

doi:10.3788/gzxb20154404.0419002

高阶辛算法在典型量子器件模拟中的应用

王丽华, 黄志祥, 况晓静, 吴先良

(安徽大学 计算智能与信号处理教育部重点实验室, 合肥 230039)

摘要:利用辛积分和高阶交错差分方法建立了求解含时薛定谔方程的高阶辛算法(SFDTD(4,4)).对空间部分的二阶导数采用四阶准确度的差分格式离散得到随时间演化的多维系统再引入四阶辛积分格式离散;探讨了SFDTD(4,4)法的稳定性,获得了含时薛定谔方程的一维以及多维的稳定性条件,并得到在含势能情况下该稳定性条件的具体表达式;借助复坐标沿伸概念,实现了SFDTD(4,4)法在量子器件模拟中的完全匹配层吸收边界条件.结合一维量子阱和金属场效应管传输的仿真,结果表明较传统的时域有限差分算法,SFDTD(4,4)有着更好的计算准确度,适用于长时间仿真.算法及相关结果可为实际量子器件的设计提供必要的参考.

关键词:辛积分;薛定谔方程;高阶辛算法;稳定性条件;量子器件

中图分类号:O471.1

文献标识码:A

文章编号:1004-4213(2015)04-0419002-7

Application of High-order Symplectic FDTD Scheme to Typical Quantum Devices

WANG Li-hua, HUANG Zhi-xiang, KUANG Xiao-jing, WU Xian-liang

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

Abstract: Using symplectic integrators and staggered spatial differences to establish a new high-order Symplectic Finite-Difference Time-Domain scheme (SFDTD(4,4)) for solving time-dependent Schrödinger equation. The fourth-order accuracy difference scheme for the second derivative of the space segment is to obtain the time evolution of the multi-dimensional system and then introducing the fourth order symplectic integrator for discrete; the numerical stability is obtained with SFDTD(4,4) scheme, one-or multi-dimensional stability conditions for Schrödinger equation with nonzero potential energy are also derived; the perfect absorbing boundary condition of SFDTD(4,4) scheme for quantum devices is achieved by the concept of stretching coordinate. The simulated results of a one-dimensional quantum well and metal MOSFET confirm the preference of the SFDTD(4,4) scheme over the traditional finite-difference time-domain scheme. The SFDTD(4,4) scheme, which is high-order-accurate and energy conserving, is well suited for long term simulation. The results can be used as a necessary reference for the design of new quantum devices.

Key words: Symplectic integrators; Schrödinger equation; High-order symplectic finite-difference time-domain scheme; Stability condition; Quantum devices

OCIS Codes: 190.5970; 160.4236; 250.5590; 270.5580; 350.5500

0 引言

随着电子器件,如晶体管变得越来越小,量子力学将发挥更大的作用^[1],而电子器件的性能决定于其中

电子的输运特性^[2].一方面需要发展一种合适的理论框架及相应的建模工具,以便在量子尺度定量地预测纳米体系的本征量子输运性质.经过长期的发展,解决量子器件输运的基本方法是基于Keldysh非平衡格林

基金项目:国家自然科学基金(Nos. 61101064, 61471001, 61301062)、教育部新世纪优秀人才基金(No. NCET-12-0596)、安徽省青年基金(Nos. 1508085JGD03, 1508085QF130)和安徽省高校优秀青年人才基金重点项目(No. 2013SQRL065ZD)资助

第一作者:王丽华(1982-),女,讲师,硕士,主要研究方向为电磁散射及数值方法. Email: lhwang@ahu.edu.cn

通讯作者:黄志祥(1979-),男,教授,博士,主要研究方向为电磁高性能计算及新型材料电磁特性. Email: zxhuang@ahu.edu.cn

收稿日期:2014-11-06; **录用日期:**2015-01-06

<http://www.photon.ac.cn>

函数理论^[3]和散射矩阵理论^[4],这些方法已较为成熟,且相互之间联系较为紧密.在过去几年的实践中,这些方法成功地应用于纳米体系量子输运性质的预测^[5-7],例如半导体太阳能电池、纳米线场效应晶体管、磁隧道节、碳纳米电子学、电子迁移等.另一方面,量子器件的输运问题,由于器件具有复杂的材料和结构,其模拟对计算机依赖性很强.所以在研究理论模型的同时,还需要加强数值求解方法以及相应软件的研究.而时域有限差分(Finite-Difference Time-Domain, FDTD)法以其简单直观的特点已成为电磁学数值计算的一种成熟的方法,也是求解薛定谔方程常用的数值方法^[8-10].该算法利用二阶准确度的中心差分近似旋度方程中的时间及空间微分算符,极易处理非均匀媒质的情形.然而,它的计算准确度相对较低,无法克服在长时间仿真中产生的色散误差.

在20世纪80年代,冯康和Ruth分别独立建立了求解Hamilton系统的隐式辛算法和显式辛算法.大量实验已证明辛算法在Hamilton系统数值计算中具有保能量和长时间仿真的优势,并在经典力学^[11],电磁学^[12-13],太阳系动力学^[14-15]和量子力学^[16]等领域得到迅猛的发展和广泛的应用.本文主要针对薛定谔方程,建立了求解含时薛定谔方程的高阶辛算法(High Order Symplectic Finite-Difference Time-Domain, SFDTD(4,4))法,结合量子力学中的物理概念,系统的讨论了SFDTD(4,4)法求解含时薛定谔方程的数值稳定性条件,实现了SFDTD(4,4)法在量子器件模拟中的完全匹配层吸收边界条件,并运用该方法对典型的量子器件的输运现象进行了仿真运算.

1 高阶辛算法理论

含时薛定谔方程的表示式为

$$-j_0 h \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x,t) \quad (1)$$

式中, $j_0 = \sqrt{-1}$; h 为普朗克常量; m 为粒子质量; $\psi(x, t)$ 为波函数; $V(x)$ 为势函数. 为了避免使用复数, 将波函数 $\psi(x, t)$ 分为实数和虚数部分, 即

$$\psi(x, t) = \psi_R(x, t) + j_0 \psi_I(x, t) \quad (2)$$

将式(2)代入式(1),可以得到耦合方程

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi_R(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi_I(x, t)}{\partial x^2} + \frac{1}{h} V(x) \psi_I(x, t) \\ \frac{\partial \psi_I(x, t)}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi_R(x, t)}{\partial x^2} - \frac{1}{h} V(x) \psi_R(x, t) \end{cases} \quad (3)$$

1.1 时间离散

通过运算,式(3)可以改写为

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_I \end{pmatrix} = (\mathbf{M} + \mathbf{N}) \begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_I \end{pmatrix} \quad (4)$$

式中 $\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & \kappa \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $\mathbf{N} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\kappa & 0 \end{pmatrix}$, $\kappa = -\frac{\hbar}{2m_c} \left(\frac{\partial}{\partial x^2} \right) +$

$\frac{V}{h}$.

式(4)从 $t=0$ 到 $t=\Delta_t$ 的时间演化为

$$\begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_I \end{pmatrix} (\Delta_t) = \exp(\Delta_t (\mathbf{M} + \mathbf{N})) \begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_I \end{pmatrix} (0) \quad (5)$$

式中 $\exp(\Delta_t (\mathbf{M} + \mathbf{N}))$ 为薛定谔方程的时间演化矩阵.

利用 m 级 p 阶显示辛积分技术近似时间演化矩阵^[12]

$$\exp(\Delta_t (\mathbf{M} + \mathbf{N})) = \prod_{i=1}^m \exp(d_i \Delta_t \mathbf{N}) \exp(c_i \Delta_t \mathbf{M}) + O(\Delta_t^{p+1}) = \prod_{i=1}^m (1 + d_i \Delta_t \mathbf{N}) (1 + c_i \Delta_t \mathbf{M}) + O(\Delta_t^{p+1}) \quad (6)$$

常见的辛算子满足时间可逆或者对称条件^[13].该方法可以保证薛定谔方程能量守恒性且没有幅度误差.其中 c_i 和 d_i 为辛算子, p 为近似阶数.本文中,选择 $m=4$, $p=4$, 系数满足: $c_1=0.11189654$, $c_2=0.70350157$, $c_3=-0.14654317$, $c_4=0.53114506$, $d_i=c_{m-i+1}$ ($1 \leq i \leq 4$), 构造出四步四阶的显式辛算法,可以看出,该方法具有显式逐级递推的特点,和其他一些隐式算法相比,大大节约了内存,提高了计算效率.

1.2 空间差分离散

基于交错差分近似算符 κ 中的二阶偏导数,设波函数

$$\psi^{n+l/m}(i) = \psi^{n+l/m}(i\Delta_x, (n+\tau_l)\Delta_t) \quad (7)$$

为近似离散点 $(i\Delta_x)$ 在第 n 时间步的第 l 级的步进离散表达式,每个时间步需要 m 级时间步进,且第 l 级步进对应的时间增量 $\tau_l \Delta_t$.

利用四阶交错差分离散空间二阶导数,可以得到四阶中心差分为

$$\frac{\partial^2 \psi_\delta^{n+l/m}(i)}{\partial x^2} = \frac{-\psi_\delta^{n+l/m}(i-2) + 16\psi_\delta^{n+l/m}(i-1) - 30\psi_\delta^{n+l/m}(i) + 16\psi_\delta^{n+l/m}(i+1) - \psi_\delta^{n+l/m}(i+2)}{12\Delta x^2} \quad (8)$$

式中 $\delta=R, I$. 在文中,空间采用四阶准确度的差分离散格式,时间上采用四阶辛积分格式离散,即 SFDTD(4,4)法.波函数实部和虚部的迭代公式为

$$\begin{cases} \psi_R^{n+l/m}(i) = \psi_R^{n+(l-1)/m}(i) + \frac{\Delta t}{h} V(i) \psi_I^{n+l/m}(i) - \alpha_{x1} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \cdot \\ \frac{\hbar}{2m} [\psi_I^{n+l/m}(i+1) - 2\psi_I^{n+l/m}(i) + \psi_I^{n+l/m}(i-1)] - \\ \alpha_{x2} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{\hbar}{2m} [\psi_I^{n+l/m}(i+2) - 2\psi_I^{n+l/m}(i) + \psi_I^{n+l/m}(i-2)] \\ \psi_I^{n+(l+1/2)/m}(i) = \psi_I^{n+(l-1/2)/m}(i) - \frac{\Delta t}{h} V(i) \psi_R^{n+l/m}(i) + \\ \beta_{x1} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{\hbar}{2m} [\psi_R^{n+l/m}(i+1) - 2\psi_R^{n+l/m}(i) - \psi_R^{n+l/m}(i-1) \\ (i-1)] + \beta_{x2} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{\hbar}{2m} [\psi_R^{n+l/m}(i+2) - 2\psi_R^{n+l/m}(i) - \\ \psi_R^{n+l/m}(i-2)] \end{cases} \quad (9)$$

式中 $\alpha_{x1} = \frac{4}{3}c_l, \alpha_{x2} = -\frac{1}{12}c_l, \beta_{x1} = \frac{4}{3}d_l, \beta_{x2} = -\frac{1}{12}d_l$.

2 数值稳定性分析

对于高阶辛算法的数值稳定性分析,首先推导一维的情况,然后推广至三维.已知任意 n 时刻波函数 $\psi^n = (\psi_R^n, \psi_I^n)^T$, 则 $n+1$ 时刻波函数 $\psi^{n+1} = (\psi_R^{n+1}, \psi_I^{n+1})^T$ 可表示为

$$\psi^{n+1} = S\psi^n \quad (10)$$

算法稳定的充要条件为 $|\lambda| \leq 1$, 其中 λ 为稳定度矩阵 S 的特征值. 假设波函数为

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

$$k_x = k_0 \sin \theta \cos \varphi, k_y = k_0 \sin \theta \sin \varphi, k_z = k_0 \cos \theta \quad (11)$$

其中 k_0 为波数, θ, φ 为球面角.

利用四阶交错差分离散空间二阶偏导数, 即

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \approx \sum_{r=-2}^2 W_r \frac{\psi(i+r, j, k) - \psi(i, j, k)}{\Delta x^2} =$$

$$\sum_{r=-2}^2 W_r \frac{\exp(-j_0 r k_x \Delta x)}{\Delta x^2} \psi(i, j, k) = \eta_x \psi \quad (12)$$

式中 W_r 系数参考式(8).

因此式(4)对应的一维薛定谔方程的空间差分形式为

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\hbar}{2m}\eta_x + \frac{V}{\hbar} \\ \frac{\hbar}{2m}\eta_x - \frac{V}{\hbar} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_I \end{pmatrix} \quad (13)$$

时间上采用高阶辛积分技术逼近薛定谔方程的时间演化矩阵, 则稳定度矩阵 S 可写成

$$S = \prod_{l=1}^m \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \left(\frac{\hbar}{2m}\eta_x - \frac{V}{\hbar}\right)d_l \Delta t & 1 \end{pmatrix} \cdot$$

$$\begin{pmatrix} 1 & \left(-\frac{\hbar}{2m}\eta_x + \frac{V}{\hbar}\right)c_l \Delta t \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (14)$$

由于每一级步进变换均为辛变换, 所以 $\det(S) = 1$. 则稳定度矩阵 S 的特征值 λ 满足的特征方程为

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

其中 $\text{tr}(S)$ 为矩阵的迹. 式(15)的解为 $\lambda_{1,2} = \frac{\text{tr}(S) \pm j_0 \sqrt{4 - \text{tr}(S)^2}}{2}$, 稳定性条件要求 $|\lambda_{1,2}| = 1$, 所以只需 $\text{tr}(S) \leq 2$ 即可. 将式(15)中矩阵依次相乘, 可得

$$\text{tr}(S) = 2 + \sum_{l=1}^m (-1)^l g_l \left(\left(\frac{\hbar}{2m}\eta_x - \frac{V}{\hbar} \right)^2 \Delta_l^2 \right)^l \quad (16)$$

$$g_l = \sum_{1 \leq i_1 \leq j_1 < i_2 \leq j_2 < \dots < i_l \leq j_l \leq m} c_{i_1} d_{j_1} c_{i_2} d_{j_2} \dots c_{i_l} d_{j_l} +$$

$$\sum_{1 \leq i_1 < j_1 \leq i_2 < j_2 \leq \dots \leq i_l < j_l \leq m} d_{i_1} c_{j_1} d_{i_2} c_{j_2} \dots d_{i_l} c_{j_l} \quad (17)$$

以上结果可以进一步推广到三维含势能薛定谔方程的数值稳定性, 即

$$\text{tr}(S) = 2 + \sum_{l=1}^m (-1)^l g_l \left(\left(\frac{\hbar}{2m}(\eta_x + \eta_y + \eta_z) - \frac{V}{\hbar} \right)^2 \Delta_l^2 \right)^l \quad (18)$$

因此, 可以得到

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} - \frac{3}{8\sqrt{d}} \frac{V}{\hbar} \Delta t} \leq \text{CFL} \quad (19)$$

式中, CFL 为稳定度常量, $d=1, 2, 3$, 表示维数. 表 1 列出了传统的 FDTD(2,2)方法, 在空间采用四阶准确度离散的高阶 FDTD(2,4)以及 SFDTD(4,4)法的最大稳定度.

表 1 各种算法的最大稳定度比较

Table 1 The numerical stability for various algorithms

Algorithm	CFL
FDTD(2,2)	$1/\sqrt{d}$
FDTD(2,4)	$0.866/\sqrt{d}$
SFDTD(4,4)	$1.287/\sqrt{d}$

由表 1 可见, 当空间采用高阶交错差分格式时, 高阶辛算法可提高算法的稳定度.

3 吸收边界条件

电磁场模拟计算中, 完全匹配层 (Perfectly Matched Layer, PML) 的概念和技术已经相当成熟, 用来吸收计算域的外向行波. 但在量子问题的模拟中, 主要采用的仍是 PEC 边界条件^[16]. 本文在算例应用中分别采用 PEC 边界计算薛定谔方程的能量本征值和采用复坐标沿伸匹配层 (Stretched Coordinate-PML, SC-PML)^[8]实现了高阶辛算法在量子器件模拟中的完全匹配层吸收边界条件, 并推导了含边界条件的高阶 SFDTD 算法的迭代公式.

SC-PML 方法是将薛定谔方程映射到复数拉伸坐标空间. 引入拉伸坐标变量

$$\delta_x = 1 + R\sigma_x \quad (20)$$

其中 σ_x 是 PML 内沿 x 方向变化的电导率. 则薛定谔方程可以改写为

$$-i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left[\frac{\hbar^2}{2m} \gamma(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right] \psi(x, t) \quad (21)$$

利用 SFDTD(4,4)法展开, 其中 $\gamma(x) = \frac{1}{\delta_x^2}$ 能得到式(9)的更新形式为

$$\psi_R^{n+l/m}(i) = \psi_R^{n+(l-1)/m}(i) + \frac{\Delta t}{\hbar} V(i) \psi_I^{n+l/m}(i) - \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{\hbar}{2m} \{ \gamma_{\text{real}} \alpha_{x1} [\psi_I^{n+l/m}(i+1) - 2\psi_I^{n+l/m}(i) + \psi_I^{n+l/m}(i-1)] +$$

$$\gamma_{\text{real}} \alpha_{x2} [\psi_I^{n+l/m}(i+2) - 2\psi_I^{n+l/m}(i) + \psi_I^{n+l/m}(i-2)] \} - \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{\hbar}{2m} \{ \gamma_{\text{imag}} \alpha_{x1} [\psi_R^{n+l/m}(i+1) - 2\psi_R^{n+l/m}(i) +$$

$$\begin{aligned} & \psi_R^{n+l/m}(i-1)] + \gamma_{\text{imag}} \alpha_{x2} [\psi_R^{n+l/m}(i+2) - 2\psi_R^{n+l/m}(i) + \psi_R^{n+l/m}(i-2)] \} \\ \psi_i^{n+l+1/2/m}(i) = & \psi_i^{n+(l-1/2)/m}(i) - \frac{\Delta t}{h} V(i) \psi_R^{n+l/m}(i) + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{h}{2m} \{ \gamma_{\text{real}} \beta_{x1} [\psi_R^{n+l/m}(i+1) - 2\psi_R^{n+l/m}(i) + \psi_R^{n+l/m}(i-1)] + \\ & \gamma_{\text{real}} \beta_{x2} [\psi_R^{n+l/m}(i+2) - 2\psi_R^{n+l/m}(i) + \psi_R^{n+l/m}(i-2)] \} - \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{h}{2m} \{ \gamma_{\text{imag}} \beta_{x1} [\psi_i^{n+l/m}(i+1) - 2\psi_i^{n+l/m}(i) + \\ & \psi_i^{n+l/m}(i-1)] + \gamma_{\text{imag}} \beta_{x2} [\psi_i^{n+l/m}(i+2) - 2\psi_i^{n+l/m}(i) + \psi_i^{n+l/m}(i-2)] \} \end{aligned} \quad (22)$$

对于二维、三维情况下的边界条件,可类似得到.

为了验证吸收效果的有效性,对 SC-PML 和 PEC 边界的传输效果进行了仿真. 选取半导体材料 GaAs 为仿真材料,其中传播距离为 120 nm, $\Delta_x = 0.4$ nm, 时间稳定性常量 $\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{h}{2m} = 0.125$. 图 1 左右两边为 SC-PML 边界,厚度各为 20 nm,即各为 50 个仿真单元. 图 1、2 给出了两种不同边界情况下,波函数随时间的变

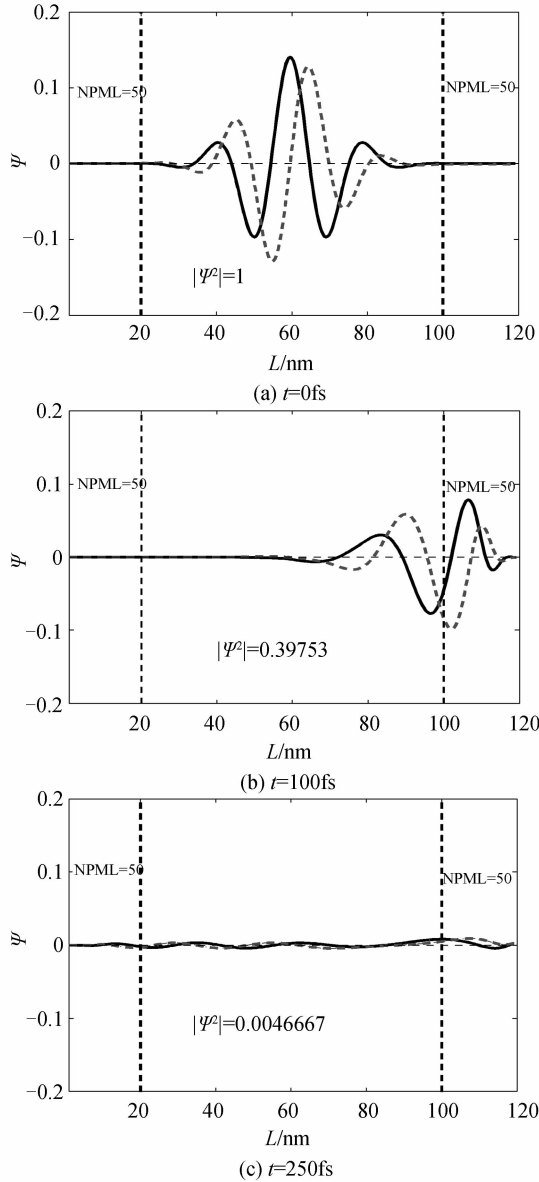


图 1 不同传输时间下的 PML 吸收效果图
Fig. 1 The absorbing effect of PML on different transmission time

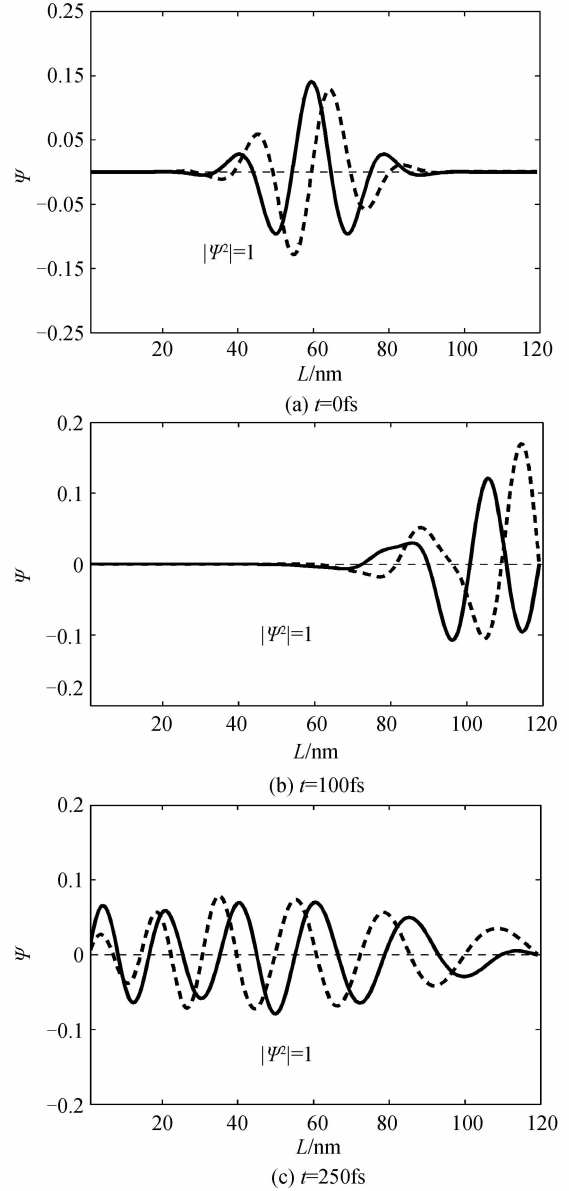


图 2 不同传输时间下的 PEC 边界效果图
Fig. 2 The effect of PEC boundary on different transmission time

化结果,图中实线表示波函数的实部,虚线表示波函数的虚部, $|\psi|^2$ 归一化后波函数模的平方. 图 1(b) 说明当波传播至右侧的吸收边界区域,波函数被吸收且没有明显的反射;图 1(c) 随传输时间的增加, $|\psi|^2$ 降低至低于归一化的 0.5%,说明波几乎被吸收. 从仿真结果可以看出,SC-PML 吸收边界条件吸收效果较好.

4 数值结果及讨论

4.1 薛定谔方程的能量本征值

一维无限深势阱表示为

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & \text{其他} \end{cases} \quad (23)$$

式中, a 表示量子阱宽度. 这一模型有精确的能量本征值为

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, n=1, 2, 3 \dots \quad (24)$$

分别采用传统的 FDTD 法, FDTD(2,4) 法, SFDTD(2,2) 法和 SFDTD(4,4) 法计算该问题, 采用 PEC 边界条件, 并将结果与解析解比较, 计算各方法的能量本征值的相对误差^[14]

$$\Delta E_n = -\lg |\tilde{E}_n - E_n| / E_n \quad (25)$$

式中: \tilde{E}_n 和 E_n 分别表示数值和解析的能量本征值.

图 3 给出了各算法的能量本征值误差随能级 n 的变化曲线. 结果表明 SFDTD(4,4) 法在能量本征值准确度方面好于传统的辛算法一个数量级而好于 FDTD(2,4) 法以及 FDTD(2,2) 法约 2-3 个数量级.

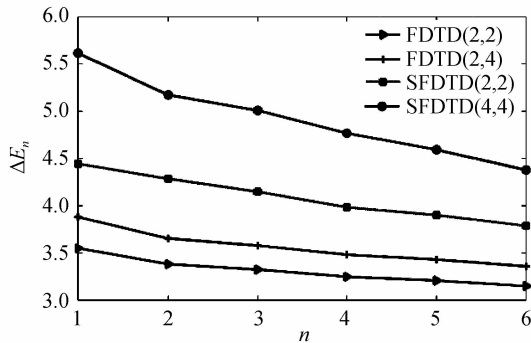


图 3 各种算法所得能量本征值相对误差

Fig. 3 Relative error of the energy eigenvalues for various algorithms

4.2 一维量子阱的输运

本文选取的一维量子阱^[17]如图 4, GaAs 阱宽 L_W 为 8 nm, $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ 势垒厚度 L_B 为 2 nm, 势垒高度为 0.35 eV. 假设计算区域为 $[0, 119 \text{ nm}]$, $\Delta x = 0.4 \text{ nm}$, 时间稳定性常量 $\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{\hbar}{2m} = 0.125$, 边界条件采用 SC-PML 方法. 传输系数为

$$TM(E) = \left| \frac{\psi_{out}(E)}{\psi_{in}(E)} \right|^2 \quad (26)$$

式中 $\psi_{in}(E)$ 定义为对入射波函数 $\psi_{in}(t)$ 的傅里叶变换, $\psi_{out}(E)$ 定义为传输穿透量子阱的波函数 $\psi_{out}(t)$ 的傅里叶变化. 选择入射波函数和透射波函数的监测点分别为图 4 中 30 nm 处和 95 nm 处.

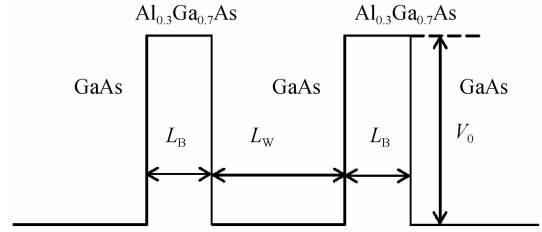


图 4 一维量子阱示意图

Fig. 4 One dimensional quantum well

图 5 给出了波函数在一维量子阱中的传输结果, 经过足够长时间后, 波函数被 PML 吸收, 对入射波函数和透射波函数求解傅里叶变化, 结果如图 6; 传输系数由式(26)可得, 如图 7, 高阶辛算法 SFDTD(4,4) 法计算结果与格林函数求得的解析解吻合较好, 比 FDTD(2,4) 法以及传统 FDTD(2,2) 法更加准确. 图 8(a) 中, 将量子阱宽 L_W 固定在 8 nm, 使势垒厚度 L_B 由 3.2 nm 到 1.2 nm 之间变化, 其共振峰位置基本不变化, 而隧穿几率随 L_B 减小而显著增大; 图 8(b) 中, 将 L_B 固定在 2 nm, 使 L_W 从 4 nm 增加到 12 nm, 则隧穿几率的峰值位置向低能侧移动, 同时峰值半宽也将随之减小.

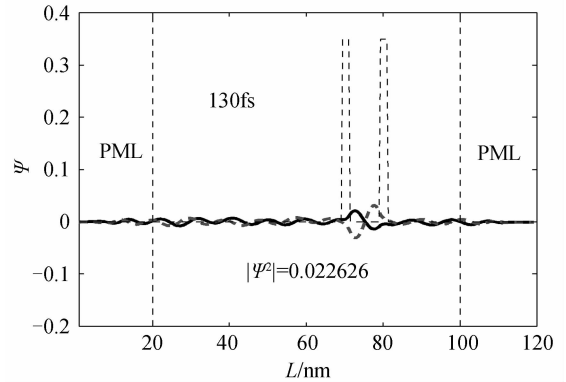


图 5 波在一维量子阱中的传输示意图

Fig. 5 A waveform is transmitted through the channel

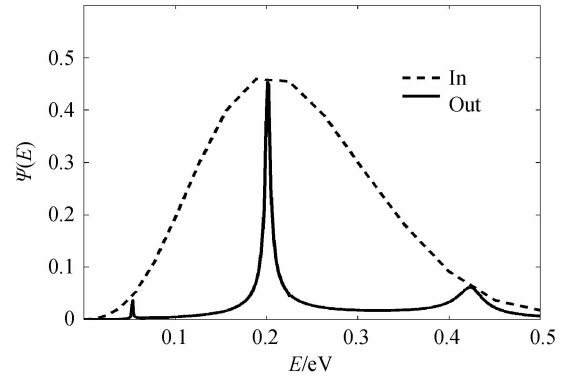


图 6 入射波和透射波在监测点的傅里叶变换结果

Fig. 6 The fourier transform of incident wave and transmission wave on monitoring

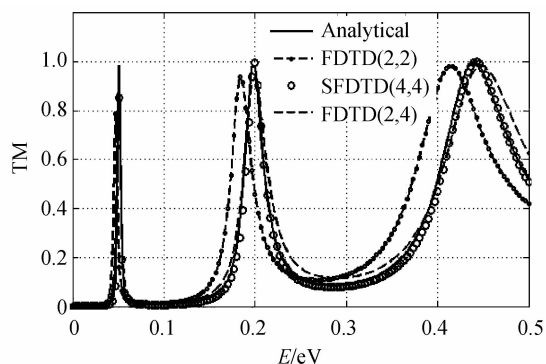
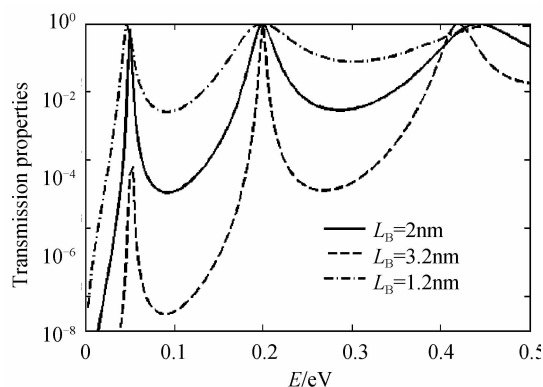
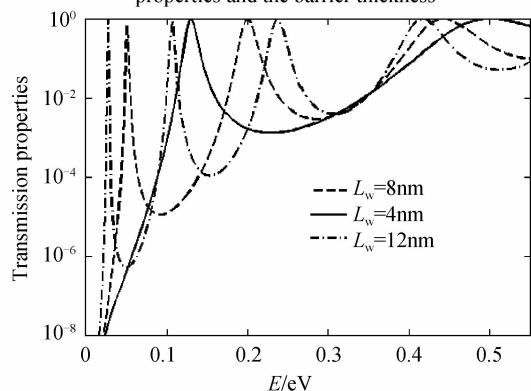


图 7 传输系数

Fig. 7 Transmission coefficient



(a) The changing relations between transmission properties and the barrier thickness



(b) The changing relations between transmission properties and the well width

图 8 隧穿几率与结构参数的关系

Fig. 8 The relations between transmission properties and structural parameters

4.3 MOSFET 管的仿真传输

对于 n 沟道增强型的 MOSFET 管^[18] 运输的仿真, 假定电势能为 0.2 eV, MOSFET 管给定的栅极电压后, 电流由漏-源电压确定的, 设漏-源电压 V_{DS} 为 0.1 V. 入射波函数和透射波函数的监测点分别为 30 nm 处和 95 nm 处, 经过足够长的时间步, 对监测点的波函数进行傅里叶变换, 由式(26)计算其传输系数. 则电流可以通过通道的费米分布计算为

$$I = \frac{q}{h} \int_0^{\infty} TM(E) \cdot g(f_1(E) - f_2(E)) dE \quad (27)$$

式中 TM 为传输系数, f_1 和 f_2 为左右通道的费米分布^[4].

图 9 给出了入射波形和透射波形的傅里叶变换结果, 图 10 给出了传输系数. 图 11 给出了通道电流的仿真结果, 图中实线为左通道的费米分布, 虚线为右通道的费米分布, 假设左通道的费米能量是 0.35 eV. 涂黑部分为式(27)中的积分结果. 据此可以计算电流 $I = 3.70(\mu A)$, 该器件的量子电导 $G = I/V_{DS} = 37(\mu S)$. 该量子电导计算结果与文献[2]中给出的解析解计算结果 $G = 36.9(\mu S)$ 一致. 为高阶 SFDTD 方法在量子器件仿真中的深入研究提供了重要的理论基础.

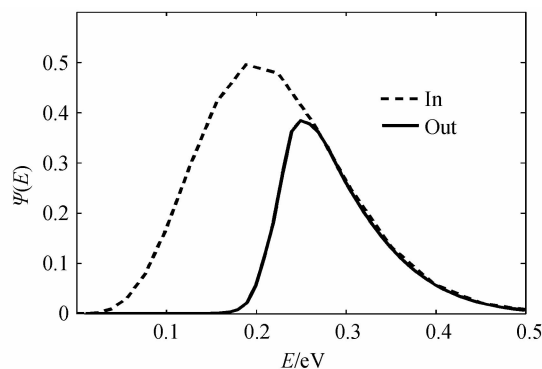


图 9 入射波和透射波在监测点的傅里叶变换结果
Fig. 9 The fourier transform of incident wave and transmission wave on monitoring

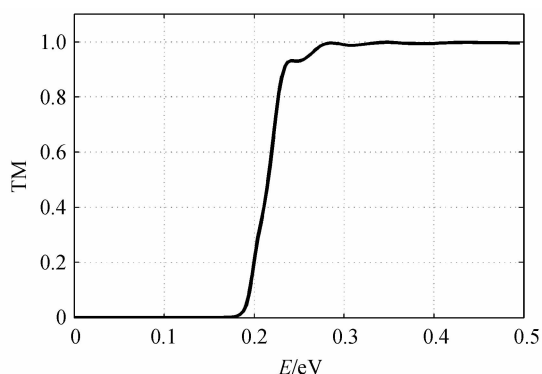


图 10 传输系数

Fig. 10 Transmission coefficient

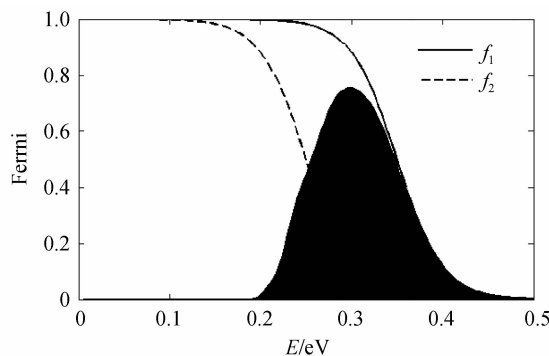


图 11 MOSFET 管的通道电流

Fig. 11 The channel current of MOSFET tube

5 结论

高阶辛算法 SFDTD(4,4)方法,是一种时间四阶准确度,空间四阶准确度,且条件稳定的算法.本文推导得到了含势能的高阶时域方法稳定性条件,给出了不同维数情况下的稳定性常量.借助复坐标沿伸概念,实现了 SFDTD(4,4)法在量子器件模拟中得的完全匹配层吸收边界条件.数值仿真结果证明了 SFDTD(4,4)方法在稳定性和准确度等方面的优势,为高阶 SFDTD 方法在量子器件仿真中的深入研究提供了重要的理论基础.

参考文献

- [1] DAATA S. Quantum transport: atom to transistor[M]. New York: Cambridge University Press, 2005.
- [2] SULLIVAN D M. Quantum mechanics for electrical engineers [M]. Hoboken: John Wiley & Sons, 2012.
- [3] MILAN B, STEFAN S, CHRISTOPHER P S. Quantum inductance and high frequency oscillators in graphene nanoribbons[J]. *Nanotechnology*, 2011, **22**(16): 165203.
- [4] MENCARELLI D, ROZZI T, PIERANTOMI L. Scattering matrix approach to multichannel transport in many lead graphene nanoribbons[J]. *Nanotechnology*, 2010, **21**(15): 155701.
- [5] MARTEL R, SCHMIDT T, SHEA H R, *et al.* Single and multiwall carbon nanotube field-effect transistor[J]. *Applied Physics Letters*, 1998, **73**(17): 2447-2449.
- [6] 彭英才,赵新为,傅广生.低维半导体物理[M].北京:国防工业出版社,2011:148-150.
- [7] HUANG Bing, YAN Qi-min, LI Zuan-yi, *et al.* Towards graphene nanoribbon-based electronics [J]. *Frontiers of Physics in China*, 2009, **4**(3): 269-279.
- [8] SULLIVAN D M, WILSON P M. Time-domain determination of transmission in quantum nanostructures [J]. *Journal of Applied Physics*, 2012, **112**(6): 064325.
- [9] HUANG Z, KOSCHNY T, SOUKOULIS C M. Theory of pump-probe experiments of metallic metamaterials coupled to a gain medium[J]. *Physical Review Letters*, 2012, **108**(18): 187402.
- [10] HUANG Z, WU B, ZHANG H, *et al.* Parallel implication of 3-D FDTD method in a four-level atomic system[J]. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2012, **48**(7): 908-914.
- [11] 冯康.哈密尔顿系统的辛几何算法[M].杭州:浙江科学技术出版社,2003.
- [12] HUANG Z, WU X L. Optimal symplectic integrators for numerical solution of time-domain Maxwell's equations[J]. *Microwave and Optical Technology Letters*, 2007, **49**(3): 545-547.
- [13] SHA W, HUANG Z, WU X L. Total field and scattered field technique for fourth-order symplectic finite difference time domain method[J]. *Chinese Physics Letter*, 2006, **23**(7): 103-105.
- [14] LI Rong, WU Xin. A symmetric product of two optimal third-order force gradient symplectic algorithms [J]. *Acta Physica Sinica*, 2010, **59**(10): 7135.
李荣,伍歆.两个三阶最优化力梯度辛积分器的对称组合[J].物理学报,2010,**59**(10): 7135.
- [15] LI Rong, WU Xin. Two new fourth-order three-stage symplectic integrators[J]. *Chinese Physics Letters*, 2011, **28**(7): 070201.
- [16] SHEN J, SHA W, HUANG Z, *et al.* High-order symplectic FDTD scheme for solving a time-dependent Schrodinger equation[J]. *Computer Physics Communication*, 2013, **184**(3): 480-492.
- [17] LIU Jiang-tao, TAN Zhen-xing, HU Ai-rong, *et al.* Photonic crystal optical filter based on GaAs/Al_xGa_{1-x}As multiple quantum wells[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2010, **39**(11): 1947-1950.
刘江涛,谈振兴,胡爱荣,等.基于 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 多量子阱光子晶体的窄带滤波器[J].光子学报,2010,**39**(11):1947-1950.
- [18] HAN Ming-jun, KE Dao-ming, CHI Xiao-li. A 2D semi-analytical model for the potential distribution of ultra-short channel MOSFET [J]. *Acta Physica Sinica*, 2013, **62**(9): 098502.
韩名君,柯导明,迟晓丽.超短沟道 MOSFET 电势的二维半解析模型[J].物理学报,2013,**62**(9):098502.