ): (a) CE = 1; (b) CE = 2; (c) CE = 4; (d) CE = 6.

其中  $G(f)$  和  $G_{\text{analysis}}(f)$  分别表示三种方法计算所得特征频率结果和解析结果. 如图 9 所示, 虽然 SF-SFDTD(3, 4) 方法在  $CE = 2, 4, 6$  情况下, 其相对计算误差大于 SFDTD(3, 4) 方法 ( $CE = 1$ ) 的相对计算误差, 但保持在较低的误差水平. 另外, 即使  $CE = 6$ , SF-SFDTD(3, 4) 方法的相对计算误差仍小于 FDTD(2, 2) 方法的相对计算误差.

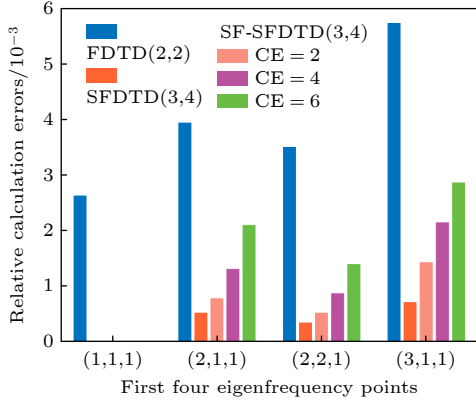


图 9 FDTD(2, 2), SFDTD(3, 4) 和 SF-SFDTD(3, 4) 方法计算所得前四个特征频率点的相对计算误差  
Fig. 9. Relative calculation errors of the first four characteristic frequency points were calculated by FDTD(2, 2), SFDTD(3, 4) and SF-SFDTD(3, 4) methods.

表 2 列出了 SFDTD(3, 4) 方法和 SF-SFDTD(3, 4) 方法取不同时间步长下的仿真时间. 由表 2 可以看出, 当  $CE = 6$  时, SF-SFDTD(3, 4) 方法的仿真时间小于传统 SFDTD(3, 4) 方法的仿真时间, 这表明在三维仿真环境下, SF-SFDTD(3, 4) 方法在取较大的时间步长情况下相较于 SFDTD(3, 4) 方法更具有计算优势.

表 2 SFDTD(3, 4) 和 SF-SFDTD(3, 4) 方法数值求解三维薛定谔方程的运行时间的运行时间  
Table 2. Execution time(s) for SFDTD(3, 4) and SF-SFDTD(3, 4) methods for solving three-dimensional Schrödinger equation.

计算方法	CE	迭代次数	运行时间/s
SFDTD(3, 4)	1	30000	117.37
SF-SFDTD(3, 4)	2	15000	231.15
SF-SFDTD(3, 4)	4	7500	121.20
SF-SFDTD(3, 4)	6	5000	79.40

## 5 结 论

本文提出了一种新的高稳定性 SF-SFDTD(3, 4) 方法用于数值计算含时薛定方程. 相较于隐式无条件稳定的时域数值计算方法, SF-SFDTD

(3, 4) 方法不改变传统 SFDTD(3, 4) 方法的迭代公式, 只需要在每一次的数值计算过程中加入空间滤波操作, 滤除因采用不满足 CFL 稳定性条件的步长而产生的空间高频分量. 因此, 该方法与传统 SFDTD(3, 4) 方法具有较高的兼容性, 数值实现较为容易. 另外, 文中给出了 SF-SFDTD(3, 4) 方法的数值稳定性和色散误差分析, 并通过数值算例验证了该方法的正确性和有效性. 总的来说, 本文所做工作为含时薛定谔方程的求解提供了一种高效的数值求解器, 也拓展了时域数值方法在量子计算领域的应用范围. 未来可以将本文所提 SF-SFDTD(3, 4) 方法用于数值求解复杂的麦克斯韦-薛定谔耦合方程, 解决半经典理论框架下的量子-电磁问题.

## 参考文献

- [1] Jin J M 2010 *Theory and Computational of Electromagnetic Fields* (Hoboken, NJ, USA: Wiley)
- [2] Harrington R F 1968 *Field Computation by Moment Methods* (New York: Macmillan)
- [3] Feng B, Chen J, Chung K L, Wang L, Li Y 2022 *IEEE Trans. Antennas Propag.* **70** 3058
- [4] Manoufali M, Mobashsher A T, Mohammed B, et al. 2020 *IEEE Trans. Biomed. Circuits Sys.* **14** 452
- [5] Schwierz F 2010 *Nat. Nanotechnol.* **5** 487
- [6] Russer P, Fichtner N, Lugli P, Porod W, Russer J A, Yordanov H 2010 *IEEE Microwave Mag.* **11** 58
- [7] Datta S 2005 *Quantum Transport: Atom to Transistor* (New York: Cambridge University Press)
- [8] Joe Y S, Satanin A M, Kim C S 2006 *Phys. Scr.* **74** 259
- [9] Griffiths D J 2004 *Introduction to Quantum Mechanics* (2nd Ed.) (Boston: Addison-Wesley)
- [10] Soriano A, Navarro E A, Porti J A, Such V 2004 *J. Appl. Phys.* **95** 8011
- [11] Sullivan D M, Citrin D S 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 104305
- [12] Zhu M, Wang Y 2020 *2020 Cross Strait Radio Science & Wireless Technology Conference (CSRSWTC)*, Fuzhou, China, October 11–14, 2020 p1
- [13] Decler P, Van Londersele A, Rogier H, Vande Ginste D 2021 *J. Comput. Appl. Math.* **381** 113023
- [14] Shen J, Sha Wei E I, Huang Z X, Chen M S, Wu X L 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 190202 (in Chinese) [沈晶, 沙威, 黄志祥, 陈明生, 吴先良 2012 物理学报 **61** 190202]
- [15] Taflove A, Hagness S C 2005 *Computational Electrodynamics: the Finite-Difference Time-Domain Method* (3rd Ed.) (Boston: Artech House)
- [16] Sarris C D 2011 *IEEE Microwave Wireless Compon. Lett.* **21** 176
- [17] Chang C, Sarris C D 2013 *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **61** 351
- [18] Gao Y J, Zhang J H, Yao Z X 2019 *J. Comput. Phys.* **397** 108853
- [19] Decler P 2018 *M. S. Thesis* (Ghent: Ghent University)
- [20] Cao Q, Chen Y, Mittra R 2002 *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **50** 1578

# Application of high-order SF-SFDTD scheme to solving a time-dependent Schrödinger equation\*

Xie Guo-Da<sup>1)2)</sup> Pan Pan<sup>1)2)</sup> Ren Xin-Gang<sup>1)2)</sup> Feng Nai-Xing<sup>1)2)</sup>  
 Fang Ming<sup>1)2)</sup> Li Ying-Song<sup>1)2)</sup> Huang Zhi-Xiang<sup>1)2)†</sup>

<sup>1)</sup> (School of Electronic and Engineering, Anhui University, Hefei 230601, China)

<sup>2)</sup> (Key Laboratory of Intelligent Computing and Signal Processing, Ministry of Education, Anhui University, Hefei 230601, China)

( Received 12 May 2023; revised manuscript received 15 October 2023 )

## Abstract

The traditional finite-difference time-domain (FDTD (2, 2)) method with second-order numerical accuracy in time and space has been extensively employed in the field of quantum mechanics to solve the Schrödinger equation. Nevertheless, the presence of the Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) condition imposes limitations on the grid size in the computational space, thereby constraining the admissible range of time steps. Accordingly, the efficiency of the FDTD(2, 2) method significantly decreases. In addition, the second-order numerical accuracy of the FDTD(2, 2) method both in time domain and in space domain often results in significant error accumulation during calculations, thereby undermining the fidelity of the simulation results. To surmount the constraints imposed by the CFL stability conditions and enhance the accuracy of computations, a novel approach termed SF-SFDTD(3, 4) method has been proposed, with 3 and 4 referring to the accuracy in space and time, respectively. This method combines spatial filtering (SF) with the high-order symplectic finite-difference time-domain (SFDTD) method. Its primary objective is to solve the time-dependent Schrödinger equation while ensuring time stability and scalability. The SF-SFDTD(3, 4) method obviates the need for further deriving the iterative formula employed in the conventional SFDTD(3, 4) method. Therefore, the method under consideration exhibits a remarkable degree of compatibility with its traditional counterpart. It is merely necessary to include a spatial filtering operation during each numerical iteration to eliminate spatial high-frequency components arising from the utilization of time step sizes that fail to satisfy the CFL stability condition, thereby ensuring the stability of the numerical scheme. Moreover, when the time step value satisfies the CFL stability condition, the amplitude of the high-frequency component approaches zero, thereby exerting a minimal influence on the accuracy of the computational results. The adoption of time steps that do not meet the CFL stability conditions leads to an amplification in the amplitude of the high-frequency component. However, this finding solely affects the stability of the computational results, and the elimination of these unstable high-frequency components scarcely affect the accuracy of the computational results. The SF-SFDTD(3, 4) retains the simplicity and efficacy inherent in the traditional SFDTD(3, 4) methods, while enhancing computational efficiency. Additionally, the numerical stability and dispersion error of the SF-SFDTD(3, 4) method are analyzed theoretically. Finally, the validity and efficacy of the proposed method are corroborated through numerical illustrations.

**Keywords:** symplectic finite-difference time-domain method, spatial filtering, time stability condition, Schrödinger equation

**PACS:** 02.70.Bf, 42.50.Nn

**DOI:** 10.7498/aps.73.20230771

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 62201003, 2022YFA1404003, 62101002, U20A20164, 61901001).

† Corresponding author. E-mail: [zxhuang@ahu.edu.cn](mailto:zxhuang@ahu.edu.cn)



## 高阶SF-SFDTD方法在含时薛定谔方程求解中的应用研究

谢国大 潘攀 任信钢 冯乃星 方明 李迎松 黄志祥

### Application of high-order SF-SFDTD scheme to solving a time-dependent Schrödinger equation

Xie Guo-Da Pan Pan Ren Xin-Gang Feng Nai-Xing Fang Ming Li Ying-Song Huang Zhi-Xiang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 030201 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20230771

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20230771>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 基于图形处理器加速数值求解三维含时薛定谔方程

Numerical solution of three-dimensional time-dependent Schrödinger equation based on graphic processing unit acceleration

物理学报. 2020, 69(23): 234202 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200700>

#### 非线性薛定谔方程的高阶分裂改进光滑粒子动力学算法

Numerical study of nonlinear Schrödinger equation with high-order split-step corrected smoothed particle hydrodynamics method

物理学报. 2019, 68(9): 090203 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190169>

#### 基于时域有限差分法的核壳双金属纳米颗粒光吸收率反转行为

Reversal behavior of optical absorption rate of bimetallic core-shell nanoparticles based on finite-difference time-domain method

物理学报. 2021, 70(20): 207801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210602>

#### 一种新的基于频域有限差分方法的小周期有机太阳能电池的光电特性

Optical and electrical properties of short-pitch solar cells with finite-difference frequency-domain method

物理学报. 2018, 67(17): 178102 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180821>

#### 非水平海底情况下海底地震波时域有限差分数值模拟

Seabed seismic wave simulation by finite difference time domain scheme in marine environment with complex seafloor topography

物理学报. 2021, 70(22): 224303 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210634>

#### 四阶色散非线性薛定谔方程的明暗孤立波和怪波的形成机制

Study on the generation mechanism of bright and dark solitary waves and rogue wave for a fourth-order dispersive nonlinear Schrödinger equation

物理学报. 2020, 69(1): 010502 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191384>