

广东工业大学硕士学位论文

(工学硕士)

量子器件中多维 Poisson-Schrodinger 方程有限
元求解

林栋华

二〇一八年五月

分类号:

学校代号: 11845

UDC:

密级:

学 号: 2111503025

广东工业大学硕士学位论文

(工学硕士)

量子器件中多维 Poisson-Schrodinger 方程有限 元求解

林栋华

指导教师姓名、职称: 刘东峰 教授

专业或领域名称: 信息与通信工程

学生所属学院: 信息工程学院

论文答辩日期: 2018 年 5 月

A Dissertation Submitted to Guangdong University of Technology
for the Degree of Master
(Master of Engineering Science)

Finite Element Solution of Multidimensional
Poisson-Schrodinger Equation in Quantum Devices

Candidate: Donghua Lin
Supervisor: Prof. Dongfeng Liu

May 2018
Faculty of Information Engineering
Guangdong University of Technology
Guangzhou, Guangdong, P. R. China, 510006

摘要

近年来,随着半导体技术的不断发展,研究人员提出并实现了大量新型半导体器件原型。这些半导体器件的工作原理与器件内部的量子特性有关。目前,外延生长技术的发展使得量子器件的优越性更加突出,量子器件已经广泛应用于红外探测器、激光器研制、无线通信系统等生产和科研领域。因此,选取有效的方法分析出量子器件的物理特性显得尤为重要。在物理等科研领域中,Poisson 方程和 Schrodinger 方程是现代量子物理研究中十分重要的偏微分方程。通过求解微观系统中的 Schrodinger 方程,可以得到波函数以及能量,从而分析出量子系统中粒子的分布情况。通过求解 Poisson 方程,可以得出器件的电势分布。在量子器件理论计算中,需要使用 Poisson-Schrodinger 方程的精确解来分析量子器件的物理特性。所以寻找更有效的方法求解这两条方程成为本次研究的重要课题。

本文从多维的角度出发,提出使用有限元方法来研究分析 Poisson-Schrodinger 方程,给出具体的有限元方法求解方程的具体思路和步骤。本文的工作内容如下:

(1) 基于有限元方法的 FEniCS 库只能求解偏微分方程的变分形式,本文需要先将 Poisson-Schrodinger 偏微分方程变化成为变分方程。

(2) 利用开源 FEniCS 库,编写 Python 程序定义 Poisson 方程和 Schrodinger 方程的变分形式。

(3) 通过设置好边界条件,采用迭代方式对一维 Poisson-Schrodinger 方程进行自洽求解,以 AlGaAs/GaAs 量子阱器件作为研究对象进行了相关计算,并展示了量子系统中的波函数和电子密度。

(4) 基于开源 FEniCS 库分别对二维、三维的 Poisson 方程和 Schrodinger 方程进行有限元求解,将求解 Poisson 方程的计算结果运用到光电导天线模型,并展示了光电导天线的电势分布。将 Schrodinger 方程的计算结果运用到新型 AlGaAs/GaAs 量子阱器件上,与传统的 AlGaAs/GaAs 量子器件不同,该器件只由两层半导体材料组成,器件的结构是在 AlGaAs 材料中间嵌入 GaAs 材料。最后绘制出了 AlGaAs/GaAs 量子阱器件中的电子势能和波函数。

通过 Python 代码开发,本论文研究出了多维 Poisson-Schrodinger 方程有限元求解器。相对于其他方法研究出的求解器,本文的有限元求解器求解偏微分方程会更

加灵活和简便，它能够适用于不同情况的量子器件。对于不同维数的量子器件，只要设置好维数，求解器便会自动求解 Poisson-Schrodinger 方程，分析出器件的物理特性。对于不同结构的量子器件，只需要调整部分代码，便能适用于不同新型的量子器件，这次研究对于分析不同类型的量子器件提供了重要的研究基础。

关键字：量子器件；Poisson 方程；Schrodinger 方程；FEniCS 库

Abstract

In recent years, with the continuous development of semiconductor technology, researchers have proposed and implemented a large number of prototypes of new semiconductor devices. The working principle of these semiconductor devices is related to the quantum characteristics inside the device. At present, the development of epitaxial growth technology makes the advantages of quantum devices more prominent, quantum devices have been widely used in infrared detectors, laser development, wireless communications systems and other production and research areas. Therefore, it is very important to choose an effective method to analyze the physical properties of quantum devices. In the fields of physics and other scientific research, Poisson equation and Schrodinger equation are very important partial differential equations in the study of modern quantum physics. By solving the Schrodinger equation in the microscopic system, the wave function and energy can be obtained, and the distribution of particles in the quantum system can be analyzed. By solving the Poisson equation, the potential distribution of the device can be derived. In the quantum device theory calculation, the exact solution of the Poisson-Schrodinger equation needs to be used to analyze the physical properties of the quantum device. Therefore, finding a more effective method to solve these two equations becomes an important issue in this study.

From a multidimensional perspective, this paper proposes the use of the finite element method to study Poisson-Schrodinger equations, and gives concrete ideas and steps for the finite element method to solve equations. The content of this article is as follows:

(1)The FEniCS library based on the finite element method can only solve the variational form of partial differential equations. This paper first needs to change the Poisson-Schrodinger partial differential equation into a variational equation.

(2)Using open source FEniCS library, write Python program to define the variational form of Poisson equation and Schrodinger equation.

(3)By setting up the boundary conditions, the one-dimensional Poisson-Schrodinger

equation is self-consistently solved in an iterative manner. The AlGaAs/GaAs quantum well device is used as the research object to perform related calculations. The wave functions and electrons in the quantum system are demonstrated. density.

(4)Based on the open source FEniCS library, two-dimensional and three-dimensional Poisson equations and Schrodinger equations are solved by finite element method. The computational results of the Poisson equation are applied to the photoconductive antenna model, and the potential distribution of the photoconductive antenna is shown. The results of the Schrodinger equation are applied to a novel AlGaAs/GaAs quantum well device. Unlike the traditional AlGaAs/GaAs quantum device, the device consists of only two layers of semiconductor material. The structure of the device is to embed GaAs material in the middle of the AlGaAs material. Finally, the potential energy and wave function of the AlGaAs/GaAs quantum well devices are plotted.

Through Python code development, this paper has studied the multidimensional Poisson-Schrodinger equation finite element solver. Compared to the solvers developed by other methods, the finite element solver in this paper is more flexible and easier to solve for partial differential equations. It can be applied to quantum devices in different situations. For a different dimension of the quantum device, as long as the dimension is set, the solver will automatically solve the Poisson-Schrodinger equation and analyze the physical characteristics of the device. For a quantum device with different structures, only a part of the code needs to be adjusted, and it can be applied to different types of new quantum devices. This study provides an important research basis for analyzing different types of quantum devices.

Keywords: Quantum device; Poisson equation; Schrodinger equation; FEniCS library

目 录

摘 要.....	I
Abstract.....	III
目 录.....	V
Contents.....	VIII
第一章 绪论.....	1
1.1 课题研究背景与意义.....	1
1.2 国内外研究现状.....	2
1.3 本文主要研究内容与创新点.....	4
1.4 论文的结构安排.....	5
第二章 开发环境与数学计算库 FEniCS.....	7
2.1 开发环境搭建.....	7
2.2 数学计算库介绍.....	8
2.3 FEniCS 库的结构框架.....	9
2.4 FEniCS 库的主要功能模块.....	11
2.4.1 mesh 模块.....	11
2.4.2 function 模块.....	14
2.4.3 common 模块.....	15
2.4.4 fem 模块.....	15
2.4.5 mshr 模块.....	15
2.5 FEniCS 库的开发步骤.....	18
2.6 本章小结.....	19
第三章 Poisson 方程和 Schrodinger 方程有限元通用求解.....	20
3.1 微分方程的有限元求解方法.....	20
3.2 Poisson 方程有限元通用求解.....	22
3.3 Schrodinger 方程有限元通用求解.....	23
3.4 本章小结.....	24
第四章 基于 FEniCS 库的一维 Poisson-Schrodinger 方程的自洽求解.....	25

4.1 相关公式.....	25
4.2 方势阱中的粒子.....	26
4.2.1 无限深方势阱.....	26
4.2.2 有限深方势阱.....	26
4.3 Fermi-Dirac 分布函数.....	28
4.4 量子器件模型.....	28
4.5 算法设计与实现.....	29
4.6 程序设计与实现.....	30
4.6.1 meshcreate 模块.....	31
4.6.2 poiss_schrd_solver 模块.....	32
4.6.3 poisson_solver 模块.....	33
4.6.4 schrodinger_solver 模块.....	34
4.6.5 carrierdensity 模块.....	34
4.7 计算结果可视化.....	35
4.8 本章小结.....	37
第五章 基于 FEniCS 库的二、三维 Poisson 方程和 Schrodinger 方程有限元求解...	39
5.1 二、三维 Poisson 方程有限元求解.....	39
5.1.1 光电导天线模型.....	40
5.1.2 光电导天线模型的有限元网格化.....	41
5.1.3 计算结果及电势分布.....	42
5.2 二、三维 Schrodinger 方程有限元求解.....	43
5.2.1 器件模型.....	44
5.2.2 器件模型的有限元网格化.....	45
5.2.3 计算结果及波函数.....	47
5.3 本章小结.....	51
总结与展望.....	52
总结.....	52
展望.....	52
参考文献.....	54
攻读硕士学位期间发表的论文.....	59

学位论文独创性声明.....	60
学位论文版权使用授权声明.....	60
致 谢.....	61

Contents

Abstract	III
Contents	VIII
Chapter 1 Introduction	1
1.1 Research background and significance.....	1
1.2 Research status at home and abroad.....	2
1.3 Main content of research and innovation.....	4
1.4 Structure of this thesis.....	5
Chapter 2 Development Environment and Mathematical Computation Library FEniCS	7
2.1 Development environment to build.....	7
2.2 Mathematical calculation library introduction.....	8
2.3 The structural framework of the FEniCS library.....	9
2.4 The main function module of FEniCS library.....	11
2.4.1 Mesh module.....	11
2.4.2 Function module.....	14
2.4.3 Common module.....	15
2.4.4 Fem module.....	15
2.4.5 Mshr module.....	15
2.5 FEniCS library development steps.....	18
2.6 Summary of this chapter.....	19
Chapter 3 General finite element solution of Poisson equation and Schrodinger equation	20
3.1 Finite element method for solving differential equations.....	20
3.2 General finite element solution of Poisson equation.....	22
3.3 General finite element solution of Schrodinger equation.....	23
3.4 Summary of this chapter.....	24
Chapter 4 Self-consistent solution of One-dimensional Poisson-Schrodinger	

equation based on FEniCS Library	25
4.1 Correlation formula.....	25
4.2 Particles in a square well.....	26
4.2.1 Infinite square potential well.....	26
4.2.2 Finite deep square potential well.....	26
4.3 Fermi-Dirac distribution function.....	28
4.4 Quantum device model.....	28
4.5 Algorithm design and implementation.....	29
4.6 Programming and implementation.....	30
4.6.1 Meshcreate module.....	31
4.6.2 Poiss_schrd_solver module.....	32
4.6.3 Poisson_solver module.....	33
4.6.4 Schrodinger_solver module.....	34
4.6.5 Carrierdensity module.....	34
4.7 Visualization of calculation results.....	35
4.8 Summary of this chapter.....	37
Chapter 5 Finite element solution of Poisson equation and Schrodinger equation based on FEniCS Library	39
5.1 Finite element solution of two and three dimensional Poisson equations.....	39
5.1.1 Photoconductive antenna model.....	40
5.1.2 Finite element meshing of photoconductive antenna model.....	41
5.1.3 Calculation results and potential distribution.....	42
5.2 Finite element solution of two and three dimensional Schrodinger equations...	43
5.2.1 Device model.....	44
5.2.2 Finite element meshing of device models.....	45
5.2.3 Calculation results and wave functions.....	47
5.3 Summary of this chapter.....	51
Summary and prospect	52
Summary of the work.....	52
Prospect of topics.....	52

References.....	54
Research achievements during the master's degree.....	59
Paper originality declaration.....	60
Paper Copyright use authorization declaration.....	60
Acknowledgement.....	61

第一章 绪论

1.1 课题研究背景与意义

随着半导体量子结构生长技术的不断成熟，半导体量子器件的特征尺寸逐渐开始细化，由微米量级向纳米量级迈进。当量子器件特征尺寸达到微米量级时，在波粒二重性中电子主要表现出粒子性，大多数半导体量子器件只使用电子的粒子性^[1]。随着器件的特征尺寸开始细化并进入到纳米级，在波粒二重性中电子主要表现为波动性，量子器件主要表现出的电子特性主要为量子效应，量子效应可以分为隧道效应、量子尺寸效应和干涉效应三大类型^[2]，某点产生的效应对于器件的量子特性具有重要的影响。通过控制半导体器件的特征尺寸，结构和形状就能够调节出它的能量等级和能带间隙等电子状态。利用这些电子效应，相关工作人员可以制作出单电子器件、量子点器件和谐振隧穿器件三大种类量子器件，这些电子器件具有低功耗、耐高温、超大规模集成度等特性。研究电子器件的量子效应对促进器件的应用和发展具有巨大的作用，在这个背景下，为了能够深入研究量子器件的工作原理和量子效应，本文提出了求解 Poisson-Schrodinger 方程，分析器件的电子分布情况。

近年来，集成电路产业引起了投资者对半导体行业的投资兴趣，第一、二、三代半导体技术开始逐步研究深入。以砷化镓（GaAs）、氧化锌（ZnO）、砷化铝镓（AlGaAs）、氮化铝（AlN）、氮化镓（GaN）为代表的半导体材料已经被发现并得到了极大的应用，这些半导体材料具有耐高温、抗辐射性强、高传导率和良好的热稳定性等特点^[3-5]。利用量子效应，研究人员可以将半导体制作出抗辐射，高温的大功率器件^[6]。本文提出求解 Poisson-Schrodinger 方程的自洽解，深入了解新型器件的工作原理和量子效应。在静电学研究领域，Poisson 方程是经常用到的偏微分方程，通过给定一定区域内的电荷密度来得出电场的大小，从而分析计算区域内载流子的分布情况。Schrodinger 方程是量子力学的基本方程，微观粒子的运动状态可以通过它来描述，求解 Schrodinger 方程可以得出波函数以及相对应的能量。求解出 Poisson-Schrodinger 的自洽解，可以将求算的结果运用到新型的电子器件上，分析器件的量子变化。

目前 Micro Materials 公司已开发出对量子器件进行模拟计算的代码，但是他们

的源代码并不对外开放，而且价格昂贵。为了能够对量子器件进行深入研究，我们通过编写程序开发出一个多维 Poisson 和 Schrodinger 方程求解器，针对一维、二维、三维不同维数的器件进行模拟仿真计算。类似于量子阱，量子点或者量子线的量子系统较为复杂，Poisson 和 Schrodinger 方程能够准确分析出量子系统中粒子的分布情况^[7-9]。所以，本文提出了更加有效的数值计算方法来求解 Poisson 和 Schrodinger 方程。为了能够更加方便并精确求解出偏微分方程，本文使用了基于有限元方法的 FEniCS 库，在光电导天线和量子器件 AlGaAs/GaAs 上，使用 Python 编程分别对二维、三维的 Poisson 和 Schrodinger 方程进行有限元求解。

1.2 国内外研究现状

近年来，第三代半导体凭借其突出的性能得到了快速的发展，半导体量子器件的性能得到了很大的提高。量子器件的设计，性能分析，器件结构的优化都离不开计算分析模拟^[10]。国外方面已经有相关的研究人员对量子器件的做了大量研究。1970 年美国 IBM 实验室的江崎和朱兆祥提出了新型的半导体器件超晶格，超晶格是具有周期性的层状复合结构材料，它由两种晶格匹配很好的半导体材料交互生长而成^[11]。目前低维半导体结构的概念也是由超晶格扩展而来，其中有量子阱、量子线、量子点等。由于半导体量子器件的不断设计并实现，带动了半导体量子阱材料的发展，量子阱器件在光电材料方面得到广泛的应用^[12-14]。量子阱红外探测器是 20 世纪 90 年代开发的一种高科技器件，可以利用 MBE 和 MOCVD 等先进技术生产均匀的大面积量子阱材料^[15]。在军事上它能精确制导，自动跟踪，准确探测地雷的位置。半导体量子器件都有一个共同点，器件内部的载流子在一个或者多个方向上的只能在很小空间内运动，从而使得它们的运动必须由量子力学来描述。

在物理科研领域中，研究人员需要使用到 Poisson 方程来分析量子器件内部电子的电势分布，使用 Schrodinger 方程的波函数来描述微观粒子的运动状态。1926 年奥地利科学家薛定谔提出了 Schrodinger 方程，成功解决了波函数如何随时间的演变。粒子在空间中出现的几率和在空间某点波函数的强度成正比例关系^[16]。目前已有相关的研究人员通过求解 Poisson-Schrodinger 方程来描述量子器件中载流子的电势分布和波函数^[17-19]。

目前国内在量子器件中 Poisson-Schrodinger 方程的求解方法很多，有限差分法，有限体积法，打靶法等。（1）有限差分法（FDM）：有限差分法是研究工作人员

用来求解偏微分方程常使用的微分方法，广泛应用于计算机的数值模拟^[20]。该方法的基本原理是将求解域分解为微分网格，将定义的求解区域离散为网格的离散节点，用有限个网格节点替换连续的定解区域，离散化的节点上函数的差商近似于节点的偏函数，从而达到将求解偏微分方程的问题转化为求解一组差分方程，通过求解差分方程，可以得出各个离散点的待求函数值，最后利用插值方法可以从离散解得到求解区域的近似解。对于具有规则的几何形状和均匀的材料，有限差分法的算法过程比较直观，简单，易于程序设计。但网格划分必须是规则的，对偏微分方程进行离散化不够灵活^[21]。（2）有限体积法（FVM）：它的基本原理是求解域划分为一个个控制体，以便每个网格点都有一个控制体，偏微分方程对每个控制体体积进行积分，就会得出一组离散方程，网格点的函数值即为该方法的未知值^[22]。从积分区域选取上来看，有限体积法采取的是子区域的近似离散方法。在有限体积法中可以采用不同的插值函数对应偏微分方程的不同的项。该方法的基本原理易于理解，操作过程简单。但是有限体积法计算精度低，对边值处理不够灵活。（3）打靶法：打靶法是求解偏微分方程最简单的一种方法，该方法的核心思想是把偏微分方程的边界问题转化为初值问题来进行求解，适当调整并设置好偏微分方程的边界条件，求解出一系列初值问题，使得计算结果接近于给定的边界条件^[23]。打靶法在求解一维 Schrodinger 方程有一定的优势，并且易于编程。但是打靶法在数值离散化时，计算的结果偶尔会出现发散现象。目前国内已有科研工作者使用不同的方法求解出了 Poisson-Schrodinger 方程的自洽解。中科院太赫兹固态技术重点实验室的曹俊诚主任使用了打靶法求解出了一维 Poisson 和 Schrodinger 方程的自洽解^[24]，并将计算结果运用到 QCL 激光器的计算。2003 年清华大学微电子所研究人员冯龙完成了一维 Poisson-Schrodinger 方程的自洽求解，并将计算结果运用到量子器件 AlGaIn/GaN 上，求出了器件的异质结导带结构和二维电子气分布^[25]，计算结果表明了量子器件 AlGaIn/GaN 中隔离层的厚度对二维电子气(Two-dimensional electron gas, 2DEG)浓度产生的影响。

针对目前国内外研究现状的考察和分析，量子器件研究领域的新成果对于半导体的发展有着重要的作用。量子器件的工作原理与电子的量子特性有关，器件内的电子或者空穴的运动状态必须由量子力学来描述^[26]。该领域中的研究人员需要用到 Poisson-Schrodinger 方程的精确解来分析电子器件中粒子的运动状态^[27]。使用有限元方法求解 Poisson-Schrodinger 方程是十分有效的。有限元方法的基本原理是将复杂

的连续求解域离散化为有限个单元，在每个单元内使用合适的近似函数来分片表示求解域中的目标函数。在每个单元的节点上，通常使用目标函数及其导数的数值插值函数来表示近似函数^[28]。有限元方法求解偏微分方程的计算效率高，不受几何形状复杂程度的限制，能够适用于多维空间内复制的几何模型。目前大多数研究机构求解 Poisson-Schrodinger 方程的自洽解的方法很多，网格剖分的方法也各异，然而求解 Poisson-Schrodinger 方程的编程代码并不开放，而且购买的价格昂贵。

1.3 本文主要研究内容与创新点

为了能够开发出比较完善的量子器件模拟计算代码求解器，本文从多维的角度出发，提出了使用基于有限元方法的 FEniCS 库来求解 Poisson 方程和 Schrodinger 方程，自主开发出了一套模拟计算代码，通过实现迭代的方式，完成对一维 Poisson-Schrodinger 方程的自洽求解，对二、三维 Poisson 方程和 Schrodinger 方程进行有限元求解，给出了有限元法求解 Poisson 方程和 Schrodinger 方程的思路和具体步骤，并将计算结果运用到具体的量子器件 AlGaAs/GaAs 和光电导天线上，验证了使用有限元法求解 Poisson 和 Schrodinger 方程的灵活性和可行性。具体的研究内容如下：

（1）基于有限元方法的 FEniCS 库只能求解偏微分方程的变分形式，本文需要先将 Poisson-Schrodinger 偏微分方程变化成为变分方程。

（2）使用 FEniCS 库对偏微分方程（PDE）进行有限元法求解，先定义好计算域，边界条件和原函数，再将 PDE 重新变化为有限元变分问题。编写一个 Python 程序定义上述变量和变分方程，调用 FEniCS 库函数来定义偏微分方程的变分形式。

（3）利用基于有限元方法的 FEniCS 库定义好 Poisson 方程和 Schrodinger 方程的变分形式，求解出一维 Poisson-Schrodinger 方程的自洽解，对二、三维 Poisson 和 Schrodinger 方程进行有限元求解。

（4）实例运用：将上述求解出一维 Poisson-Schrodinger 方程的自洽解运用到 AlGaAs/GaAs 量子阱器件上，计算得出了电子密度和量子系统中的波函数。将二、三维 Poisson 方程的计算结果运用到光电导天线上，并展示了光电导天线上的电势分布。将二、三维 Schrodinger 方程的计算结果运用到量子器件 AlGaAs/GaAs，绘制出了电子势能和波函数。

本论文的创新点：本文从一维、二维、三维的角度出发，针对不同维数的量子

器件原型，大胆提出了使用基于有限元方法的 FEniCS 库来求解多维 Poisson 方程和 Schrodinger 方程精确解问题。通过 Python 编写程序，自主研发出了一个多维 Poisson-Schrodinger 方程求解器，针对不同维数或者不同结构的量子阱器件模型，只需要调整部分代码，便能够自动求解 Poisson-Schrodinger 方程，绘制出量子器件的物理特性，从而可以根据计算结果来分析器件的量子效应。本文提出了将二、三维 Poisson 方程的数值计算结果运用于光电导天线模型，将二、三维 Schrodinger 方程的计算结果运用到新型 AlGaAs/GaAs 量子阱器件上，与传统的 AlGaAs/GaAs 量子器件不同，该器件只由两层半导体材料组成，器件的结构是在 AlGaAs 材料中间嵌入 GaAs 材料，通过分析计算结果可以得出新型 AlGaAs/GaAs 量子器件的物理特性。

1.4 论文的结构安排

本文结构安排总共分为五章，具体安排如下：

第一章，绪论。本章详细介绍了本文的研究背景和现实意义，总结了国内外量子器件的研究现状，分析了 Poisson 和 Schrodinger 方程在量子力学中的重要性。并提出了本文主要的研究内容。

第二章，开发环境与数学计算库 FEniCS。本章先介绍了开发环境的搭建、FEniCS 的安装方法和所需要的集成环境（IDE）。对目前求解偏微分方程的数学计算库作出了简要介绍，接着对基于有限元的 FEniCS 库所包含了一些子项目和组件做出了详细阐述。详细分析了 FEniCS 库内部的功能模块，结合具体的例子，给出了编程实现所需要的相关部分代码。最后详细介绍了 FEniCS 库求解偏微分方程的开发步骤。

第三章，Poisson 方程和 Schrodinger 方程有限元通用求解。本章提出了使用有限元方法来求解偏微分方程，详细阐述了有限元方法的使用。接着列出了 Poisson 和 Schrodinger 方程的相关公式，并详细介绍了 Poisson 方程和 Schrodinger 方程有限元通用求解过程。

第四章，基于 FEniCS 库的一维 Poisson-Schrodinger 方程的自洽求解。本章重点讲述了如何运用有限元 FEniCS 库对一维 Poisson-Schrodinger 方程的自洽求解，针对现有量子器件种类的调研，选取 AlGaAs/GaAs 量子器件作为本次研究的实际器件。最后，将一维 Poisson-Schrodinger 方程的自洽解运用到量子器件 AlGaAs/GaAs

和 AlGaIn/GaN 上，展示了量子器件 AlGaAs/GaAs 的电子密度和量子系统中的波函数，给出了 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结和 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ 双异质结的能量导带图。

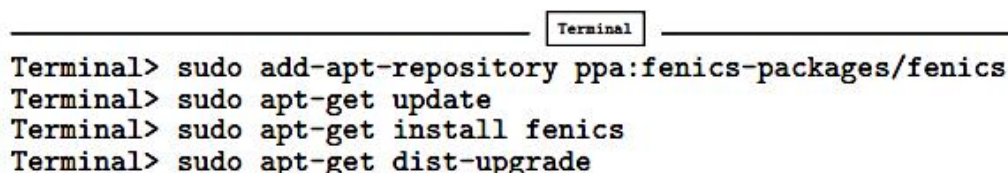
第五章，基于 FEniCS 库的二、三维 Poisson 方程和 Schrodinger 方程有限元求解。本章详细介绍使用有限元 FEniCS 库分别对二、三维 Poisson 和 Schrodinger 方程进行有限元求解。将二、三维 Poisson 方程的计算结果运用到光电导天线，并展示了光电导天线上电子的电势分布。将二、三维 Schrodinger 方程的计算结果运用到量子器件 AlGaAs/GaAs，并展示了量子系统中的波函数。

最后总结了本论文的主要工作内容，并展望了使用有限元方法求解 Poisson-Schrodinger 方程所需要改进的地方。

第二章 开发环境与数学计算库 FEniCS

2.1 开发环境搭建

主要介绍开源库 FEniCS 在 Ubuntu16.04 的安装方法以及用到的集成开发环境，FEniCS 库适用于各种操作系统（Linux，Mac，Windows），不需要将 FEniCS 库进行代码移植。FEniCS 库可以通过 Docker 容器和 Ubuntu 软件包两种途径来进行安装，虽然 Docker 容器可以在大多数操作系统上运行，但是目前 Docker 容器内置的 FEniCS 绘图功能还无法使用，所以最好从 Ubuntu PPA 中安装 FEniCS 库。对于 Ubuntu 的用户，FEniCS 可以通过标准的 Ubuntu 软件包管理器 apt-get 来安装。需要在终端窗口输入的命令行如图 2-1 所示：

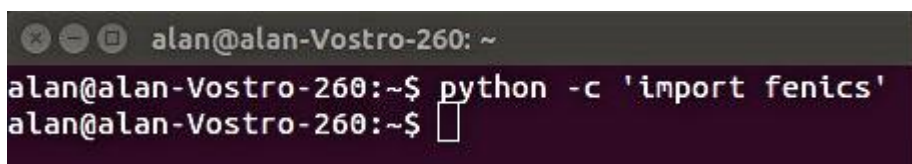


```
Terminal> sudo add-apt-repository ppa:fenics-packages/fenics
Terminal> sudo apt-get update
Terminal> sudo apt-get install fenics
Terminal> sudo apt-get dist-upgrade
```

图 2-1 安装 FEniCS 的命令行

Fig.2-1 Installs the command line of FEniCS

这会将 FEniCS 的软件包文档（PPA）添加到您的 Ubuntu 计算机的软件源列表中，然后安装 FEniCS 库，它也会自动安装 FEniCS 依赖包。为了能够测试开源库 FEniCS 已安装成功，通过 Ctrl+Alt+T 启用 FEniCS 的终端中输入的命令如图 2-2 所示：



```
alan@alan-Vostro-260: ~
alan@alan-Vostro-260:~$ python -c 'import fenics'
alan@alan-Vostro-260:~$
```

图 2-2 安装测试

Fig.2-2 Installation test

如果运行的结果没有任何错误信息则说明 FEniCS 库已安装成功。

接着便是安装集成开发环境 eclipse 并将 pydev 嵌入到 eclipse 中，具体操作如下：在 Ubuntu 软件中心中搜索 eclipse，点击安装。再将 PyDev 中的文件夹 features

和 plugins 中的文件全部复制到安装文件 eclipse 中相对应的文件夹 features 和 plugins。也可以安装 Python 专用的集成环境 Pycharm,它里面包含了 Python 扩展库,不用添加 PyDev 也可以使用。

2.2 数学计算库介绍

(1) 偏微分方程求解框架 Overture

Overture 是一个 C++面向对象的代码框架,用于使用网格求解复杂几何中的偏微分方程。它提供了一个可移植并且灵活的软件开发环境,能够为用户解决各种类型的偏微分方程问题。Overture 内部库函数具有有限差分法和有限体积法等数值计算方法,对于复杂的几何体,Overture 的网格生成系统能够生成结构网格并且根据用户需求完成网格细化和复合重叠网格^[29]。Overture 还能够快速求解流体力学等运动几何体问题。但是有限差分法和有限体积法数值计算方法对于复杂的边界条件和几何体处理得还不够灵活。

(2) 偏微分方程求解器 Dune

Dune 是基于网格方法求解偏微分方程的模块化工具箱,它能够支持有限元方法,有限体积法和有限差分法的简单实现。Dune 遵循 GNU/LGPL 开源协议,它具有很高的面向对象的特点,计算和编程效率也非常高。Dune 采用的原则是数据结构和算法的分离,这使得 Dune 能够使用更少的代码来实现更多的功能,并且还确保了框架的可维护性和可扩展性。但是 Dune 对于计算机的性能要求很高,需要用到较高版本的操作系统。

(3) 有限元库 FEniCS

FEniCS 是一个由芝加哥大学和查尔姆斯理工大学主导开发的开源 Python/C++ 的有限元代码,在 Linux/Mac/Windows 平台下均可运行^[30]。FEniCS 库作为一个免费的开源项目,该项目由 FEniCS 社区开发,由 FEniCS 指导委员会管理,由 FEniCS 咨询委员会负责监督。它是一个有效求解偏微分方程的科学计算库,能够最大程度简化算术方法,旨在创造数学方法和自动计算数学模型^[31]。这意味着它能够使用有限元方法,简单直观有效地求解偏微分方程(PDEs)。

FEniCS 项目是 2003 年启动的,它提出了一种调用 FEniCS 库的功能模块来自动求解微分方程的方法。最初,FEniCS 项目仅仅包含两个库文件:DOLFIN 和 FIAT。到目前为止,该项目经过研发人员的不断完善,底层的代码拥有众多的接口供给程

程序员使用。为了更加方便使用者研究求解偏微分方程，FEniCS 项目在原来库文件的基础上又添加了 FFC, UFC, Instant, UFL 等核心的组件，这极大丰富了开源库 FEniCS 的功能模块。对于利用 FEniCS 库来进行开发的科研工作者而言，这无疑是一个巨大的福音。FEniCS 项目的底层代码使用了 Python/C++ 进行编写，这两种编程语言具有上手容易，易于编程等优点。FEniCS 项目开发的软件可供所有人使用和修改，由于 FEniCS 库对外开放的性质，越来越多的开发人员愿意投入到 FEniCS 项目的研发和完善中。因此，在未来的发展道路上，基于有限元的 FEniCS 库一定会得到不断的升级和更好的完善。

FEniCS 库可以用 C++ 和 Python 进行编程，因为 Python 语言简洁，开发快，容易上手学习，具有 SciPy, NumPy, Matplotlib 等丰富的第三方计算库。Python 这些优点很大程度上能够加快开发的速度，所以本文使用 Python 编程完成偏微分方程求解器的相关功能。通过使用 FEniCS 库，用户能够将科学模型快速转化为高效的有限元素代码。通过学习 FEniCS 的 Python 接口，程序员很容易上手，FEniCS 还为更有经验的程序员提供更强大的功能。从笔记本电脑到高性能集群的多种平台上，FEniCS 都可以运行。关于 FEniCS 库的使用，程序员只需要学习有限元和 Python 语言的基础知识便能调用 FEniCS 库内的相关函数实现开发所需要的功能。FEniCS 库内也包含了许多简单的例子方便初学者学习，程序员通常可以将 Poisson 方程和时间相关扩散方程作为模型求解问题，通过调整输入数据，在均匀的结构化网格上使用有限元方法，就可以得到一个简单的解^[32]。所以本文选取开源 FEniCS 库来求解偏微分方程。

2.3 FEniCS 库的结构框架

开源库 FEniCS 的一些重要组件包括了 DOLFIN, FFC, FIAT, UFL, Instant 等。这些组件为计算网格、常微分方程和偏微分方程的有限元变分公式以及线性代数提供了科学的计算工具。DOLFIN 提供了一个通用接口，用于定义变分形式的偏微分方程（PDE），用 FFC 来编译变分形式。FIAT 和 UFC 更多地是被其他程序调用。如图 2-3 所示为 FEniCS 库的结构框架，它概述了 FEniCS 和外部软件组件之间的关系，表明了 DOLFIN 是 FEniCS 的核心组件，主要负责处理 FEniCS 各种组件与外部软件之间的通信。其中实线表示相关性，虚线表示数据流。

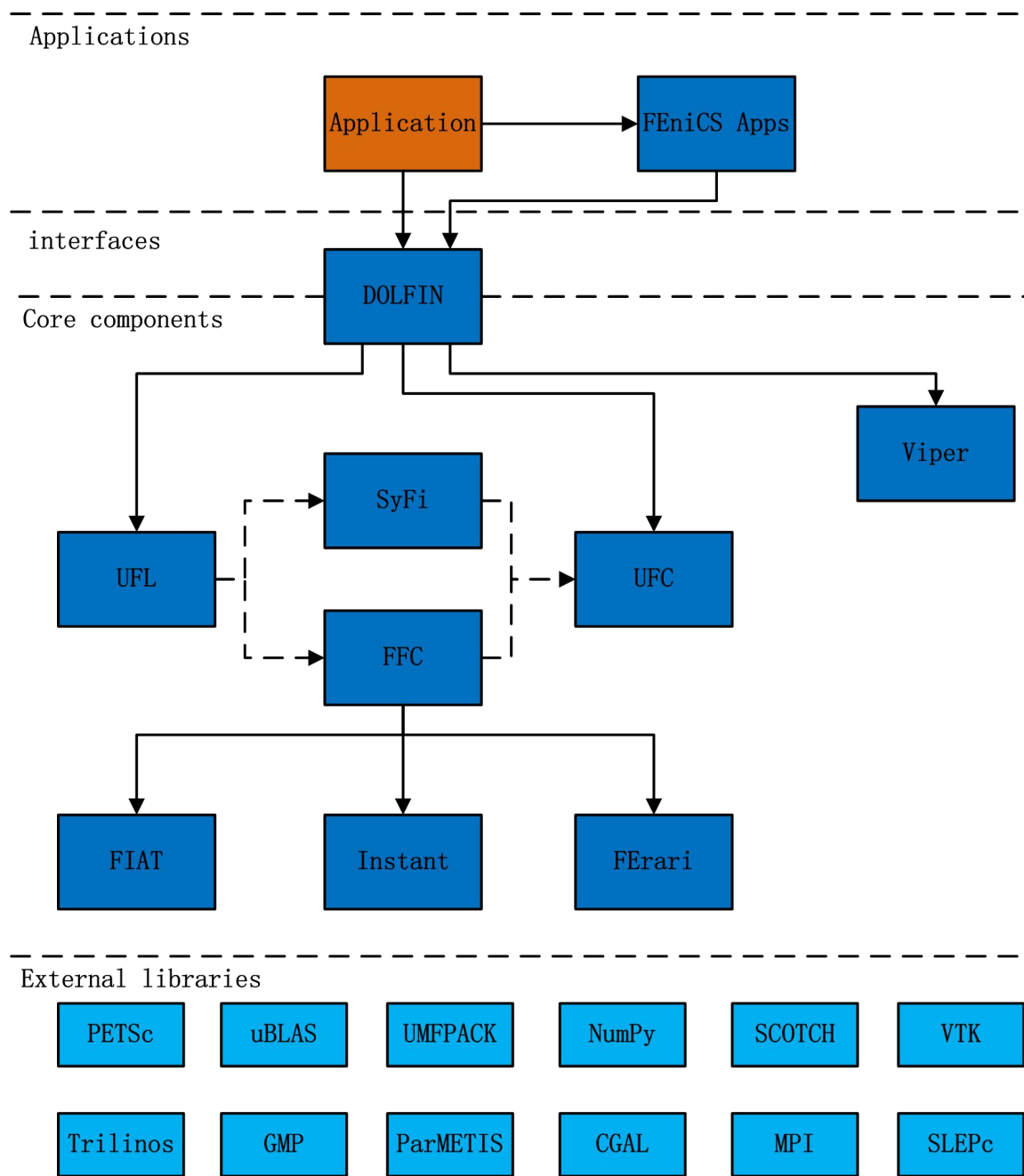


图 2-3 FEniCS 库的结构框架

Fig.2-3 The structural framework of the FEniCS library

下面对图 2-3 中的模块作简要分析：DOLFIN 能够实现数据结构，例如网格生成、设置函数和函数空间，能够计算密集型算法，如有限元集合、网格细化以及线性代数解算器。对于大部分基础功能，DOLFIN 要依赖于第三方库，如 Trilinos 和 PETSc。FFC（FEniCS Form Compiler）是 FEniCS 代码生成器，负责从高级数学抽象问题中生成高效的代码。比如，FFC 可以根据偏微分方程的变分形式，生成高效的代码。FFC 可以通过 `ffc` 命令行或 Python 模块（`import ffc`）来使用。FIAT（FInite

element Automatic Tabulator) 是 FEniCS 的有限元编译器, 通过运行编译代码生成有限元基础解析函数。UFL (Unified Form Language) 是用于声明微分方程变分形式的特定语言。SyFi (Symbolic Finite Elements) 和 SFC (Symbolic Form Compilation) 分别是有限元库和形式编译器, SFC 在 FEniCS 库中被用作编译器, 与 FFC 类似, 它可以将 UFL 代码转换为 UFC 代码。

2.4 FEniCS 库的主要功能模块

FEniCS 库包含了众多实现不同功能的模块, 在这里, 本文只重点介绍了求解 Poisson-Schrodinger 方程所需要用到的模块。它们分别为 mesh 模块、function 模块、common 模块、fem 模块、mshr 模块。模块内部包含了丰富的求解偏微分方程的类和函数, 在求解 Poisson-Schrodinger 方程中, 可以先通过 import 形式导入相应的模块, 再调用类或者函数来完成求解的功能。

2.4.1 mesh 模块

基于有限元 FEniCS 库是采用单元离散化方法来实现仿真的, 所以 mesh 模块是 FEniCS 库的核心功能模块。用于网格的均匀剖分, 对于一维、二维、三维不同维数的几何形状物体, 可以调用该模块的函数, 通过设置物体的长, 宽和高以及网格剖分的数量来实现剖分。mesh 模块具有能够实现网格剖分的类和函数, 在不同维数的空间内, 无论物体是简单的还是复杂的, 只要设置好物体的尺寸都可以调用相关的函数进行剖分绘制, 实现均匀剖分。在该模块中, 还可以实现非均匀剖分, 程序员可以根据自己的需求对物体的某一处实现非均匀剖分, 这一点对于量子器件的模拟计算研究是至关重要的。通过对量子器件某处的非均匀剖分, 可以得到更加精确的计算结果。Mesh 类的继承直方图如图 2-4 所示:

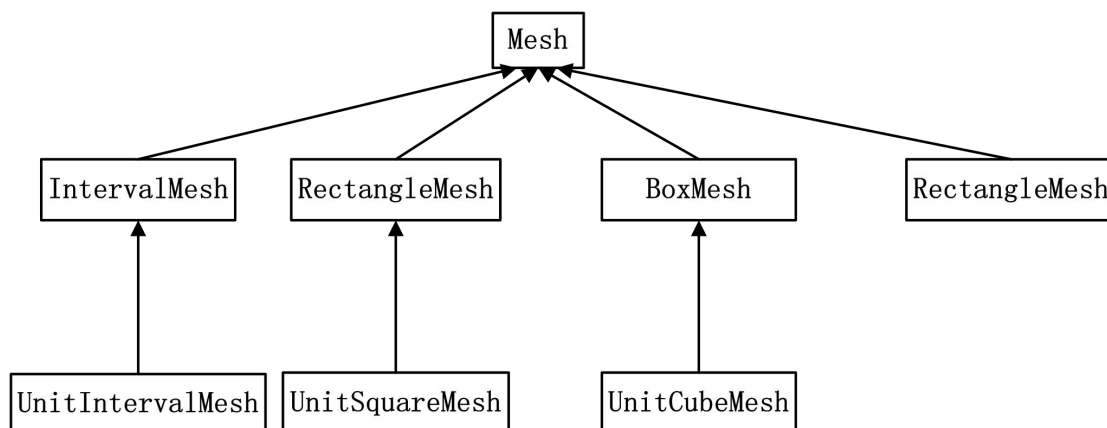


图 2-4 Mesh 类的继承直方图

Fig.2-4 Inheritance histogram for Mesh class

(1) Mesh 类：在 mesh 模块中，Mesh 类是生成各种形状网格的基类，里面包含了很多对网格进行操作的基本函数。比如，num_vertices 函数可以得到网格内顶点的个数，num_edges 函数能够获取网格中的边数，num_faces 函数能够获取网格中的面数。在实际器件计算模拟中，会需要用到网格上节点值来计算。通过调用 Mesh 类内重要的函数，可以轻易获取节点值和该节点的坐标。

(2) IntervalMesh 类：继承于 Mesh 基类，可以使用 Mesh 类中的任何方法，主要应用于一维网格生成，通过添加点的形式来对一条线段进行网格剖分。

(3) RectangleMesh 类：该类可用于二维网格生成，通过定义两个点 p0, p1 和 x, y 轴上的剖分个数，便可生成相对应的网格。如果给定每个方向的单元数为 (nx, ny)，就可以知道二维矩形上三角形网格的总数为 $2 * nx * ny$ ，顶点总数为 $(nx + 1)(ny + 1)$ 。

(4) BoxMesh 类：该类应用于三维网格生成，只要设置好两点 p0, p1 和给定每个方向上的单元的数目为 (nx, ny, nz)，就会生成四面体网格。四面体的总数是 $6 * nx * ny * nz$ ，并且顶点的总数是 $(nx + 1)(ny + 1)(nz + 1)$ 。

(5) UnitIntervalMesh 类：继承于 IntervalMesh 类，用于单位一维网格剖分。在一维单元区间内，只要设置好单元数量 nx，就能通过 plot() 方法绘制出网格数为 nx 的网格。

(6) UnitSquareMesh 类：继承于 RectangleMesh 类，在二维单元正方形里生成三角形网格，主要应用于二维网格剖分。

(7) UnitCubeMesh 类：继承于 BoxMesh 类，在三维单位正方体空间内设置好每个方向上的单元格数量为 (nx, ny, nz)，就会生成四面体总数为 $(6 * nx * ny * nz)$ ，并

且顶点的总数是 $(nx+1)*(ny+1)*(nz+1)$ 的网格。

(8) SubDomain 类: 在 FEniCS 库中, SubDomain 类常用于定义子域, 子域的定义范围可以是边界的一部分, 也可以是内部边界, 也可以是计算域的一部分。在量子器件的模拟计算中, 因为量子器件经常会由不同材料组成, 这时需要将求解域划分为多个子域进行求解, 不同材料会有不同的系数。通过 SubDomain 类的方法, 就可以设置不同材料, 不同子域内的参数, 从而计算出实验仿真结果。下面介绍这个类的使用, 图 2-5 为两个不同子域的划分, 在二维空间两种不同材料中, 定义求解域 Ω_0 中的材料参数为 $K(x,y)=K_0$, 求解域 Ω_1 中的材料参数 $K(x,y)=K_1$, 其中 K_0, K_1 是给定常量。由于需要定义 Ω 的子域, 所以需要借助于 CellFunction(tp, mesh) 函数。它的构造函数包含两个参数: 第一个参数是类型的值: 'int' 表示整数, 'size_t' 表示非负数整数, 实数值为 'double', 逻辑值为 'bool', 第二个参数是网格对象。图 2-6 为不同参数子域的计算结果, 对应右边的色标值, 可以观察出求解域 Ω_0 的参数设置为 0, 求解域 Ω_1 的参数设置为 1。部分关键性代码如下所示:

```
mesh=UnitSquareMesh(8,8)#在单位正方形内生成 128 个三角形网格
#inside 方法用来判断该点是否在子域中, 在子域中则返回真。参数 x 表示该点
#的坐标, 参数 on_boundary 表示该点在边界条件上。
class Omega_0(SubDomain):#定义 SubDomain 类子类 Omega_0
    def inside(self, x, on_boundary):#重写 SubDomain 类的 inside 函数
        return x[1]<= 0.5
class Omega_1(SubDomain):#定义 SubDomain 类子类 Omega_1
    def inside(self, x, on_boundary):#判断单元上的顶点是否属于该子类
        return x[1]>= 0.5
materials = CellFunction('size_t',mesh)
```

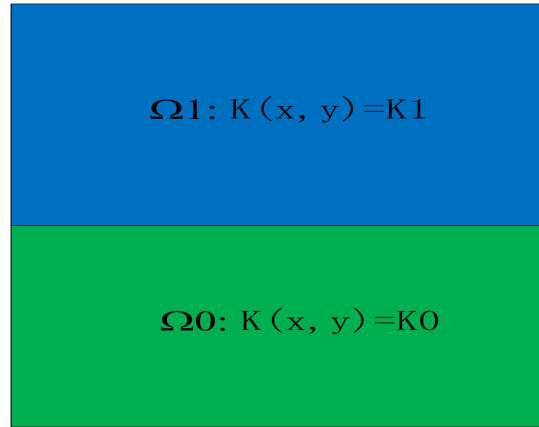


图 2-5 两个不同参数的子域

Fig.2-5 Subdomains with two different parameters

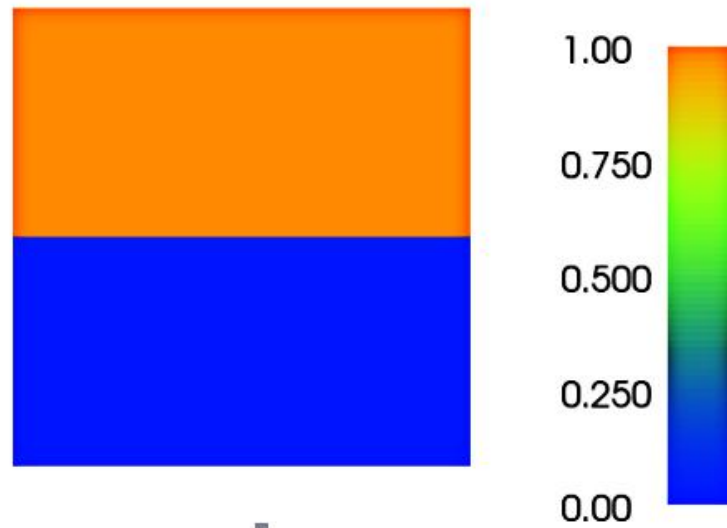


图 2-6 不同参数子域的计算结果

Fig.2-6 Calculation results of subdomains with different parameters

2.4.2 function 模块

该模块包含了创建函数和函数空间，特别是定义在网格上的离散函数空间。

(1) FunctionSpace 类：该类用于创建有限元函数空间，构造函数参数分别为网格（mesh），有限元素（element），和自由度（dofmap）。

(2) Function 类：该类能够在给定的函数空间内创建函数。在本次研究中，创建完该类的函数对象后，经常会调用 interpolate 和 compute_vertex_values 方法。interpolate 方法，能够将常量、变量整合到给定的函数空间内。compute_vertex_values 方法则用来计算网格中任意节点上量子器件计算模拟结果值。

2.4.3 common 模块

该模块的功能主要是用来定义一些常用工具类，比如，变量、时间和绘画等类都可以放入其中。下面将简要介绍一下在本文研究过程中使用该模块的类：

(1) Timer 类：该类用来创建时间对象，该类中 `start()` 表示计算时间开始，`stop()` 表示计算时间结束，输出时间的多少可以使用方法 `list_timings()`。研究人员可以将开始，结束的方法写入程序来计算运行程序所需要的时间。因为在量子器件上使用有限元法求解偏微分方程，计算量是十分庞大的，所以可以使用该类来测试哪一部分程序所花费的时间更大，从而可以达到优化程序的目的。

(2) Expression 类：表示用户定义一个表达式，能够创建出由 C++ 语言编写的数学表达式对象。

(3) plot 方法：绘制使用 FEniCS 库来求解偏微分方程的计算结果，它可以绘制量子器件的网格剖分和求解结果。通过设置方法内的参数，可以实现显示坐标系、保存计算结果、设置图框标题和打印帮助文档等功能。

2.4.4 fem 模块

该模块主要用于设置边界条件、求解线性系统和线性变分问题。在本次研究中，对于求解偏微分方程来说，如何设置边界条件是求解微分方程的关键因素。

(1) DirichletBC 类：该类可以设置偏微分方程 Dirichlet 的边界条件。在求解 Poisson-Schrodinger 方程时需要用到该类来设置 Dirichlet 边界条件。具体使用方式为：`DirichletBC(V,u_D,boundary)`，其中 V 为函数空间， u_D 为该函数空间的边界条件。 u_D 是定义边界值的表达式，`boundary` 是一个函数或者对象，用来定义哪些点在边界上。

(2) solve 方法：对于线性系统 $Ax=b$ 可以通过调用 `solve(A,x,b)` 方法来求解，其中 A 是矩阵， x 和 b 是向量。对于求解线性变分问题，存在 v 满足线性变分问题 $a(u,v)=L(v)$ ，可以调用 `solve(a==L,u,T)` 方法来求解，并通过可选参数 T 来指定边界条件或者求解器参数。

2.4.5 mshr 模块

该模块是 FEniCS 库新加入的网格生成模块，主要用于不规则网格的生成，可

以通过规则网格进行多个相加或者多个相减得到最终的网格剖分。除了简单网格(如 UnitSquareMesh 和 UnitCubeMesh) 之外, FEniCS 的其他网格生成功能已移至 mshr 模块中。在 FEniCS 库新加入该模块的原因有两方面: 一方面, 减少构建 DOLFIN 的 CPU 时间和内存使用量; 另一方面, 是为了能够在新的网格化组件中添加新的功能。目前, CGAL 和 Tetgen 都可用于 mshr 模块的网格生成。使用 mshr 模块生成的网格与 DOLFIN 中的旧网格非常类似, mshr 模块允许从构造实体几何 (CSG) 上生成网格。如图 2-7 所示, 该图是不同几何形状的网格图, 通过调用 mshr 模块中的类完成正方体, 圆柱体和圆形三种几何形状的组合。部分关键性代码实现如下:

```
#实现正方体, 圆柱体和圆形不同几何形状的组合
box = Box(Point(0, 0, 0), Point(1, 1, 1))#创建一个正方体对象
sphere = Sphere(Point(0, 0, 0), 0.3)#创建一个圆形对象
cylinder = Cylinder(Point(0, 0, -1), Point(0, 0, 1), 1.0, 0.5)#创建一个圆柱体对象
geometry = box + cylinder - sphere#将三个不同几何体进行组合
mesh = generate_mesh(geometry, 16)#重新生成网格
```

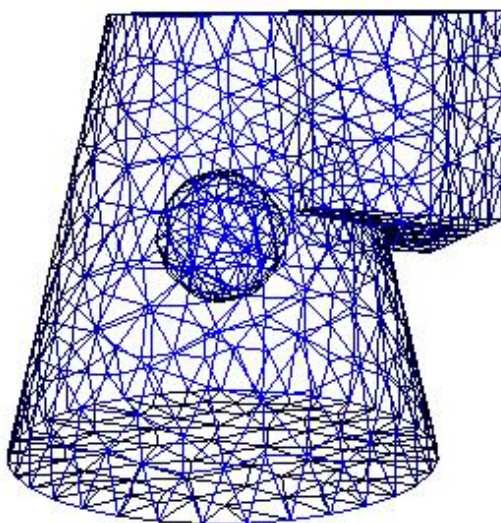


图 2-7 不同几何体的组合

Fig.2-7 Combination of Different Geometry

mshr 模块中有两个重要的类, 它们分别为 Rectangle 类、Box 类。在二维、三维空间上, 对于复杂的几何形状模型, 可以使用这两个类来完成各种几何形状模型的组合, 得出需要的几何模型并将其网格化。

(1) Rectangle 类: 该类继承于 CSGPrimitive2D 类, 主要用于二维长方形的网格剖分, 设置好长方形的对角点后, 可以实现多个长方形的组合。在二维空间实际

的量子器件上，本文先定义好不同器件的长和宽，可以实现不同量子器件的组合。如图 2-8 所示，该图是二维空间内高电子迁移率晶体管（HEMT）模型的网格剖分结果，器件上方分别为源极、栅极和漏极。本文对 HEMT 模型进行了非均匀网格剖分，将非均匀部位定义为不同半导体界面处。部分关键性代码实现如下：

```
hemt=Rectangle(dcm.Point(0,0),dcm.Point(100,100)) #将 hemt 器件网格化
source=Rectangle(dcm.Point(0,100),dcm.Point(30,110))#将源极网格化
gate=Rectangle(dcm.Point(40,100),dcm.Point(55,110))#将栅极网格化
drain=Rectangle(dcm.Point(70,100),dcm.Point(100,110))#将漏极网格化
domain=hemt+source+gate+drain#组合上面生成的四个长方形网格
mesh1=generate_mesh(domain,64, 'cgal')#重新生成网格
```

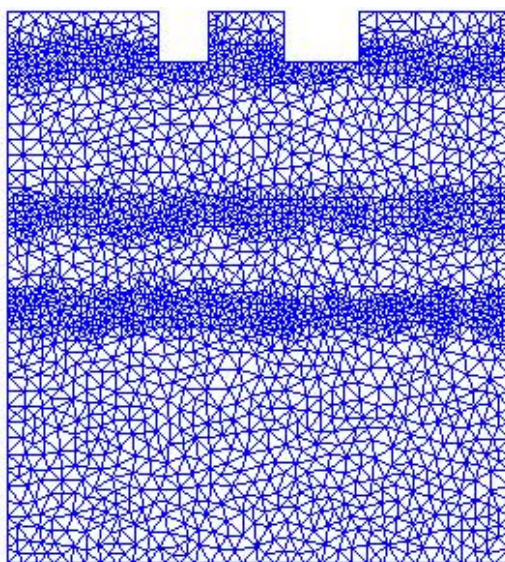


图 2-8 二维 HEMT 模型网格剖分

Fig.2-8 Mesh generation of 2D HEMT model

Box 类：该类继承于 CSGPrimitive3D 类，用于长方体的网格剖分，该类的剖分方式与 Rectangle 类十分相似。可根据自己的需要先设置好器件的长、宽、高，在三维空间中实现不同的量子器件组合，从而根据网格的节点值，可以得到相对应的计算模拟值。图 2-9 是三维 HEMT 模型网格剖分结果，部分关键性的代码如下：

```
hemt=Box(dcm.Point(0,0,0),dcm.Point(100,100,10))#HEMT 模型网格化
source=Box(dcm.Point(0,100,0),dcm.Point(30,110,10))#源极网格化
gate=Box(dcm.Point(40,100,0),dcm.Point(55,110,10))#将栅极网格化
drain=Box(dcm.Point(70,100,0),dcm.Point(100,110,10))#将漏极网格化
```



```
domain=hemt+source+gate+drain#将上面四个长方体进行组合
mesh1=generate_mesh(domain,30,'cgal')#重新生成网格
```

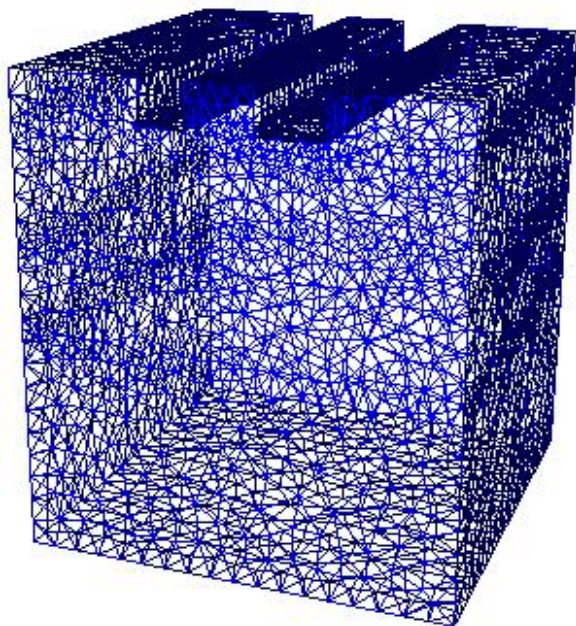


图 2-9 三维 HEMT 模型网格剖分

Fig.2-9 Mesh generation of 3D HEMT model

2.5 FEniCS 库的开发步骤

FEniCS 库是一个专门用来求解偏微分方程的科学计算库，库内包含了丰富的计算函数供程序员调用。为了能够更好的开发出自己一套求解多维 Poisson 和 Schrodinger 方程的程序代码，这需要了解 FEniCS 整个开发流程。FEniCS 库的开发包括以下步骤：

(1) 先要确定好偏微分方程，已知该方程的边界条件和计算域 Ω 。基于 Python 的 FEniCS 库的底层代码是使用有限元方法来求解偏微分方程的，因此需要将偏微分方程改写成变分形式的方程。

(2) 这里是编程求解微分方程的开始，首先通过 import 的形式导入相对应的包，包里面会有求解方程的类和方法。接着定义好求解域内的均匀剖分或者非均匀剖分网格，在该网格上定义有限元函数空间 V 。通过使用 FEniCS 库，编写 Python 代码，调用 fem 模块中的 DirichletBC 类来设置好边界条件。

(3) 将偏微分方程问题表示为一个变分问题，对于 $u \in V$ ，使得对于所有的

$\forall v \in \hat{V}$, $a(u, v) = L(v)$ 。调用 $u = \text{TrialFunction}(V)$ 和 $v = \text{TestFunction}(V)$ 来设置有限元问题中的未知函数和测试函数。在 FEniCS 库中, 变分问题中双线性形式 $a(u, v)$ 和线性形式 $L(v)$ 公式能够通过函数 `inner` 或者 `dot` 直接转化为非常相似的 Python 代码, 这是 FEniCS 库求解偏微分方程的方便之处, 这一特性使得解决复杂的 PDE 问题变得容易很多。

(4) 接着使用函数 `solve` 求解变分问题 $a(u, v) = L(v)$, 计算得出未知函数 u 。

(5) 最后, 将数值解和精确解进行比较, `plot()` 方法能够使用 FEniCS 中的 `Viper` 组件快速显示网格和函数。使用该方法将计算结果绘制出来, 并将计算结果保存到文件中, 以便对外进行处理。

FEniCS 的主要特点是第 3 步和第 4 步的代码非常简洁, 开发人员调用功能模块求解偏微分方程的过程简单, 程序运行的速度快, 而其他大多数用于求解 PDE 的软件框架则需要更多代码和更大求解难度的编程。

2.6 本章小结

本章首先阐述了开发环境是如何搭建的, 简要介绍了目前求解偏微分方程的数学计算库, 提出本文所要选取的数学计算库 FEniCS。对于开源库 FEniCS 的发展前景作出了分析, 论述了 FEniCS 库在众多数学计算库中的巨大优势。接着对开源 FEniCS 库的结构框架进行了介绍, 详细说明了 FEniCS 库的 DOLFIN, FFC, FIAT, UFL 等一些重要组件以及在程序编译时起到的作用。详细介绍了在量子器件上求解 Poisson 和 Schrodinger 方程所需要的模块, 列举出好几个实例来说明模块在本文研究中的重要性, 并给出了相对应的代码以及计算结果图。最后, 详细介绍了 FEniCS 库求解偏微分方程的开发步骤。

第三章 Poisson 方程和 Schrodinger 方程有限元通用求解

3.1 微分方程的有限元求解方法

偏微分方程是各门科学和工程研究领域重要的基础方程，许多物理定律以及衍生出来的数学表达式都是偏微分方程形式^[33]。通过满足一定的边界条件，偏微分方程可以作为解决问题的基础，在此同时它可以表达同一物理现象的共性，这有利于人们对物理现象的分析和理解。目前求解偏微分方程的方法很多，有时可以很简单通过直接积分来得到相对应偏微分方程的精确解。但是对于某些特定情况下，又不得不使用一些特殊的数值模拟方法来求解^[34]。有限元方法对于任何几何形状的量子器件都能够简单地使用，并且它适用于各种边界条件和材料等问题，拥有易于编程，分析工具成熟等优点。因此本文提出了使用有限元法分别分析求解 Poisson 和 Schrodinger 方程。

目前已有许多文献使用传统的有限差分法（FDM）和有限体积法（FVM）来求解 Poisson 方程和 Schrodinger 方程的相关问题^[35]。本文使用了有限元法（FEM）来得出 Poisson 和 Schrodinger 方程。有限元方法的大部分成功归功于其通用性和优雅性，它允许在一个共同框架内分析和解决来自各个科学领域的各种微分方程。有限元方法成功的另一个因素是它的灵活性，它允许在有限元空间上定义不同的单元类型。

至今为止，有限元方法求解偏微方程的方法也有很多。相关的流体力学研究人员已经发现有限元方程也可以通过使用加权余量法或 Galerkin 方法的最小二乘法来获得。加权余量法是利用余量加权积分为零来求解偏微分方程近似解的一种方法，根据不同的加权函数和插值函数，得出不同的计算加权余量的方法。权函数的选择可以细分为最小二乘法，配置法，Galerkin 法和矩量法。

加权余量法求解偏微分方程的一般步骤为：

- （1）选取尝试函数，构造近似解。
- （2）根据求解问题的边界条件修改尝试函数。
- （3）分析写出加权余数表达式。
- （4）在尝试函数的条件下，令加权余数表达式为零，得出代数方程组，解之便

可以得出待定常数的值，从而求解出近似解。

本文所使用的有限元方法是通过将偏微分方程转化为变分方程来求解，从而使误差函数产生一个稳定的值并达到最小值^[36]。有限元方法的核心思想是近似解和离散化，其中求解域由许多相互关联的子域组成，并且根据求解域的边界条件为每个基本单元表示一个合适的近似解。对于现实大多数问题，其他数值计算方法都难以得到准确解。有限元方法计算精度高，不受几何形状复杂程度的限制，能适应各种复杂形状的电子元器件，这是本文使用有限元方法的主要原因。

假设偏微分方程通用形式如下所示：

$$[D]u(x) = f(x) \in \Omega \quad (3.1)$$

其中 D 是任意的常数， Ω 定义为求解域。

偏微分方程的边界条件为：

$$u(x) = u_0(x) \quad \text{on } \Gamma_D \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial n} = g_0(x) \quad \text{on } \Gamma_N \quad (3.3)$$

Γ_N 和 Γ_D 分别表示为 Neumann 和 Dirichlet 边界条件。有限元方法的基本思想是将偏微分方程（PDE）重写为一个变分问题。要做到这一点，要引入一个测试函数 v ，将偏微分方程的两端同时乘以 v ，然后在计算域上进行积分，并且使用部分积分来分离每个二阶导数。原来的 PDE 可以写成变分形式：

$$\int_{\Omega} [D'](u * v) dx + \int_{\Gamma_N} g v ds = \int_{\Omega} f v dx \quad \forall v \in \hat{V} \quad (3.4)$$

其中 D' 是整合到二阶导数后的简化算子， \hat{V} 是任意函数 v 所在的函数空间。未知函数 u 位于函数空间 V 。为了能够进行数值计算，需要定义一个离散空间 $\hat{V}_d \subset \hat{V}$ 和 $V_d \subset V$ ，将连续变分问题转化为离散问题。离散变分问题的变分形式如下所示：

$$\int_{\Omega} [D'](u_d * v) dx + \int_{\Gamma_N} g v ds = \int_{\Omega} f v dx \quad \forall v \in \hat{V}_d \subset \hat{V} \quad (3.5)$$

使用分部积分法，可以得出最终的变分表达式为：

$$a(u, v) = L(v) \quad (3.6)$$

其中：

$$a(u, v) = \int_{\Omega} [D^T](u_d * v) dx, \quad L(v) = \int_{\Omega} f v dx - \int_{\Gamma_N} g v ds. \quad (3.7)$$

有限元为离散微分方程提供了一种强有力的方法，但即使对于线性系统，求解所产生的代数系统也很复杂。良好的求解器不但处理好代数系统的稀疏性，并且能够在并行计算机上进行良好的扩展。线性求解是线性问题的基本运算，开源库 FEniCS 的求解器能够与 PETSc 和 Trilinos 等数学处理软件包进行交互，很好地完成这一系列的基本运算。有限元方法已成为求解微分方程的通用方法。本文通过使用基于有限元的 FEniCS 库来求解偏微分方程，必须先将偏微分方程转化为变分方程。这样，Poisson 方程的有限元解可以通过将连续变分问题转变为离散变分问题来求解获得，Schrodinger 方程的求解过程也是如此。

3.2 Poisson 方程有限元通用求解

在本次研究中，针对不同情况的实际问题，Poisson 方程会有不同的表现形式，我们有必要分析出 Poisson 方程有限元通用解法。提出使用基于有限元方法的 FEniCS 库来求解 Poisson 方程，它的通用解法都是需要先将 Poisson 方程转化为变分方程，有限元方法的出发点是以变分形式表示偏微分方程，本文要将 Poisson 方程转化为变分方程的形式。Poisson 方程的通用形式如下所示：

$$-\nabla^2 u(x) = f(x), \quad x \text{ in } \Omega \quad (3.8)$$

$$u(x) = u_D(x), \quad x \text{ on } \partial\Omega \quad (3.9)$$

其中 $u(x)$ 是未知函数； $f(x)$ 是已知函数； ∇^2 是拉普拉斯算子； $\partial\Omega$ 是计算域 Ω 的边界。

将偏微分方程（PDE）转化为变分问题的基本方法是将 PDE 乘以一个函数 v ，将得到的方程在计算域 Ω 上积分，然后对部分项的二阶导数进行积分。乘以 PDE 的函数 v 被称为测试函数。FEniCS 开源库也使用了试用函数和测试函数，试用和测试函数在某些制定函数属性的函数空间内。因此本文将 Poisson 方程两端乘以测试函数 v ，再进行积分，得到以下形式：

$$-\int_{\Omega} (\Delta u) v dx = \int_{\Omega} f v dx \quad (3.10)$$

公式（3.10）中的 u 为二阶导数，需要将它转化为一阶导数，积分后表达式如下所示：

$$-\int_{\Omega} (\Delta u)v dx = \int_{\Omega} \nabla u \nabla v dx - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial n} v ds \quad (3.11)$$

其中 $\frac{\partial u}{\partial n}$ 是 u 沿边界 $\partial\Omega$ 外法线方向的导数。测试函数 v 要在 u 的边界部分消失，

这意味着在整个边界 $\partial\Omega$ 上 $v=0$ 。结合公式 (3.10) 和 (3.11) 可推导出：

$$\int_{\Omega} \nabla u \nabla v dx = \int_{\Omega} f v dx \quad (3.12)$$

为了能够方便表示变分方程，FEniCS 库引入了统一的规范符号等式：

$$a_k(u, v) = L_k(v) \quad (3.13)$$

其中：

$$a_k(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v dx, \quad L_k(v) = \int_{\Omega} f v dx \quad (3.14)$$

在数学领域中， $a_k(u, v)$ 被称为双线性形式， $L_k(v)$ 则为线性形式。

Poisson 方程经过一系列的转化，现在可以使用开源 FEniCS 库来对 Poisson 方程进行求解并计算出器件上的电势分布。静电学研究领域经常会遇到 Poisson 方程，如果空间的某区域内存在带电粒子，通常会给出电子的电子数密度，得出电荷体密度，从而可以分析区域内电子分布情况^[37]。因此，在存在带电粒子的量子器件上，本文使用 Poisson 方程来分析电子器件内部的载流子分布情况^[38]。

3.3 Schrodinger 方程有限元通用求解

本文将 Schrodinger 方程的计算结果运用不同维数和不同形状的几何模型上，这时 Schrodinger 方程会有不同的表现形式。对于方程的不同表现形式，使用基于有限元方法的 FEniCS 库来求解 Schrodinger 方程的方法是一样的，并具有类似的过程。它的通用解法都是先将 Schrodinger 方程转化为变分方程的形式，再通过调用 FEniCS 库函数定义 Schrodinger 方程的变分形式。Schrodinger 方程的一般形式如下所示：

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*(x)} \frac{d}{dx} \right) \Psi(x) + V(x) \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (3.15)$$

其中 $\Psi(x)$ 是电子的波函数； $m^*(x)$ 是电子的有效质量； E 是电子的总能量； $\hbar = h/2\pi$ 是约化普朗克常量； $V(x)$ 是电子势能。将 Schrodinger 方程改写为：

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \Psi(\mathbf{x}) + [E - V(\mathbf{x})] \Psi(\mathbf{x}) = 0 \quad (3.16)$$

与求解 Poisson 方程方法类似，根据变分方法，在 Schrodinger 方程两端同时乘以一个测试函数 v ，将得到的方程在整个封闭的计算域上积分。最后得出的变分方程如下所示：

$$\int_{\Omega} \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}} d\mathbf{x} + \int_{\Omega} V(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} E \Psi(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (3.17)$$

为了能够使用 FEniCS 库来表示 Schrodinger 方程的变分形式，我们令：

$$a(\Psi, v) = \int_{\Omega} \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}} d\mathbf{x} + \int_{\Omega} V(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (3.18)$$

$$m(\Psi, v) = \int_{\Omega} E \Psi(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (3.19)$$

通过调用 FEniCS 函数中的 inner 或者 dot 方法来定义 Schrodinger 方程的变分形式，定义好网格和离散函数空间，通过创建特征值求解器完成对 Schrodinger 方程的求解。使用有限元方法求解 Schrodinger 方程，计算得出量子系统中的波函数。虽然不能准确地测出单个粒子的动量和所处的位置，但是在某个空间内波函数可以知道单个粒子出现的概率大小^[39-40]。

3.4 本章小结

本章首先阐述了使用有限元方法求解偏微分方程的高效性和灵活性，并详细说明了有限元方法求解微分方程的具体步骤。介绍了使用有限元方法分别求解 Poisson 方程和 Schrodinger 方程通用方法，给出了将 Poisson 方程和 Schrodinger 方程转化为变分方程的具体思路和步骤，这为下文将求解结果运用到量子器件上打下坚实的基础。

第四章 基于 FEniCS 库的一维 Poisson-Schrodinger 方程的自洽求解

4.1 相关公式

Poisson 方程表示如下：

$$\frac{d^2\phi(z)}{dz^2} = \frac{-q[N_D(z) - n(z)]}{\epsilon_0\epsilon_s} \quad (4.1)$$

其中 $\phi(z)$ 是位置 z 处的静电势； $N_D(z)$ 是离化的施主浓度； $n(z)$ 是电子密度分布； q 是电子电量； $\epsilon_s(z)$ 是 AlGaAs 或者 GaAs 的介电常数，这取决于对哪一部分求解，本文在这里只会考虑分段介电常数^[41]。

垂直于界面上的 Schrodinger 方程如下所示^[42]：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right]\Psi(z) = E\Psi(z) \quad (4.2)$$

电子势能 $V(z)$ 与静电势 $\phi(z)$ 之间的关系是：

$$V(z) = -q\phi(z) + \Delta E_c(z) \quad (4.3)$$

其中 $\Delta E_c(z)$ 是界面处导带能量偏移值。

量子系统中的波函数 $\Psi_k(z)$ 与电子浓度 $n(z)$ 之间的关系为^[43]：

$$n(z) = \sum_{k=1}^m \Psi_k^*(z) \Psi_k(z) n_k \quad (4.4)$$

其中 m 是计算中考虑的束缚态数目， n_k 表示为每一个束缚态上的电子浓度，可以通过费米能级函数计算出来， n_k 可以表示为以下形式：

$$n_k = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \int_{E_k}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{(E - E_F)/KT}} dE \quad (4.5)$$

其中 E_k 是状态 k 的特征能量， E_F 是费米能级，它是量子系统中电子的化学势。 K 是波尔兹曼常数， T 是温度。

通过上面 5 条公式，本文将使用一个迭代的过程来获得一维 Poisson-Schrodinger 方程的自洽解。

4.2 方势阱中的粒子

在量子器件的模拟计算中，我们先要根据半导体材料粒子的运动情况，给出载流子的方势阱，才能实现对 Schrodinger 方程的求解，得出波函数并分析粒子的分布情况^[44]。量子力学解题的一般思路为根据粒子运动的实际情况，写出准确的势阱函数 $V(x)$ 。将势阱函数代入到 Schrodinger 方程中，从而求解出特征值和特征能量。利用计算结果，分析量子器件中粒子的概率密度分布情况。粒子在阱内受力为零，势能也为零，它在阱壁上受到极大的斥力，这导致粒子大部分只能在阱内运动，不能到阱外去。不同维度的空间内，方势阱呈现出不同的形态。一维、二维、三维空间内方势阱中的粒子分别被束缚在一条线段、一个矩形内、一个长方体内。在这里，本文只对一维方势阱进行讨论和分析。

4.2.1 无限深方势阱

在一维无限深方势阱上，坐标系图形如图 4-1 所示，当粒子位于 $0 < x < a$ 范围内，该粒子处于势阱内，势能为零。当粒子位于 $x < 0$ 或者 $x > a$ 内，则说明该粒子处于阱外。在阱内粒子是可以自由运动，但是在阱外粒子的势能为无穷大，这使粒子在阱壁上受到很大的斥力，粒子不能通过阱壁到阱外去^[45]。

一维空间内的势能函数表达形式为：

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x < 0, x > a \end{cases} \quad (4.6)$$

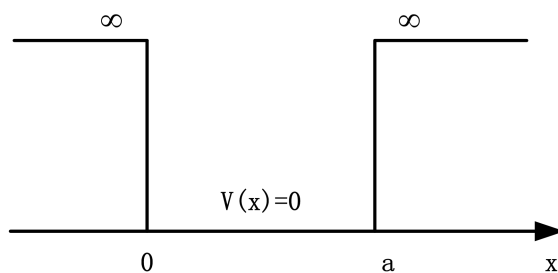


图 4-1 无限深方势阱坐标图

Fig.4-1 Infinity deep square well chart

4.2.2 有限深方势阱

在一维有限深方势阱上，坐标系图如图 4-2 所示，设质量为 n 的粒子沿 x 轴运

动，当粒子位于 $0 < x < a$ 处，即阱内，粒子的势能为 V_0 。当粒子位于 $x > a$ 或者 $x < 0$ 时，即阱外，粒子的势能为零。

一维有限深势阱表达式为：

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a \\ V_0, & |x| \geq a \end{cases} \quad (4.7)$$

其中 V_0 是方势阱的深度， $2a$ 是方势阱的宽度。

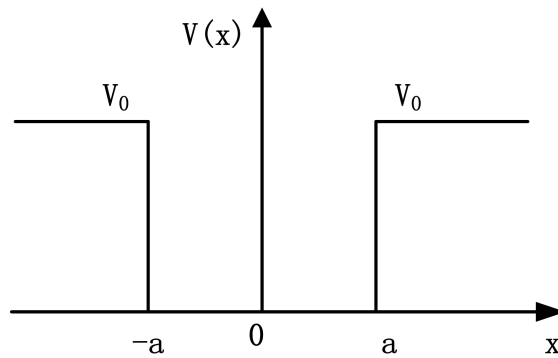


图 4-2 有限深方势阱坐标图

Fig.4-2 Limited deep square well chart

本文提出使用方势阱作为 Schrodinger 方程中的势函数 $V(x)$ 。量子器件 AlGaAs/GaAs 的有限深方势阱如图 4-3 所示，本文选取了有限深方势阱的势函数 $V(x)$ ，将势函数 $V(x)$ 代入到 Schrodinger 方程上就可以求解出电子的波函数，本征值和本征能量。

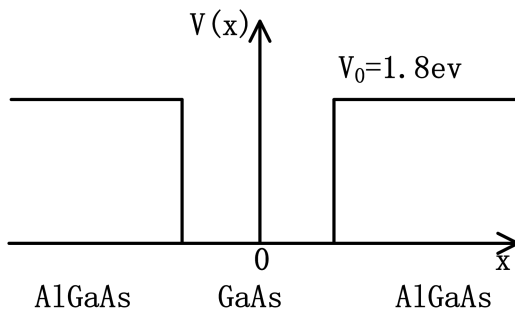


图 4-3 AlGaAs/GaAs 的有限深方势阱

Fig.4-3 Finite-deep square potential well of AlGaAs/GaAs

4.3 Fermi-Dirac 分布函数

在量子系统中，Fermi-Dirac 分布函数可以表示能量等级 E 被电子占据的几率大小。它是载流子按能量分布的一种定律。费米-狄拉克分布适用于在热平衡状态下遵守 Pauli 不相容原理并且自旋量子数为半奇数的粒子^[46]。通过设定 $T = 0$ ，可以最清楚地看到费米能量的重要性。在绝对零度下，对于小于费米能级的能量，电子占据的几率为 1，对于大于费米能量的能量，电子占据的几率为 0。

Fermi-Dirac 分布函数的表达式为：

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/KT}} \quad (4.8)$$

其中 E 是量子系统中的能量值。

费米能级的高低是衡量出某能级上被电子占据情况的一个标准^[47]，当 $(E-E_F) > 2000T$ ， $f(E) = 0.015$ ，即表示为比费米能级高出 2000T 的能级被电子占据的几率为 1.5%。其中越靠近费米能级的能级（即 $E-E_F$ 越小），它被电子占据的概率就越大。只要给出费米能级的值，就可以知道半导体材料的电荷载流子浓度。本文通过设置好费米能级，从而可以求出每个束缚态下的载流子浓度。

4.4 量子器件模型

本文提出了将一维 Poisson-Schrodinger 方程的求解结果运用到具体的量子器件上，因此我们需要选取出合适的半导体材料来设计量子器件模型。近年来，以 GaAs，GaN 为代表的宽禁带半导体在光学器件上有着广泛的应用^[48]，除了突出的光学特性外，GaAs 体系的超晶格量子阱材料稳定性好，具有很强的抗辐射能力，较快的电子饱和迁移速率和较高的击穿电压，这使得这些宽禁带半导体能够制作出许多高频、耐高温、大功率的电子器件^[49]。近年来，由于 AlGaAs/GaAs 超晶格量子阱能够吸收红外线，AlGaAs/GaAs 器件逐渐被相关研究人员用来研制红外探测器，这是研制量子阱光探测器的一个热点。AlGaAs/GaAs 量子阱红外探测器（QWIPs）具有生长制备工艺完善、抗辐射性能好、稳定性强、材料均匀性好等优点，所以它能够广泛应用于生物医疗成像、军事的战场侦查、地雷探测等领域^[50]。目前在太赫兹特性、多波段等方向上，基于 AlGaAs/GaAs 量子阱材料的红外探测器已经取得了重大突破。

AlGaAs/GaAs 量子器件具有高的击穿电场、较高的电导率、较宽的禁带宽度等

优点，本文选取它作为这次研究的量子器件。AlGaAs/GaAs 量子器件是大部分研究人员都比较熟悉的，这也极大方便我们理解并验证出计算模拟结果的准确性。如图 4-4 所示，一维空间内本文设计 AlGaAs/GaAs 量子器件为三层，第一层为 AlGaAs 材料，宽度为 15nm，第二层为 GaAs 材料，宽度为 20nm，第三层为 AlGaAs 材料，宽度为 15nm。

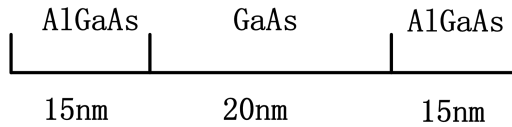


图 4-4 一维量子器件模型

Fig.4-4 One-dimensional quantum device model

4.5 算法设计与实现

本文提出了求解一维 Poisson-Schrodinger 方程的自洽解，再将计算结果运用到量子器件 AlGaAs/GaAs 上。算法的实现其实是一个迭代的过程，需要使用到本章 4.1 小节上的 5 条公式来实现求解。

本文采用了 Python 语言进行编程实现，结合开源库 FEniCS，将上面自洽地求解 Poisson-Schrodinger 方程的 5 条公式以代码的形式编写出来。按照上面所提到 FEniCS 库的开发步骤，本文先对量子器件 AlGaAs/GaAs 进行相对应的网格剖分，设置好计算域的边界条件和离散函数空间，接着给出一个任意的初始电子势能 $V(x)$ ，将 $V(x)$ 代入到一维 Schrodinger 方程中可以求出波函数。计算出波函数之后，将波函数以及相对应的特征能量代入到公式 (4.4) 和 (4.5) 中，从而可以计算出电子密度 $n(x)$ 。接着将电子密度 $n(x)$ 和施主浓度 $N(x)$ 代入到一维 Poisson 方程中可以得出电子的静电势 $\phi(x)$ 。再将静电势 $\phi(x)$ 代入到公式 (4.3) 求出一个新的电子势能 $V(x)$ 。接着将这个新的电子势能 $V(x)$ 代入一维 Schrodinger 方程中，从而求解出新的特征值和相对应的特征能量。再将新的特征值代入到公式 (4.4) 和 (4.5) 中，可以得出新的电子密度 $n(x)$ 。将这个新的电子密度 $n(x)$ 和施主浓度 $N(x)$ 代入到一维 Poisson 方程中来计算出新的电子势能 $V(x)$ 。以这种迭代的方式进行，重复这个过程直到能够 $V(x)$ 和 $n(x)$ 达到收敛的准则，我们将满足的误差标准设置为小于等于 10^{-5} 。算法实现的程序流程图如图 4-5 所示。

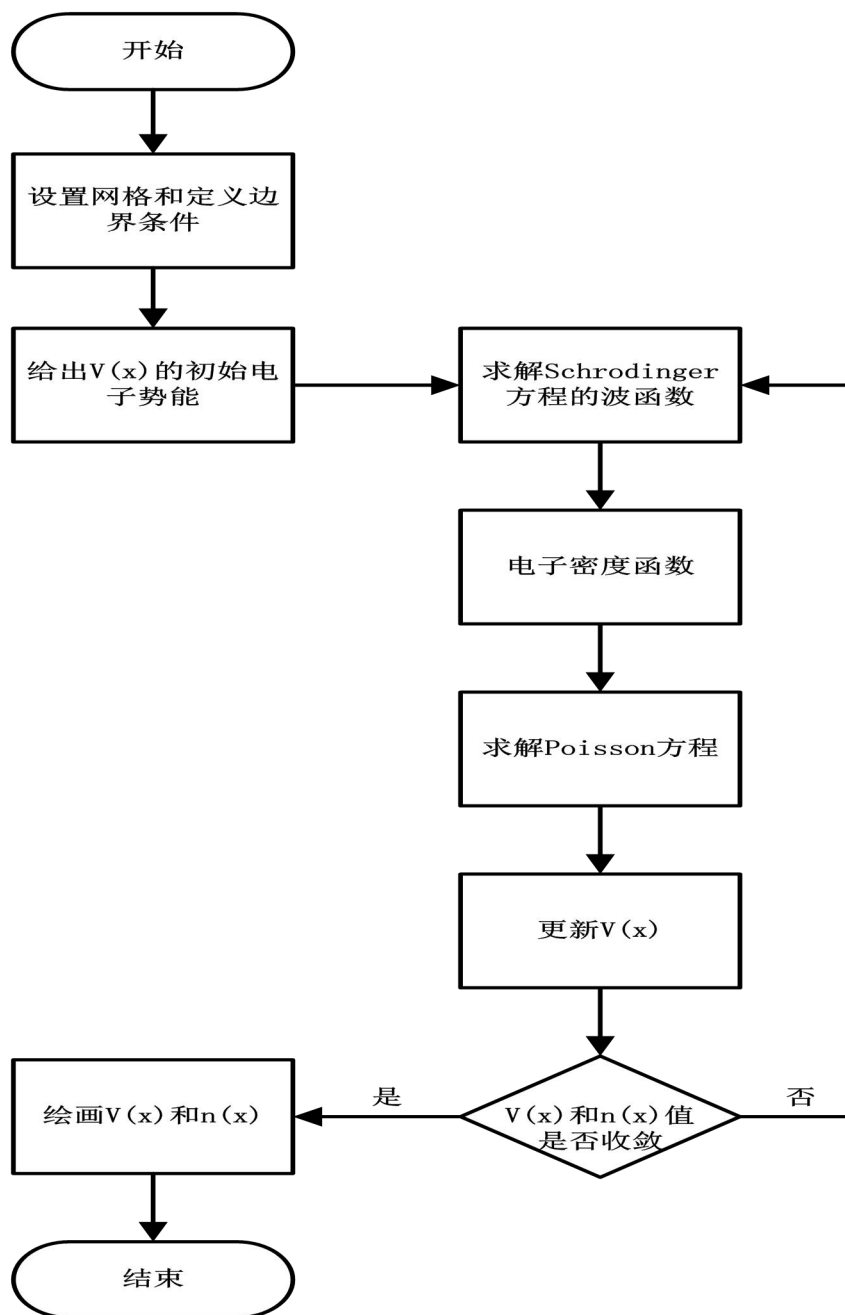


图 4-5 程序流程图

Fig.4-5 Program flow chart

4.6 程序设计与实现

本文将程序编写分成了 5 个模块，分别为 meshcreate 模块、poiss_schrd_solver 模块、poisson_solver 模块、schrodinger_solver 模块、carrierdensity 模块。其中 poiss_schrd_solver 模块负责主函数程序的编写，绘画出计算结果。poisson_solver 模块包含量子器件 AlGaAs/GaAs 子域内 Poisson 方程的求解，返回电子的静电势。

schrodinger_solver 模块负责器件子域内 Schrodinger 方程的求解, 返回特征值和特征能量。carrierdensity 模块负责电子密度的模拟计算并将计算结果返回到 poiss_schrd_solver 模块中。meshcreate 模块负责一维量子器件的网格剖分, 同时包含了网格的非均匀剖分功能模块, 可以根据模拟计算的实际需要实现量子器件局部或者边界的非均匀网格剖分。

4.6.1 meshcreate 模块

主要用于非均匀网格生成, 对量子器件网格剖分的网格数越多, 模拟计算出来的物理量就会更加准确。然而, 当增大网格剖分的数量时, 程序在编译运行时所消耗的内存也不断增大, 这极有可能会使计算机处于死机的状态。因此, 本文提出将网格的非均匀剖分的方法运用到对量子器件的网格剖分上。根据研究人员的需求, 它可以在原来均匀网格剖分的基础上实现 AlGaAs/GaAs 量子器件内部任何地方的细分。这不仅能够提升程序编译运行的速度, 还提高了模拟计算物理量的准确性。本文将非均匀剖分运用于材料层与层之间的边缘处, 大小或者长度可以根据自己需要进行设置。对于一维空间, 我们将网格细分的长度为 5nm。

对于一维量子器件上的非均匀网格剖分, 本文首先调用了 mesh 模块中 IntervalMesh 类, 调用这个类只要设定好坐标和要求网格剖分的网格数量就能对量子器件自动进行网格剖分。接着便开始非均匀网格剖分程序编写, 因为采用的是子域内的网格剖分, 所以需要使用继承于 SubDomain 类的 CompiledSubDomain 类来实现。通过构造函数方法来定义非均匀网格剖分的区域, 构造函数的参数为表达式形式。最后调用 refine 函数, 可以通过局部优化来细化网格。网格生成类的部分关键性程序如下:

```
class MeshCreate:#定义网格生成类
    def mesh1d(self):#定义一维网格生成函数
        mesh1 = dcm.IntervalMesh(nx, 1, xf)#生成网格数为 nx 的网格
        cf=CellFunction('bool',mesh1)#定义单元函数
        #设置非均匀剖分的子域位置
        subdomain1=df.CompiledSubDomain('std::abs(x[0]-15) < 5')
        subdomain2=df.CompiledSubDomain('std::abs(x[0]-35) < 5')
```

```

subdomain1.mark(cf,True)
subdomain2.mark(cf,True)
mesh=df.refine(mesh1,cf)#细化网格
return mesh #返回 mesh 对象

```

4.6.2 poiss_schrd_solver 模块

该模块起到了主函数的作用，它是程序的入口，程序从这里开始并且到最后一句结束。通过 import 方式导入包，dolphin 是开源库 FEniCS 的核心组成部分，它包含了用于计算网格和有限元的数据结构和算法。在科学计算领域中，numpy 库是最有效的 Python 科学计算库之一，它能够用于数学矩阵和向量的计算。在 numpy 库的基础上，scipy 库在数学以及工程计算方面增加了线性代数、傅里叶变换、图像处理 and 常微分方程数值计算求解等有效的库函数。在这里，scipy 和 numpy 用于定义物理常量和高效阵列。time 和 sys 模块则用于计时并将计算结果保存到文件。

在该模块里，本文定义了 Schrd_Poiss_Solver 类，完成迭代的过程，求解出一维 Poisson-Schrodinger 自洽解。它由 run() 和 plot() 两条函数组成，run() 函数主要负责程序的执行部分，求解 Poisson 方程的电子静电势，Schrodinger 方程的波函数，特征能量和电子浓度都会在该函数中输出并用于模拟计算，这里面也可以说成是一个迭代的过程，用循环的方式来实现，当电子的电子势能 $V(x)$ 和电子密度 $n(x)$ 达到收敛的准则时，程序便会跳出循环。最后将计算结果用 plot() 方法输出电子密度 $n(x)$ 、电子势能和波函数。run() 函数还包含了计算时间的功能，这对于调试程序起到很大的作用。plot() 函数负责计算结果的可视化，将电子密度，波函数等计算模拟值绘画出来。poiss_schrd_solver 模块的部分重要性代码如下所示：

```

class Schrd_Poiss_Solver:
    def run(self):
        while k < 8:#用循环的方式完成迭代过程
            schr_solver=Schrodinger_Solver()#创建 Schrodinger 方程的对象
            poiss_solver=Poisson_Solver()创建求解 Poisson 方程的对象
            #求解出特征值和特征能量
            eigenvalues,eigenvectors=schr_solver.schrodingerEq(Pot)

```

```

#计算出电子密度
nk=DensityFunction().electronOccupationState(eigenvalues)
new_n=DensityFunction().electronDensityFunction(eigenvectors,nk)
#将电子密度代入到 poisson 方程求解出静电势
phi = poiss_solver.poissonEq(new_n)
.....#省略部分代码
k = k+1
if(n_error < 10e-5 and v_error < 10e-5): #跳出循环
    break
return [eigenvectors,new_Pot,phi]#返回特征能量、电子势能、静电势

```

4.6.3 poisson_solver 模块

主要用于求解 Poisson 方程，并将求解出来的静电势返回到 poiss_schrd_solver 模块。在该模块中，首先对器件进行子域的划分，在量子器件模型上，对于一维空间内本文设计了三层，分别由半导体材料 AlGaAs 或者 GaAs 组成。本文提出了使用三个 SubDomain 子类来定义三个子域，SubDomain 类是一个根据成员函数定义空间子域的类，其中对于属于子域的点返回 True，对于不属于子域的点则返回 False。为了正确定义域，本文将重写基类 inside 函数。如果插入的点 x 是子域的一部分，它将返回一个布尔值。on_boundary 上的布尔值对于将整个网格边界划分为子域非常有用。本文先定义三个 SubDomain 的子类，在初始化子域 AlGaAs1、GaAs1、AlGaAs2 之后，接着重写父类 SubDomain 中 inside 函数，重新定义好每层材料的宽度。然后使用 MeshFunction 函数，通过参考编号的形式来标记每个子域的所有单元格。FEniCS 库惯例将子域编号为 0, 1, 2, ... 等阿拉伯数字。

接着本文定义了 Poisson_Solver 类，调用 poissonEq() 函数来完成 Poisson 方程的求解过程。本文定义使用基于有限元方法的 FEniCS 库来求解 Poisson 方程，求解过程可以分为以下步骤：

(1) 先要根据量子器件模型定义好网格，因为求解的是一维 Poisson 方程，所以本文调用了上述 mesh 模块中的 mesh1d 方法完成器件模型的网格化。并在该网格上定义好离散函数空间。

(2) 调用 DirichletBC 类完成边界条件的设置，并实例化 AlGaAs1、GaAs1、

AlGaAs2 三个子域对象，通过 `mark()` 方法标记子域的编号分别为 1, 2, 3。

(3) 定义测试函数和求解函数，为了能够定义一维 Poisson 方程的变分形式，FEniCS 库引入了规范符号等式，通过调用 `inner` 或者 `dot()` 方程定义 Poisson 方程的变分形式。

(4) 调用 `solve()` 方法完成对一维 Poisson 方程的求解，并将计算出的电势值返回到 `poiss_schrd_solver` 模块中，继续完成迭代的过程。

4.6.4 schrodinger_solver 模块

该模块主要负责 Schrodinger 方程的求解，并将求解出的特征值和特征能量返回到 `poiss_schrd_solver` 模块。我们首先同样需要先对量子器件进行子域划分，与 `poisson` 模块中的一样，在这里就不重复具体的子域划分思路和步骤。接着定义了 `Schrodinger_Solver` 类，调用 `schrodingerEq` 函数完成一维 Schrodinger 方程的求解。本文通过调用基于有限元方法的 FEniCS 库对一维 Schrodinger 方程进行求解，求解的具体思路和步骤如下所示：

(1) 调用 `mesh` 模块中的 `mesh1d` 方法完成一维量子器件模型的网格化，并在该网格上定义好离散函数空间。

(2) 将 AlGaAs1、GaAs1、AlGaAs2 三个子类实例化对象，并调用 `mark` 方法对这三个对象进行标志编号为 1, 2, 3。

(3) 通过调用 `inner` 方法定义好一维 Schrodinger 方程的变分形式，因为量子器件的层数为三层，分别由不同半导体材料组成，这导致了子域参数的不同。本文需要分别对不同子域进行计算。

(4) 调用 `assemle_system` 方法完成刚度矩阵组装，通过创建特征值求解器，再调用 `SLEPcEigenSolver` 类中的 `solve` 方法完成一维 Schrodinger 方程的求解。并将求解出来的特征值和特征能量输出到 `poiss_schrd_solver` 模块，继续完成迭代的过程。

4.6.5 carrierdensity 模块

该模块主要用于计算电子密度函数和每个束缚态上的电子浓度函数。通过使用 `mpmath`, `numpy` 等扩展库完成量子器件中电子密度的计算，`mpmath` 是一个用于多精度浮点运算的纯 Python 库，它提供了广泛的运算函数。通过使用 `mpmath` 库中的

quad 函数就能够快速计算出 Fermi-Dirac 分布函数。在该模块中，本文定义了一个 DensityFunction 类，该类包含了 electronOccupationState 和 electronDensityFunction 函数，这两个函数分别完成公式 (4.4) 和 (4.5) 的计算求解功能，先要将求解 Schrodinger 方程的每个特征值代入到公式(4.5)中计算出每个束缚态上的电子浓度，接着将电子浓度代入到公式 (4.4) 中计算得出量子器件上的电子密度。最后将电子密度输出到 poiss_schrd_solver 模块中完成迭代的过程。

4.7 计算结果可视化

通过实现这种迭代方式求解一维 Poisson-Schrodinger 方程自洽解，小论文中已经将求解结果运用到量子器件 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 上，如图 4-6 所示，绘画出了 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结和 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ 双异质结的能量导带图。

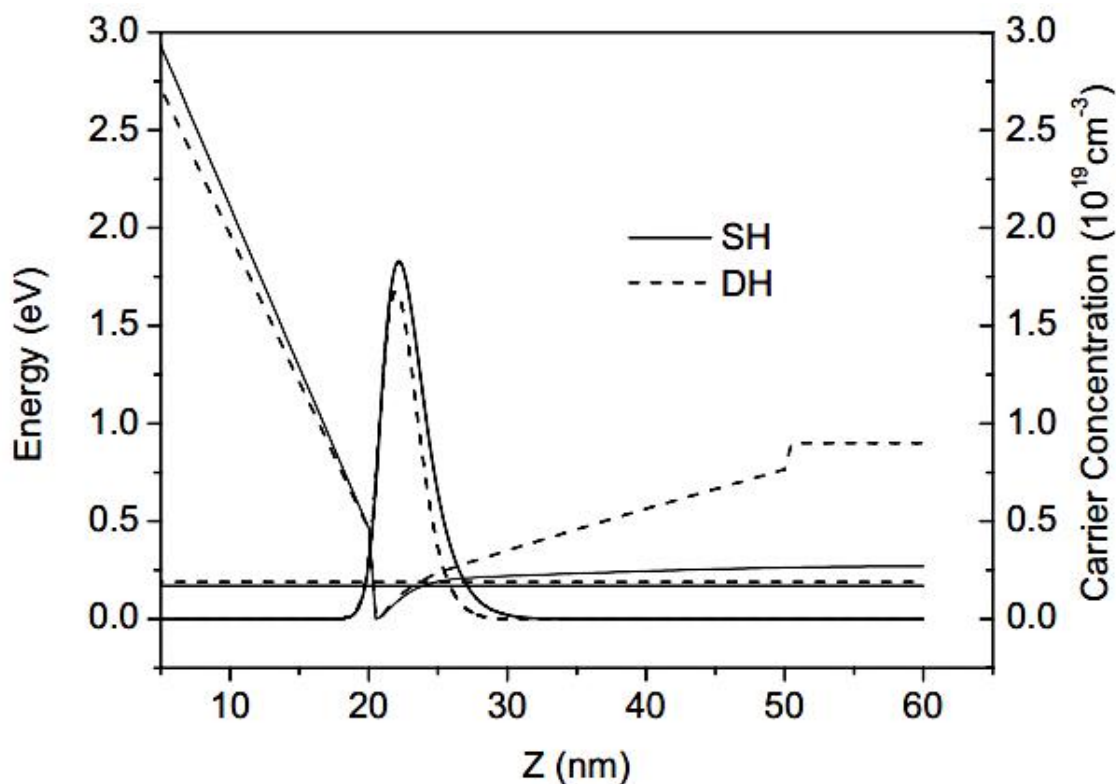


图 4-6 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结（实线）和 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ 双异质结（虚线）的导带图和电子分布

Fig.4-6 Conduction band diagrams and electron distribution of $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$ heterojunction(solid) and $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ double heterojunction(dashed)

下面本文将运算结果运用于量子器件 $\text{AlGaAs}/\text{GaAs}$ 上，一维空间内的量子器件呈现的形态是一条线段，这线段上分别由不同长度的半导体材料 AlGaAs 或者 GaAs

组成，可以看作为三层。在有限深方势阱上，本文将阱内的位置定义在第二层 GaAs 材料上，阱外的位置定义在第一层和第三层。粒子由于处于束缚态，大部分的粒子都被限制在阱内运动。一维空间内量子器件 AlGaAs/GaAs 的电子密度如图 4-7 所示，粒子大部分存活在 z 轴上 (15, 35) 之间，而且电子密度最大值能达到 10^{18} 级别。图 4-8、4-9、4-10 分别为不同束缚态下的波函数，微观粒子的运动状态由波函数来描述的。本文将量子阱定义在量子器件的中间部位，大部分粒子只能在阱内运动。通过观察波函数结果图，我们能够清楚看出量子器件中粒子的分布情况。

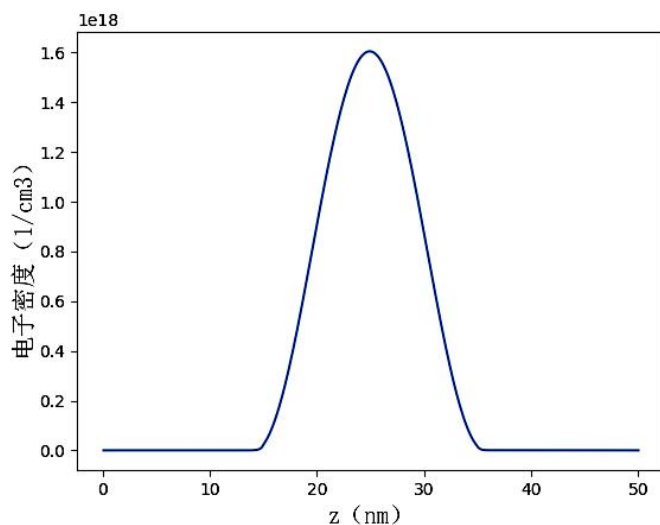


图 4-7 一维空间上的电子密度

Fig.4-7 Electron density on a one-dimensional grid

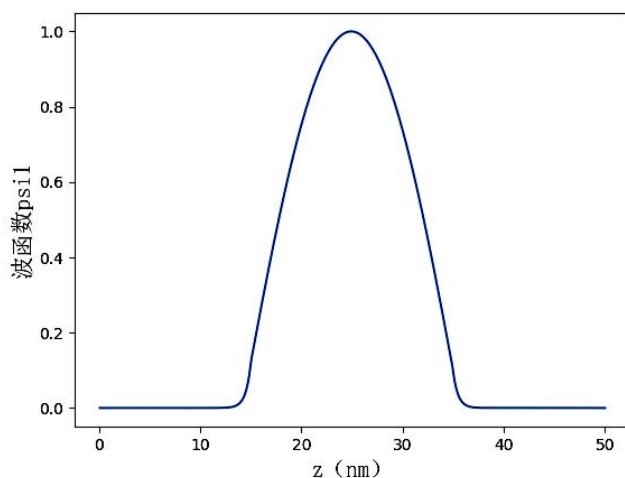
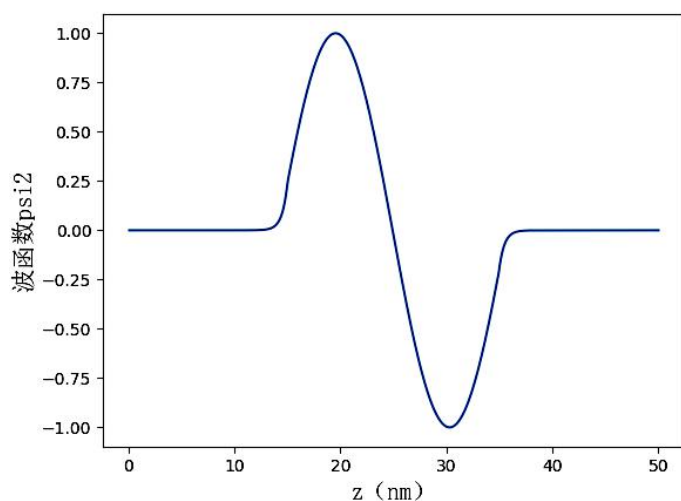
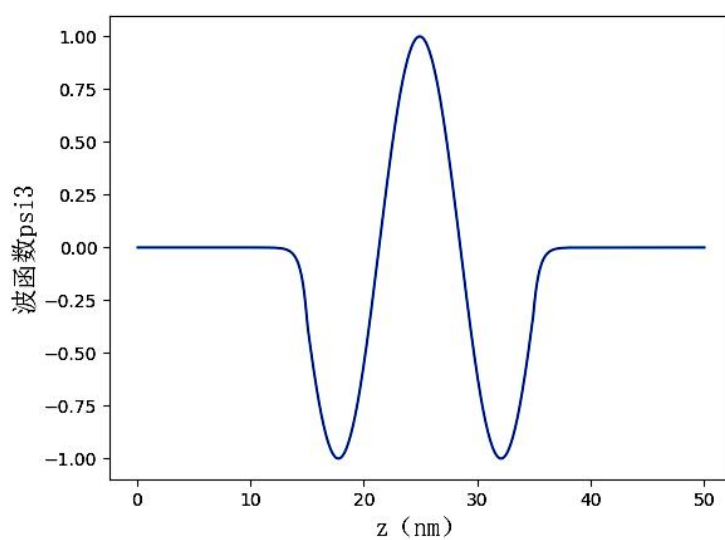


图 4-8 一维空间上 $k=1$ 时的波函数

Fig.4-8 Wave function when $k = 1$ in one-dimensional space

图 4-9 一维空间上 $k=2$ 时的波函数Fig.4-9 Wave function at $k=2$ in one-dimensional space图 4-10 一维空间上 $k=3$ 时的波函数Fig.4-10 Wave function at $k=3$ in one-dimensional space

4.8 本章小结

本章主要详细论述了使用数值算法自洽求解一维 Poisson-Schrodinger 方程，阐述了整个算法的实现过程，介绍了一维 Poisson-Schrodinger 方程所需要的相关理论和技术基础，采用 Python 代码开发，编写了五大 Python 模块完成求解的过程。通过使用这种迭代方法完成对一维 Poisson-Schrodinger 方程的自洽求解，并将计算结

果运用到量子器件 AlGaAs/GaAs 和 AlGaIn/GaN 上,给出了 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结和 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ 双异质结的能量导带图,并绘制出了量子器件 AlGaAs/GaAs 内电子密度和量子系统中的波函数。

第五章 基于 FEniCS 库的二、三维 Poisson 方程和 Schrodinger 方程有限元求解

5.1 二、三维 Poisson 方程有限元求解

本文提出使用基于有限元法的 FEniCS 库对二、三维 Poisson 方程进行求解，二、三维 Poisson 方程分别如下所示：

$$\varepsilon_s \varepsilon_0 \nabla^2 \phi(x, y) = -q[N_D(x, y) - n(x, y)] \quad (5.1)$$

$$\varepsilon_s \varepsilon_0 \nabla^2 \phi(x, y, z) = -q[N_D(x, y, z) - n(x, y, z)] \quad (5.2)$$

光电导天线是太赫兹波的主要来源，在天线两条电极之间加上偏置电压 V ，天线上的电子便会在电压的作用下加速运动，电子的这种加速运动便会发射出太赫兹电磁波。目前太赫兹波在环境监控、国家安检、生物医学等领域有着广泛的应用。本文提出将 Poisson 方程的计算结果运用到由半导体材料 GaAs 制作而成的光电导天线模型上。根据开源 FEniCS 库的开发步骤和 Poisson 方程有限元通用求解，先定义好正负电极在求解域内的位置，将二、三维 Poisson 方程转化为变分方程，设置好边界条件，再调用 FEniCS 库函数分别对二、三维 Poisson 方程进行求解。在光电导天线上求解 Poisson 方程的部分关键程序代码如下所示：

```
class Pole_0(dcm.SubDomain):#定义负极在求解域中的位置
    def inside(self,x,on_boundary):
        return dcf.between(x[0], (0,10)) and dcf.between(x[1], (0,35))
class Pole_1(dcm.SubDomain):#定义正极在求解域中的位置
    def inside(self,x,on_boundary):
        return dcf.between(x[0], (45,50)) and dcf.between(x[1], (0,35))
.....#省略部分代码
bc3=df.DirichletBC(V,0.0,pole_0)#定义边界条件
bc4=df.DirichletBC(V,3.0,pole_1)
bcs=[bc3,bc4]
```

```

a=df.inner(df.grad(u),df.grad(v))*df.dx#定义变分问题
m=e0*f*v*df.dx
# 计算求解出精确解
df.solve(a==m,u,bcs)#求解 Poisson 方程

```

5.1.1 光电导天线模型

二维光电导天线模型如图 5-1 所示，本文设计的光电导天线由 GaAs 材料制作而成，它的长度为 $50\mu\text{m}$ ，宽度为 $35\mu\text{m}$ 。光电导天线的电极长，宽分别为 $10\mu\text{m}$ ， $35\mu\text{m}$ ，在光电导天线的正负极上分别加入 $+3\text{V}$ 和 0V 电压。三维光电导天线模型如图 5-2 所示，它的长，宽，高分别为 $50\mu\text{m}$ ， $35\mu\text{m}$ ， $7\mu\text{m}$ 。三维电极的长，宽，高分别为 $10\mu\text{m}$ ， $35\mu\text{m}$ ， $3\mu\text{m}$ ，同样分别在正负极上加入 $+3\text{V}$ 和 0V 电压。

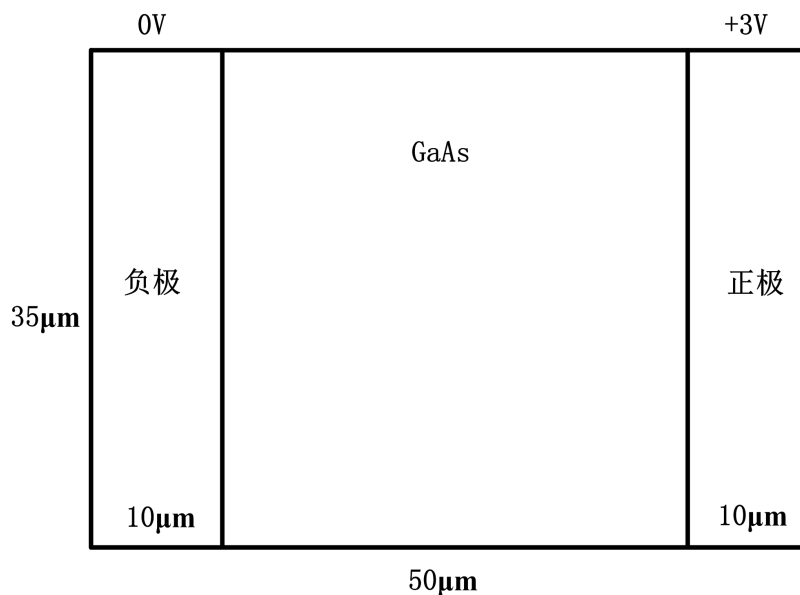


图 5-1 二维光电导天线模型

Fig.5-1 Two-dimensional photoconductive antenna model

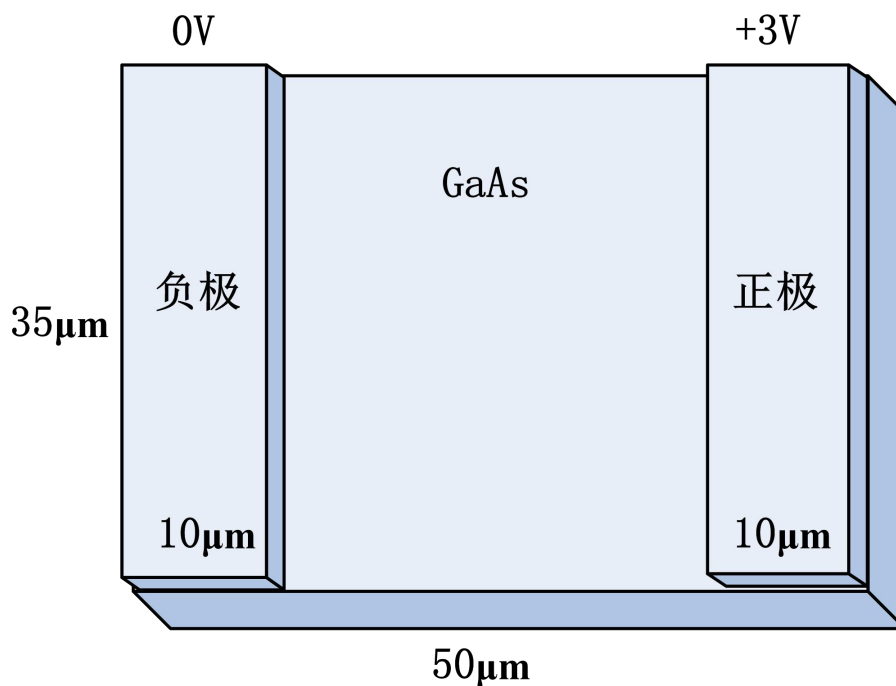


图 5-2 三维光电导天线模型

Fig.5-2 Three-dimensional photoconductive antenna model

5.1.2 光电导天线模型的有限元网格化

本文采用有限元方法对二、三维 Poisson 方程进行求解，将二、三维光电导天线模型进行有限元网格化。如图 5-3 所示，在二维光电导天线模型上，设计 x 轴的剖分数为 20, y 轴上的剖分数为 20。为了能更加准确计算光电导天线上的电势分布，本文对二维光电导天线模型进行非均匀网格剖分，将网格细分的部位定义在电极的附近。在三维光电导天线模型上，本文调用了 FEniCS 库中的 `mshr` 模块，先分别将两条电极和衬底进行网格化，再将这三部分进行组合，三维光电导天线的网格化结果如图 5-4 所示：

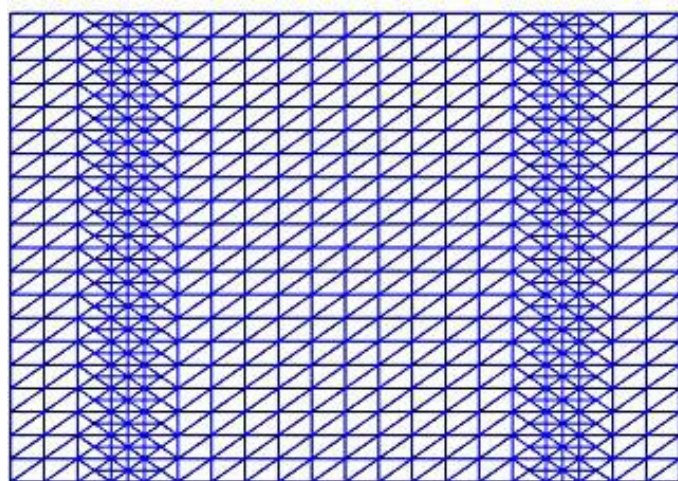


图 5-3 二维光电导天线非网格剖分

Fig.5-3 Non-meshing of a two-dimensional photoconductive antenna

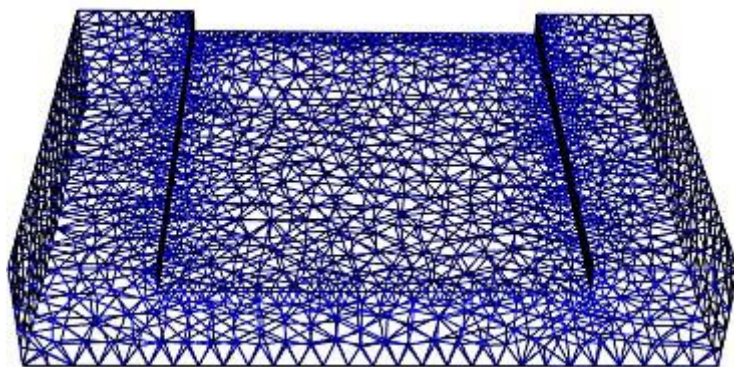


图 5-4 三维光电导天线网格剖分

Fig.5-4 Three-dimensional photoconductive antenna meshing

5.1.3 计算结果及电势分布

在二维光电导天线上，本文提出使用有限元方法对二维 Poisson 方程进行求解，计算结果如图 5-5 所示，右边有相对应的色标值，色标值范围从 0 到 3。不同颜色对应不同的计算结果值，我们可以看出光电导天线的左边电势为 0V，右边电势为 3V。

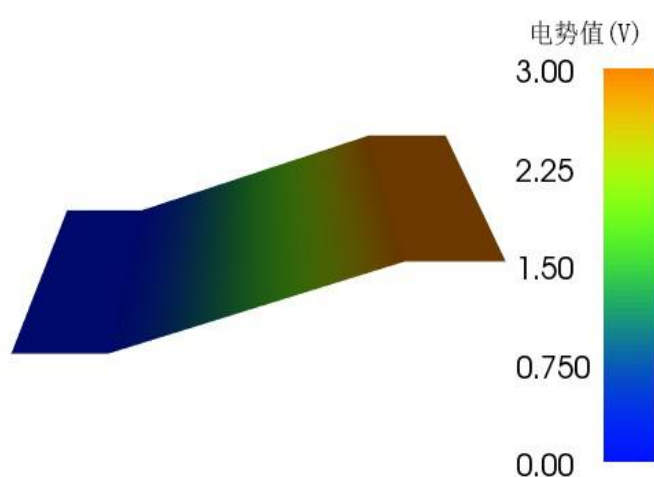


图 5-5 二维 Poisson 方程的电势分布

Fig.5-5 Potential distribution of the two-dimensional Poisson equation

在三维光电导天线上，本文通过使用开源 FEniCS 库对三维 Poisson 方程进行求解，计算结果如图 5-6 所示，色标值位于上方，不同颜色对应不同的电势值。在三维空间内，本文定义光电导天线的正极位于右边，负极位于左边，它们的电压值分别为 3V 和 0V。

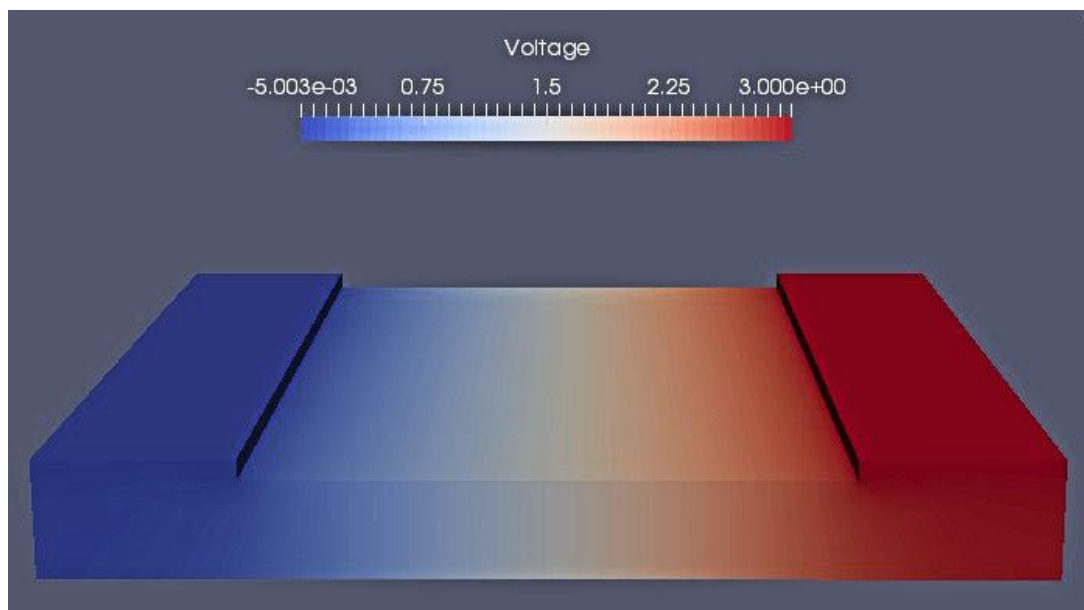


图 5-6 三维 Poisson 方程的电势分布

Fig.5-6 Potential distribution of three-dimensional Poisson equation

5.2 二、三维 Schrodinger 方程有限元求解

本文同样使用了基于有限元方法的 FEniCS 库对二、三维 Schrodinger 方程进行求解，二、三维 Schrodinger 方程分别如下所示：

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \Psi(x, y) + [E - V(x, y)] \Psi(x, y) = 0 \quad (5.3)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \Psi(x, y, z) + [E - V(x, y, z)] \Psi(x, y, z) = 0 \quad (5.4)$$

根据 FEniCS 库求解偏微分方程步骤和 Schrodinger 方程有限元通用求解, 本文先将二、三维 Schrodinger 方程转化为变分方程的形式, 将器件模型进行网格化, 调用 FEniCS 库函数对二、三维 Schrodinger 方程进行求解, 并将计算结果运用到量子器件 AlGaAs/GaAs 上。有限元方法求解 Schrodinger 方程的部分关键性代码如下所示:

```
def schrodingerEq(potential, meshArray, fermiEnergy):
    .....#省略部分代码
    #定义 Schrodinger 方程的变分形式
    a=(inner(hb2m_a*grad(u),grad(v))+Vpot*u*v)*dx(0)+(inner(hb2m_g*grad(u),
    grad(v)) + Vpot*u*v)*dx(1)
    m = u*v*dx(0) + u*v*dx(1)
    #创建矩阵对象
    A = dcl.PETScMatrix()
    M = dcl.PETScMatrix()
    eigensolver.solve()#求取出特征值
    eigensolver = dcl.SLEPcEigenSolver(A,M)#创建特征求解器
    while (i < eigensolver.get_number_converged() and r < 1.8):
        #求取出第 i 个特征值
        eigenvalues, c, eigenvectors, cx = eigensolver.get_eigenpair(i)
        i = i+1
    return [eigenvalues, eigenvectors,Vpot]#返回特征值和特征向量
```

5.2.1 器件模型

在二维、三维空间内, 本文设计的量子器件 AlGaAs/GaAs 为两层。如图 5-7 所示, 在二维空间内, 在 AlGaAs 材料中间嵌入了 GaAs 材料, GaAs 材料的长度为 16nm、宽度为 16nm。量子器件表示为一个正方形, 长度为 40nm、宽度为 40nm。如图 5-8

所示，在三维空间内，同样在 AlGaAs 材料中间嵌入了 GaAs 材料，GaAs 材料的长、宽、高分别为 16nm，16nm，16nm。类似于大盒子中装进了一个小盒子，量子器件表示为一个正方体，长度为 40nm、宽度为 40nm、高度为 40nm。

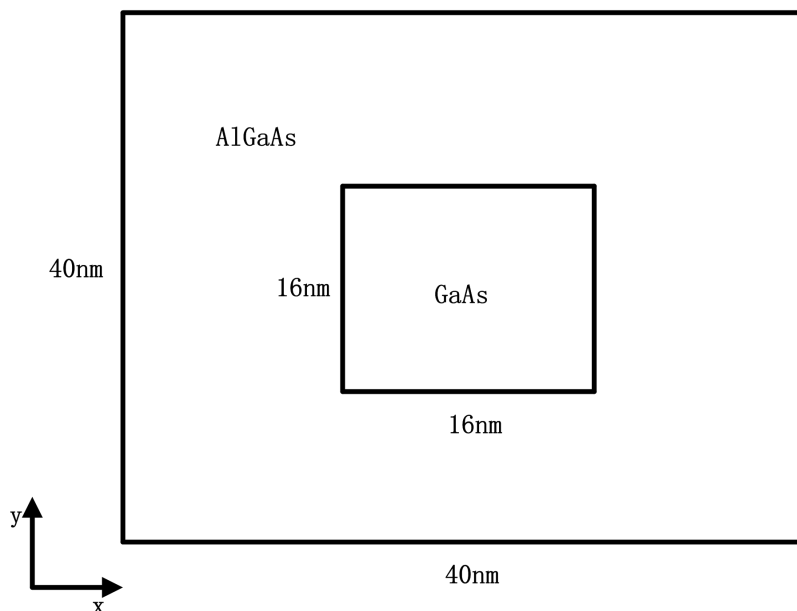


图 5-7 二维量子器件模型

Fig.5-7 Two-dimensional quantum device model

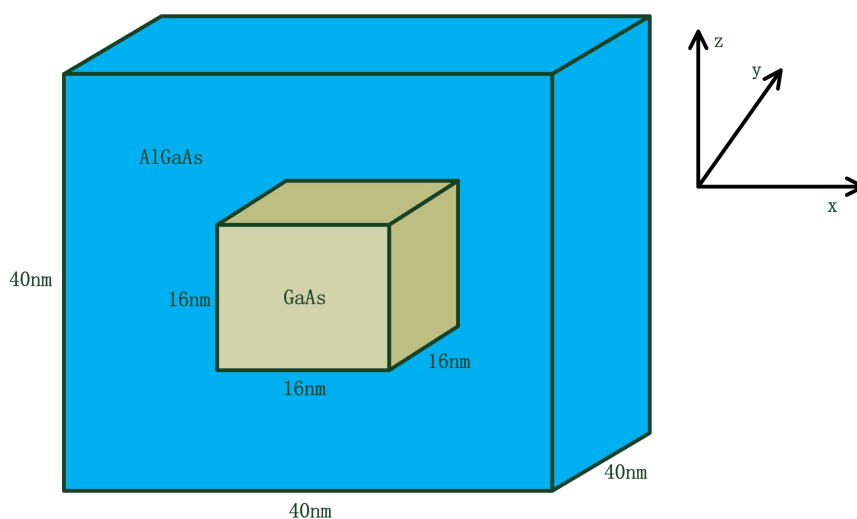


图 5-8 三维量子器件模型

Fig.5-8 Three-dimensional quantum device model

5.2.2 器件模型的有限元网格化

为了能够使用有限元法准确求解出二、三维 Schrodinger 方程，本文从多维的器

件模型建立成有限元模型，将二维、三维的量子器件 AlGaAs/GaAs 模型进行有限元网格剖分。本文对二维、三维器件进行了均匀网格剖分，二维网格均匀剖分如图 5-9 所示，应用有限元法将二维的 Schrodinger 方程求解量子器件的正方形区域模型划分为了 1800 个三角形单元。三维网格均匀剖分如图 5-10 所示，本文采用有限元法将三维 Schrodinger 方程求解量子器件的正方体区域模型划分为 5400 个四面体单元。由网格上的节点值，本文可以求得 Schrodinger 方程在求解区域每个节点上波函数的振幅。

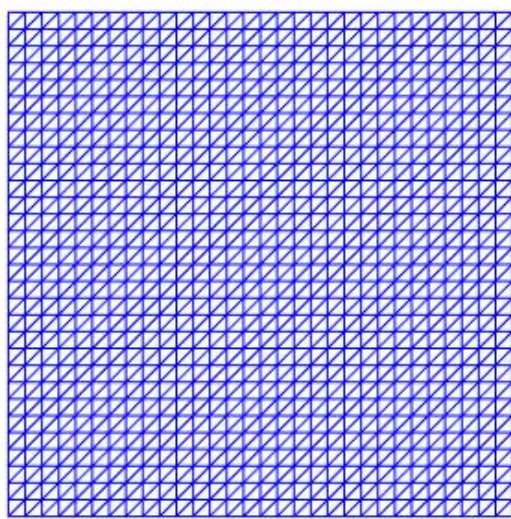


图 5-9 二维均匀网格剖分

Fig.5-9 Two-dimensional uniform meshing

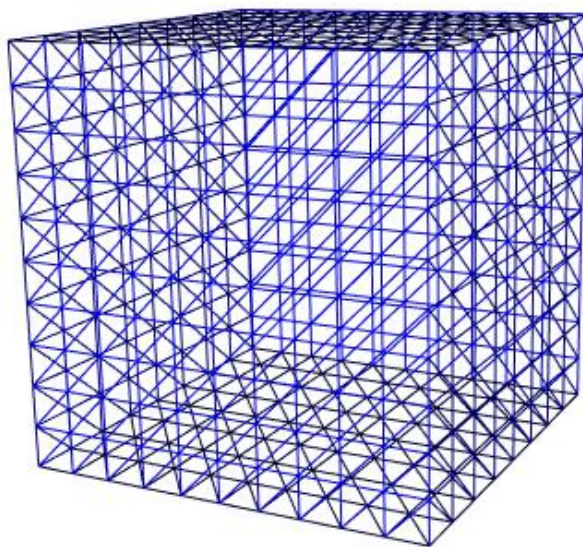


图 5-10 三维均匀网格剖分

Fig.5-10 Three-dimensional uniform meshing

5.2.3 计算结果及波函数

二维空间中两个自由度，是建立在平面上的坐标系。如图 5-7 所示，我们设计在 AlGaAs 材料中间嵌入了 GaAs 材料，量子器件只有长度和宽度，它的尺寸为 $40\text{nm} \times 40\text{nm}$ 。

由计算结果显示可知，图中不同颜色代表着不同物理值，右边为色标值。根据色标值可以知道左边图形中不同颜色所对应的计算结果值。二维空间内电子势能如图 5-11 所示，本文定义方势阱的深度为 $V=1.8\text{eV}$ ，电子由于受到阱壁上的斥力不能出去阱外，大部分只能在阱内自由运动。图 5-12、5-13、5-14 分别为第 1, 2, 3 个束缚态的波函数，用颜色的鲜艳程度来代表量子器件不同位置上波函数振幅大小的变化，由波函数结果图可知，粒子大部分出现在量子器件的中间部位。

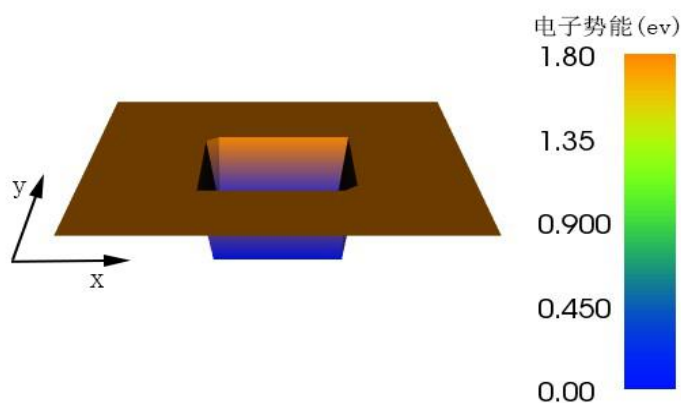


图 5-11 二维空间上的电子势能

Fig.5-11 Electron Potential Energy in Two-Dimensional Space

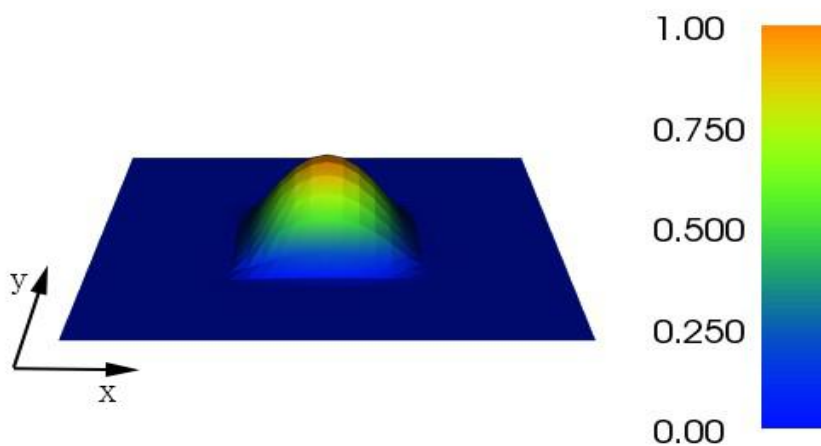
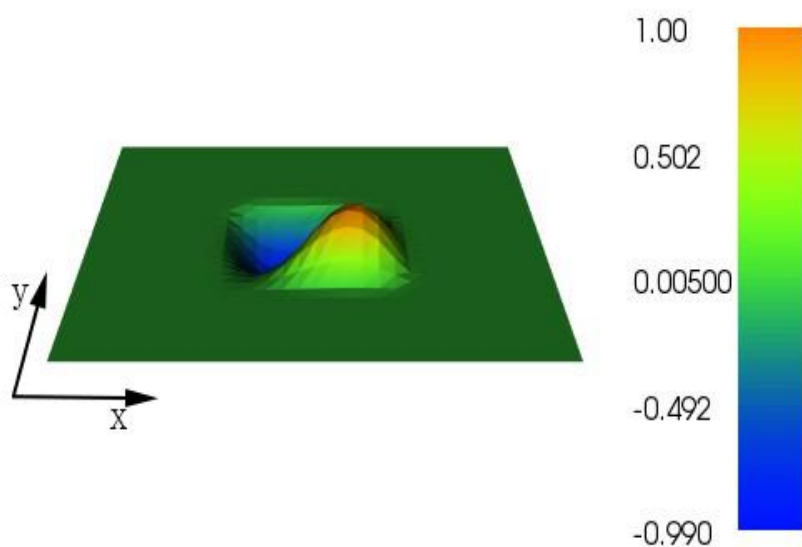
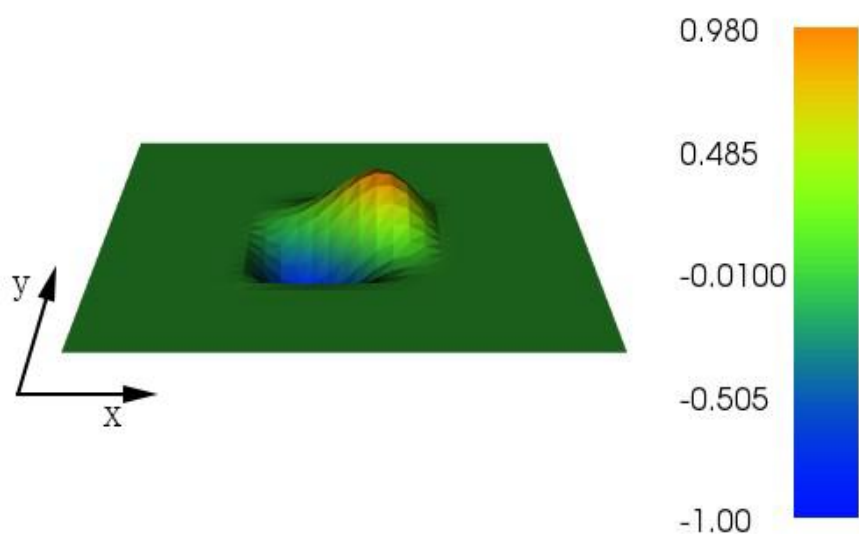


图 5-12 二维空间上 $k=1$ 的波函数

Fig.5-12 Wave function with $k=1$ in two-dimensional space

图 5-13 二维空间上 $k=2$ 的波函数Fig.5-13 Wave function with $k = 2$ in two-dimensional space图 5-14 二维空间上 $k=3$ 的波函数Fig.5-14 Wave function with $k = 3$ in two-dimensional space

三维空间内有三个自由度，是建立在立体空间上的坐标系。在空间直角坐标系上，如图 5-8 所示，我们设计在 AlGaAs 材料中间嵌入了 GaAs 材料，其中 x 轴表示为量子器件 AlGaAs/GaAs 的长度， y 轴表示为量子器件的宽度， z 轴表示为量子器件的高度。

在计算结果显示的图片中，我们可以观察出右侧色标值对应着不同的物理值，和二维显示图片相似，左侧的图形呈现出了不同的颜色。我们可以通过分辨不同的

颜色或者颜色的深浅来识别量子器件不同位置上物理值。在三维空间内，由于 GaAs 材料和量子阱定义在 AlGaAs 材料中间，为了能够更好分析波函数，本文令 $y=0$ ，截取出了 xz 轴上的剖面图。图 5-15 为三维空间上电子势能的剖面图，由图我们看出阱外的势能为 1.8ev，阱内的势能为 0ev。图 5-16、5-17、5-18 分别为不同束缚态下波函数的剖面图。这三张图右边色标值中不同颜色代表着波函数不同的振幅，在三维空间中某点波函数的强度正比于在这点找到粒子的几率，从而我们可以推断出粒子在量子器件 AlGaAs/GaAs 某位置出现的概率，由波函数剖分结果图可知，器件中间的波函数的强度明显要比四周的高，由此可推断出粒子大部分存活于量子器件的中间部位。

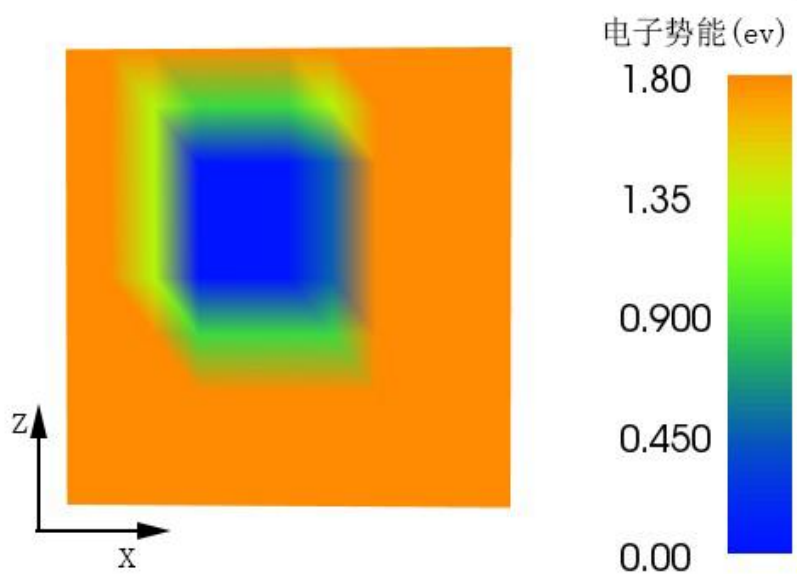


图 5-15 三维空间上的电子势能

Fig.5-15 Electron potential energy in three-dimensional space

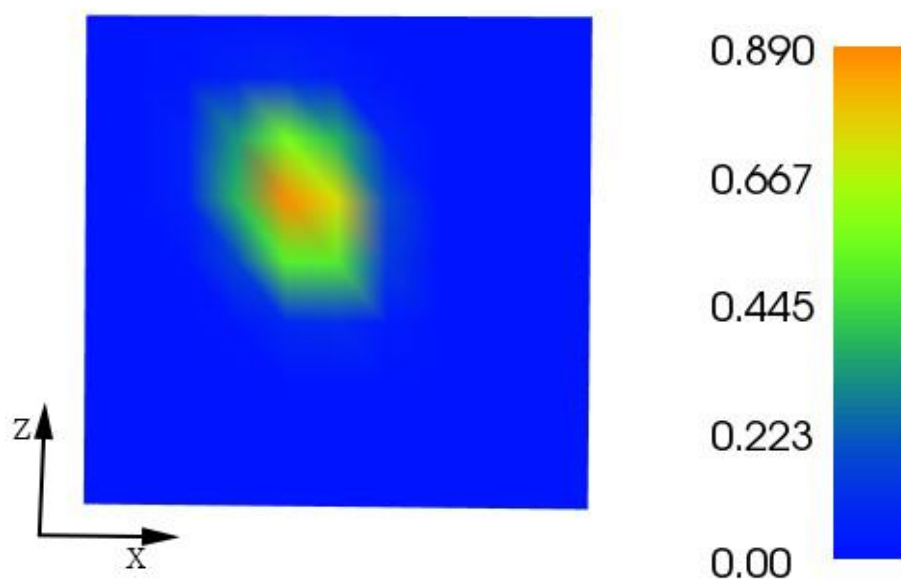


图 5-16 三维空间上 $k=1$ 的波函数

Fig.5-16 Wave function with $k=1$ in three-dimensional space

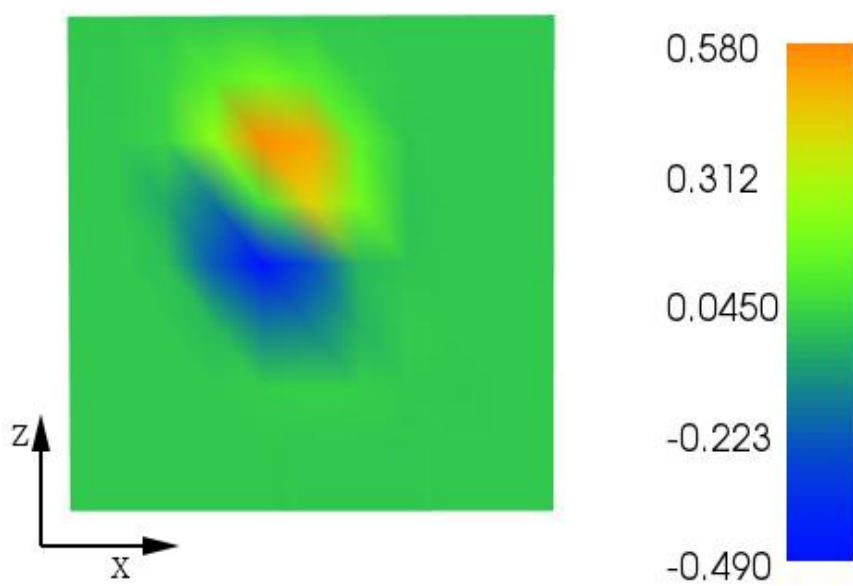
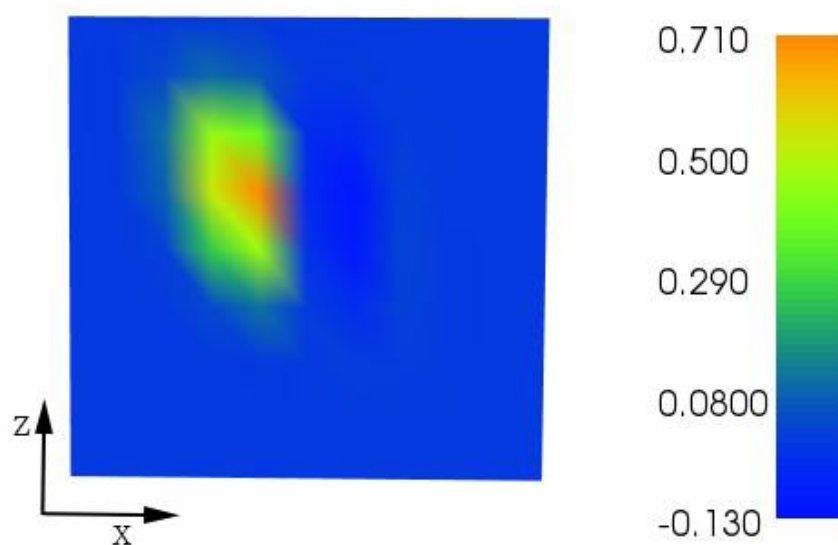


图 5-17 三维空间上 $k=2$ 的波函数

Fig.5-17 Wave function with $k=2$ in three-dimensional space

图 5-18 三维空间上 $k=3$ 的波函数Fig.5-18 Wave function with $k=3$ in three-dimensional space

5.3 本章小结

本章主要介绍了使用基于有限元 FEniCS 库分别对二、三维 Poisson 方程和 Schrodinger 方程进行有限元求解，分别给出了求解二、三维 Poisson 方程和 Schrodinger 方程的具体思路和步骤。以光电导天线和量子器件 AlGaAs/GaAs 作为研究对象，将二、三维 Poisson 方程的数值计算运用到光电导天线上，分析得出了光电导天线的电势分布。将二、三维 Schrodinger 方程的计算结果运用到 AlGaAs/GaAs 量子阱器件上，绘制出了电子势能和量子系统中的波函数。

总结与展望

总结

随着半导体技术的快速发展，半导体量子器件的原型不断被设计并实现。现代量子器件的尺寸已经达到了几百纳米的级别，当量子器件的大小处于这个范围内，器件内的电子或者空穴在一个或者多个方向上的运动将被限制在一个非常小的空间内，因此电子的运动状态只能用量子力学来描述，这些量子效应对于研究器件的性能起到不可或缺的作用。本文提出了求解多维 Poisson-Schrodinger 方程来分析量子器件的物理特性。现阶段有很多计算方法可以求解偏微分方程，它们各有特点，分别适用于各种不同的实际求解问题。其中运用有限元方法在计算电磁学领域内最为有效和方便。针对有限元方法能够适用于复杂的边界条件和任意几何形状的求解，这使得采用有限元方法求解 Poisson-Schrodinger 方程成为非常重要的课题。本文通过使用基于有限元方法的 FEniCS 开源库，先分析并推导出 Poisson 方程和 Schrodinger 方程的变分方程。再根据实际的求解问题，定义好网格和边界条件，并在该网格上定义好函数空间。在此基础上，通过一种迭代的方法，求解出了一维 Poisson-Schrodinger 方程的自洽解，将计算结果运用到量子器件 AlGaAs/GaAs 和 AlGaIn/GaN，展示了量子器件 AlGaAs/GaAs 的电子密度和量子系统中的波函数，并给出了 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结和 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ 双异质结的能量导带图。对二、三维 Poisson 方程进行有限元求解，将数值计算结果运用于光电导天线上，展示了光电导天线模型的电势分布。对二维、三维 Schrodinger 方程进行有限元求解，将计算结果应用于 AlGaAs/GaAs 量子阱器件，并绘制出了器件的波函数和电子势能。

展望

本文通过 Python 编程设计出了多维 Poisson-Schrodinger 方程求解器，理论上来说，它能够适用于多种新型的量子器件。针对各种不规则的几何形状和复杂的边界条件求解问题，有限元方法也可以简单轻松地化解，这充分体现了有限元方法的灵活性和高效性。但是由于时间有限，本次研究仍然存在很多不足之处。

(1) 随着日益复杂的几何形状模型和更加复杂的边界条件求解问题，特别是对于三维域内，量子器件的厚度越大，在每个有限元单位上需要用到的节点数就会越多，每个节点上都会对应着一个节点数据，这导致了模拟计算量的增加，计算机的内存较大，这样的计算效率并不高。针对多维空间内复杂几何形状的模型，有必要对如何提高有限元求解的有效性进行更进一步的研究。

(2) 从提高有限元方法的精确度入手，虽然有限元方法求解偏微分方程具有较高的精确性，但是仍然存在一定的计算误差，进一步减少计算误差这将是一个长期的研究内容。

(3) 将量子器件 AlGaAs/GaAs 重新设计为高电子迁移率晶体管 (HEMT) 模型，添加源极，栅极，漏极到量子器件上，从而分析 AlGaAs/GaAs HEMT 量子模型的直流输出特性。

参考文献

- [1] 郑伟. 半导体量子电子和光电子器件分析[J]. 无线互联科技, 2017(14):65-66.
- [2] Al-Ameri T, Georgiev V P, Adamu-Lema F, et al. Influence of quantum confinement effects and device electrostatic driven performance in ultra-scaled SixGe1 - x nanowire transistors[C]// Joint International Eurosoi Workshop and International Conference on Ultimate Integration on Silicon. IEEE, 2016:234-237.
- [3] Dyakonova N, Faltermeier P, But D B, et al. Saturation of photoresponse to intense THz radiation in AlGa_N/Ga_N HEMT detector[J]. Journal of Applied Physics, 2016, 120(16):380-325.
- [4] Subramani N K, Nallatamby J C, Sahoo A K, et al. A physics based analytical model and numerical simulation for current-voltage characteristics of microwave power AlGa_N/Ga_N HEMT[C]// Microwave and Rf Conference. IEEE, 2017.
- [5] 曹刚. 半导体双量子点系统中的量子输运研究[D]. 中国科学技术大学, 2012.
- [6] Lenka T R, Dash G N, Panda A K. 2DEG transport characteristics by self-consistent subband calculations of Schrödinger and poisson equations in InAlN/Ga_N HEMT[C]// Nanotechnology Materials and Devices Conference. IEEE, 2014:124-127.
- [7] Scaldaferri S, Curatola G, Iannaccone G. Direct Solution of the Boltzmann Transport Equation and Poisson-Schrodinger Equation for Nanoscale MOSFETs[J]. IEEE Transactions on Electron Devices, 2007, 54(11):2901-2909.
- [8] Acharyya A, Chatterjee S, Das A, et al. Self-consistent solution of Schrödinger-Poisson equations in a reverse biased nano-scale p-n junction based on Si/Si 0.04 Ge/Si 0.06 quantum well[J]. Journal of Computational Electronics, 2015, 14(1):180-191.
- [9] Ram-Mohan L R, Yoo K H, Moussa J. The Schrödinger-Poisson self-consistency in layered quantum semiconductor structures[J]. Journal of Applied Physics, 2004, 95(6):3081-3092.

- [10]Li H O, Cao G, Xiao M, et al. Fabrication and characterization of an undoped GaAs/AlGaAs quantum dot device[J]. Journal of Applied Physics, 2014, 116(17):174504-174504-5.
- [11]刘易德. 双势垒抛物量子阱阱宽对电子磁隧穿的影响[D]. 华中科技大学, 2008.
- [12]李丁元. 新型 GaAs/AlGaAs 量子阱红外探测器电子输运特性分析[D]. 北京工业大学, 2010.
- [13]胡长城, 叶慧琪, 王刚,等. GaAs/AlGaAs 多量子阱中载流子动力学的实验研究[J]. 物理学报, 2011, 60(1):691-694.
- [14]吕元杰. AlGaIn-GaN 异质结材料与器件的特性参数研究[D]. 山东大学, 2012.
- [15]胡小英, 刘卫国, 陈智利. MOVCD 生长 GaAs/AlGaAs 量子阱红外探测器的暗电流特性[J]. 半导体光电, 2012, 33(6):809-812.
- [16]邱俊. 薛定谔方程的边界条件及其数值解法[D]. 云南财经大学, 2016.
- [17]Anderson C R. Efficient solution of the Schrodinger-Poisson equations in layered semiconductor devices[J]. Journal of Computational Physics, 2009, 228(13):4745-4756.
- [18]Gnani E, Reggiani S, Rudan M, et al. A new approach to the self-consistent solution of the Schrodinger-Poisson equations in nanowire MOSFETs[C]// Solid-State Device Research Conference, 2004. Essderc 2004. Proceeding of the, European. IEEE, 2004:177-180.
- [19]Kargar Z, Ruic D, Jungemann C. A self-consistent solution of the Poisson, Schrödinger and Boltzmann equations for GaAs devices by a deterministic solver[C]// International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices. IEEE, 2015:361-364.
- [20]高玉羊. 基于 MPI 的并行有限差分法对几类偏微分方程的数值求解[D]. 青岛科技大学, 2017.
- [21]王登岳, 张宏伟. 基于 Python 求解偏微分方程的有限差分法[J]. 计算机时代, 2016(11):14-16.
- [22]吴红利. 有限体积法实现变系数椭圆型方程数值解[J]. 江西科学, 2013, 31(3):314-316.
- [23]安乐. 打靶法在常微分方程边值问题中的一些应用[J]. 科技广场,

- 2011(5):247-249.
- [24]蒋建刚. 薛定谔和泊松方程有限元法求解[D]. 广东工业大学, 2014.
- [25]褚龙, 王燕, 余志平,等. AlGaIn/GaN 一维模型自洽求解和二维电子气特性研究[J]. 固体电子学研究进展, 2005, 25(2):172-176.
- [26]Mingardi A, Zhang W D, Brown E R. THz performance of 1550-nm-driven photoconductive switches made from GaAs:Er with ErAs quantum dots[C]// NAECON 2017 - IEEE National Aerospace and Electronics Conference. IEEE, 2017:332-334.
- [27]Al-Ameri T, Georgiev V P, Lema F A, et al. Performance of vertically stacked horizontal Si nanowires transistors: A 3D Monte Carlo/2D Poisson Schrodinger simulation study[C]// Nanotechnology Materials and Devices Conference. IEEE, 2016.
- [28]王乐乐. 若干偏微分方程的混合有限元方法研究[D]. 郑州大学, 2017.
- [29]刘深泉, 王彦博, 蒋祺. 数值计算软件 Overture 的结构和应用[J]. 河南科学, 2010, 28(12):1513-1516.
- [30]Otto A J, Lezar E, Marais N, et al. Rapid, High-Order Finite Element Modelling with FEniCS and SUCEM:FEM[J]. 2012.
- [31]Abert C, Exl L,Bruckner F,et al. magnum.fe: A micromagnetic finite-element simulation code based on FEniCS[J].Journal of Magnetism&Magnetic Materials,2013, 345(8):29-35.
- [32]Otto A J, Marais N, Lezar E, et al. Using the FEniCS Package for FEM Solutions in Electromagnetics[J]. IEEE Antennas & Propagation Magazine, 2012, 54(4):206-223.
- [33]盛秀兰. 二维 Poisson 方程 Dirichlet 边值问题差分格式[J]. 牡丹江大学学报, 2017, 26(4):132-135.
- [34]Hu H. Two-grid method for two-dimensional nonlinear Schrödinger equation by finite element method[J]. Numerical Methods for Partial Differential Equations, 2017.
- [35]Yoon G, Min C. Convergence Analysis of the Standard Central Finite Difference Method for Poisson Equation[M]. Plenum Press, 2016.
- [36]刘金存. 分数阶偏微分方程的几类有限元方法研究[D]. 内蒙古大学, 2016.

- [37]Zhao L, Liu H, Zhao F. Existence and concentration of solutions for the Schrödinger–Poisson equations with steep well potential[J]. Journal of Differential Equations, 2013, 255(1):1-23.
- [38]Xie J, Huang Q, Zhao F, et al. Block pulse functions for solving fractional Poisson type equations with Dirichlet and Neumann boundary conditions[J]. Boundary Value Problems, 2017, 2017(1):32.
- [39]Lin S, Yang W, Xiang C, et al. Broyden method for the self-consistent solution of Schrodinger and Poisson equations[C]// International Conference on Asic. IEEE, 2006:991-994.
- [40]张勇. 薛定谔-泊松方程组的数值计算和分析及其应用[D]. 清华大学, 2012.
- [41]Gardner G C, Fallahi S, Watson J D, et al. Modified MBE hardware and techniques and role of gallium purity for attainment of two dimensional electron gas mobility $>35 \times 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ in AlGaAs/GaAs quantum wells grown by MBE[J]. Journal of Crystal Growth, 2016, 441:71-77.
- [42]Jahangir S, Khosru Q D M. A numerical model for solving two dimensional Poisson-Schrödinger equation in depletion all around operation of the SOI four gate transistor[C]// Electron Devices and Solid-State Circuits, 2009. EDSSC 2009. IEEE International Conference of. IEEE, 2009:473-476.
- [43]Zhang L, He J, Chen Q, et al. A Nonlinear Poisson-Schrodinger Solver Under Cylindrical Coordinate for Quantum Effect in Nanowire MOSFET[J]. Journal of Computational & Theoretical Nanoscience, 2013, 10(1):73-77.
- [44]林蓉. 分析一维方势阱中存在束缚态的条件[J]. 吉林师范大学学报(自然科学版), 2015, 36(03):98-100
- [45]袁通全. 无限深方势阱中受击粒子的非线性现象研究[J]. 西南大学学报(自然科学版), 2015, 37(9):106-109.
- [46]Melrose D B, Mushtaq A. Plasma dispersion function for a Fermi–Dirac distribution[J]. Physics of Plasmas, 2010, 17(12):2763.
- [47]B.A, Mamedov. Analytical evaluation of the plasma dispersion function for a Fermi-Dirac distribution[J]. Chinese Physics B, 2012, 21(5):400-404.
- [48]马俊彩. 高电子迁移率 GaN 基双异质结材料与器件研究[D]. 西安电子科技大学,

2012.

- [49]Khandelwal S, Chauhan Y S, Fjeldly T A. Analytical Modeling of Surface-Potential and Intrinsic Charges in AlGa_N/Ga_N HEMT Devices[J]. IEEE Transactions on Electron Devices, 2012, 59(10):2856-2860.
- [50]张世伟, 齐利芳, 赵永林,等. GaAs/AlGaAs 量子阱红外探测器的量子阱参数设计 [J]. 半导体技术, 2015, 40(7):521-524.

攻读硕士学位期间发表的论文

- [1] Liu D, **Lin D**, Li Z, et al. Electron mobility in abrupt-interface and step-graded AlGaN/GaN Heterostructures[J]. Semiconductor Science & Technology, 2017,32.
- [2] Liu D, **Lin D**, Huang G, et al. Streaming transport of two dimensional electron gas in AlGaN/GaN/AlGaN double heterostructures[J]. Superlattices & Microstructures, 2017, 112.

学位论文独创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文是我个人在导师的指导下进行的研究工作及取得的研究成果。尽我所知，除了文中特别加以标注和致谢的地方外，论文中不包含其他人已经发表或撰写过的研究成果。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献均已在论文中作了明确的说明，并表示了谢意。本人依法享有和承担由此论文所产生的权利和责任。

论文作者签名：林栋华 日期：2018.6.1

学位论文版权使用授权声明

本学位论文作者完全了解学校有关保存、使用学位论文的规定，同意授权广东工业大学保留并向国家有关部门或机构送交该论文的印刷本和电子版本，允许该论文被查阅和借阅。同意授权广东工业大学可以将本学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印、扫描或数字化等其他复制手段保存和汇编本学位论文。保密论文在解密后遵守此规定。

论文作者签名：林栋华 日期：2018.6.1

指导教师签名：Zurong 日期：2018.6.1

致 谢

光阴似箭，三年的研究生生活即将结束了，回想起这三年的时光，心中感慨良多。在求学，求知的道路上，此时的我多了几分成熟与冷静。在研究生期间，我学会了很多知识，在未来的工作的道路，我会有更大的信心往下走。在这三年时光中，我遇到了许多良师益友，在此，我想感谢所有帮助过我的老师，同学，朋友们。

首先我要感谢我敬爱的导师刘东峰教授，感谢刘老师对我研究生三年学习生活中的指导。刘老师是一位品德高尚、学识渊博的科研工作者，他严谨的科学态度时刻地激励着我前进，他永远都是我学习的好榜样。在研究生三年期间，刘老师无论是在学习上还是生活上都给予了我很多指导和建议，在他的引导下，我学到了很多本科接触不到的知识。从论文选题上、研究课题上和撰写过程上，刘老师给予了我最全面的指导，我对他心中充满了感激之情。

感谢原来实验室的何家峰老师和程昱老师，还有感谢实验室的师弟师妹和师兄师姐们，无私交流自己的学识，在科学研究和工作上给予了我很多建议和指导，使得我能够解决了众多难题。感谢我的爸爸妈妈，感谢他们这么多年的养育之恩，每当我遇到困难时，爸妈永远是我依靠的港湾。感谢我的女朋友，谢谢你默默的陪伴和支持，有你真好。感谢我的同班同学们，因为有你们我的生活才过得精彩。

最后感谢在百忙之中抽出时间的评审老师们，谢谢你们！

林栋华

2018年4月于广州