



Symulacje transportu elektronowego w nanourządzeniach z użyciem pakietu KWANT

Paweł Wójcik

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie



Plan wykładu

1. Krótkie wprowadzenie do pakietu KWANT
2. Symulacje prostego transportu przez nanodrut z centrum rozpraszania
3. Bardziej skomplikowane kształty
4. Układy z wieloma podsieciami na węźle
5. Grafen

KWANT

Kwant – pakiet numeryczny do symulacji transportu elektronowego w układach nanoskopowych, napisany w języku Python. Fizycznie osadzony w metodzie ciasnego wiązania.

Świetna dokumentacja dostępna na stronie projektu.

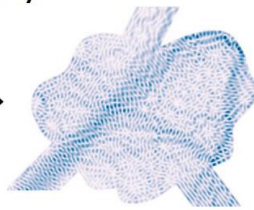
kwant

about blog install documentation community contribute cite

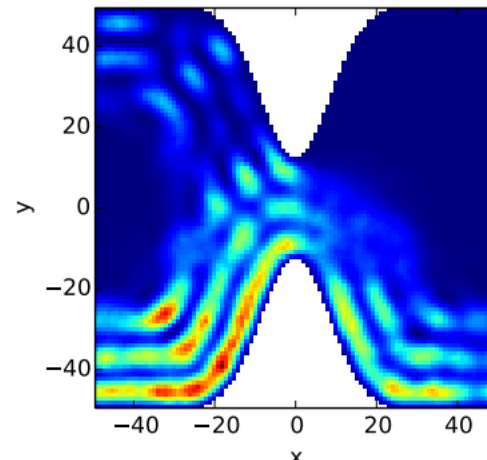
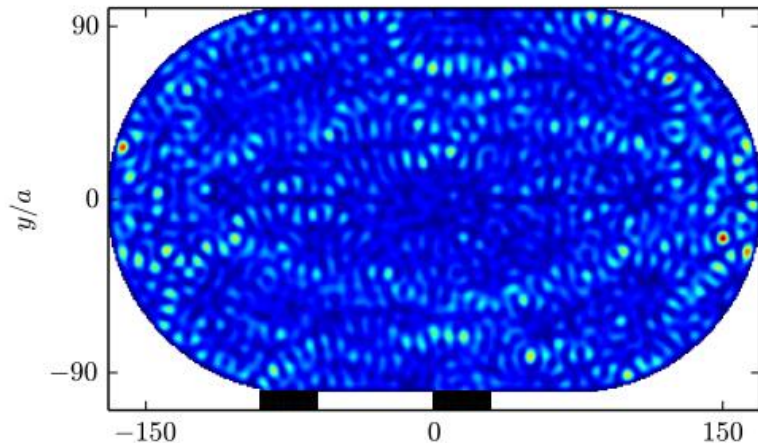
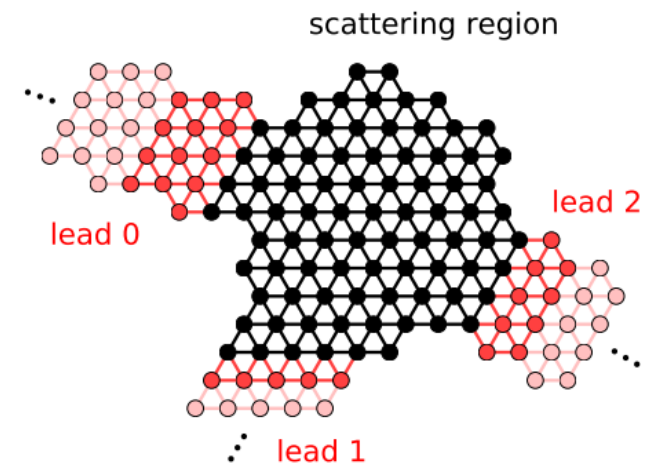
Quantum transport simulations made easy



```
import kwant
...
syst = make_system()
smatrix = kwant.smatrix(syst)
G = smatrix.transmission(1, 0)
```



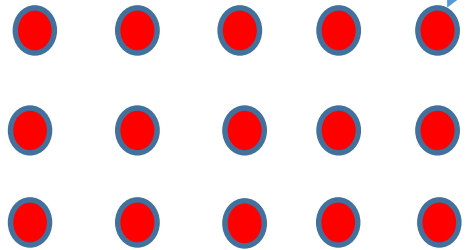
<https://kwant-project.org/doc/>



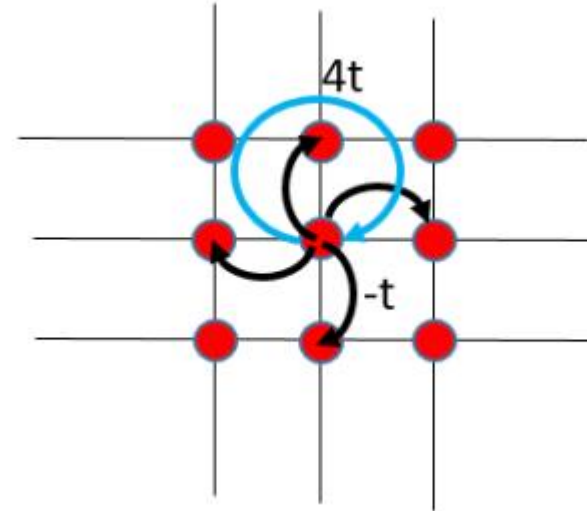
C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, X. Waintal,
Kwant: a software package for quantum transport, [New J. Phys. 16, 063065 \(2014\)](#).

KWANT - wprowadzenie

Sieć kwadratowa



Pojedynczy węzeł sieci kwadratowej, który może składać się z kilku orbitali

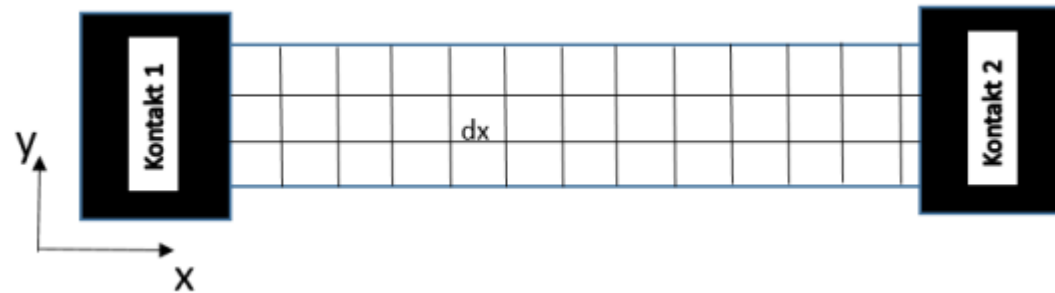


Definicja układu w KWANCIE niemal zawsze składa się z kilku etapów

1. Zdefiniowanie układu podstawowego
 - Definicja typu sieci
 - Definicja energii przeskoku na i między węzłowego (również międzyorbitalnego)
 - Uzupełnienie macierzy
2. Zdefiniowanie i dołączenie kontaktów
3. Obliczenie macierzy rozpraszania oraz współczynników transmisji, a z nich konduktancji (formuła Landauera)
4. Obliczenie funkcji falowych, DOS, gęstości prądu i innych

Transport przez nanodrut z centrum rozpraszania

Schemat układu



Równanie Schrödingera opisujące układ

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x, y) + V(x, y)\psi(x, y) = E\psi(x, y),$$

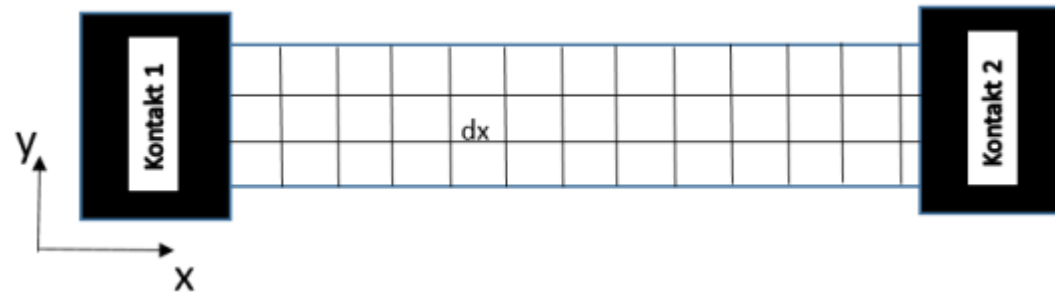
Dyskretyzacja $(x_i, y_j) \rightarrow (i, j)$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, y) = \frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{dx^2}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi(x, y) = \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{dy^2}$$

Transport przez nanodrut z centrum rozpraszania

Schemat układu



Równanie Schrödingera opisujące układ

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x, y) + V(x, y)\psi(x, y) = E\psi(x, y),$$

Dyskretyzacja $(x_i, y_j) \rightarrow (i, j)$

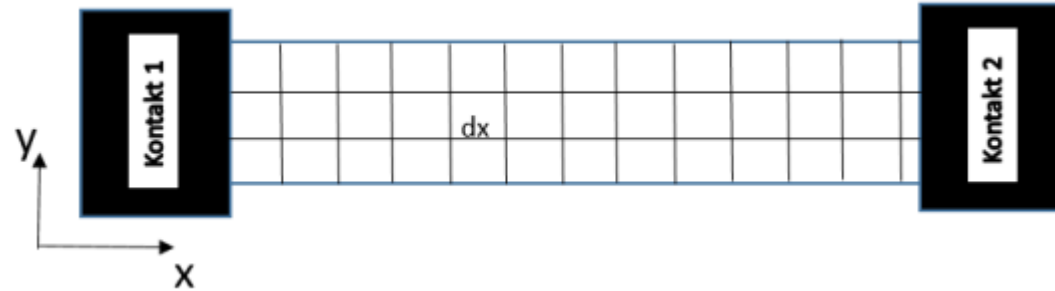
$$t(4\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j} - \psi_{i+1,j} - \psi_{i,j-1} - \psi_{i,j+1}) + V_{i,j}\psi_{i,j} = E\psi_{i,j},$$

gdzie

$$t = \frac{\hbar^2}{2m^* dx^2}.$$

Transport przez nanodrut z centrum rozpraszania

Schemat układu



Dyskretyzacja

$$t(4\langle\psi_{i,j}|\psi_{i,j}\rangle - \langle\psi_{i,j}|\psi_{i-1,j}\rangle - \langle\psi_{i,j}|\psi_{i+1,j}\rangle - \langle\psi_{i,j}|\psi_{i,j-1}\rangle - \langle\psi_{i,j}|\psi_{i,j+1}\rangle) + V_{i,j}\langle\psi_{i,j}|\psi_{i,j}\rangle = E\langle\psi_{i,j}|\psi_{i,j}\rangle,$$

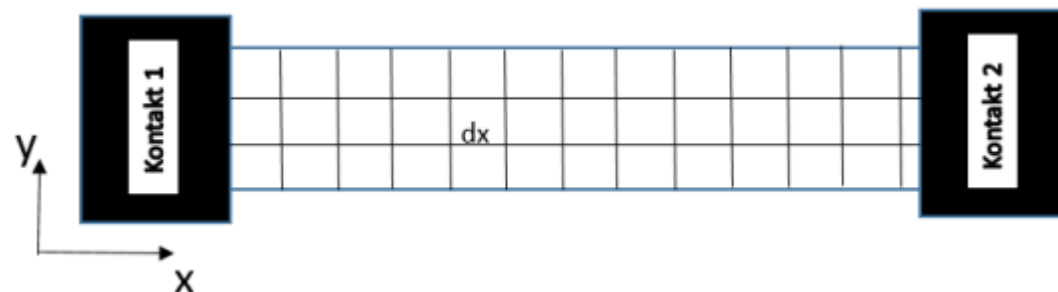
Jeśli równanie to zapiszemy dla każdego punktu sieci (i, j)

$$H = \left\langle \psi_{ij} \left| \begin{array}{cccccc} 4t & -t & \dots & -t & \dots & \dots \\ -t & 4t & -t & \dots & -t & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \dots & -t & \dots & -t & 4t & -t \\ \dots & \dots & -t & \dots & -t & 4t \end{array} \right| \psi_{ij} \right\rangle$$

W zasadzie musimy zdefiniować taką macierz i rozwiązać problem z odpowiednimi warunkami brzegowymi odpowiadającymi falom płaskim wchodzącym i wychodzącym z układu.

Transport przez nanodrut z centrum rozpraszania

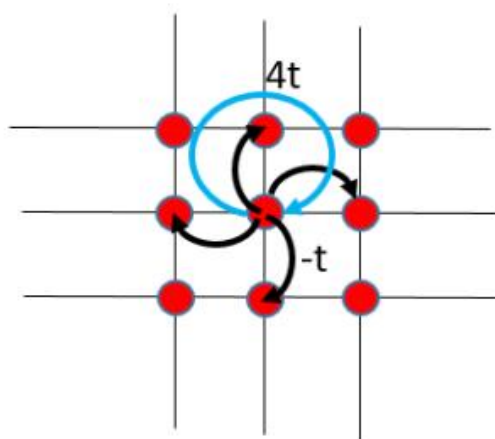
Schemat układu



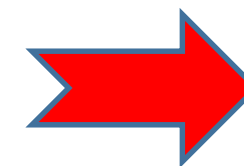
Dyskretyzacja

$$t(4\langle\psi_{i,j}|\psi_{i,j}\rangle - \langle\psi_{i,j}|\psi_{i-1,j}\rangle - \langle\psi_{i,j}|\psi_{i+1,j}\rangle - \langle\psi_{i,j}|\psi_{i,j-1}\rangle - \langle\psi_{i,j}|\psi_{i,j+1}\rangle) + V_{i,j}\langle\psi_{i,j}|\psi_{i,j}\rangle = E\langle\psi_{i,j}|\psi_{i,j}\rangle,$$

Jeśli równanie to zapiszemy dla każdego punktu sieci (i, j)



Przejdźmy do programu

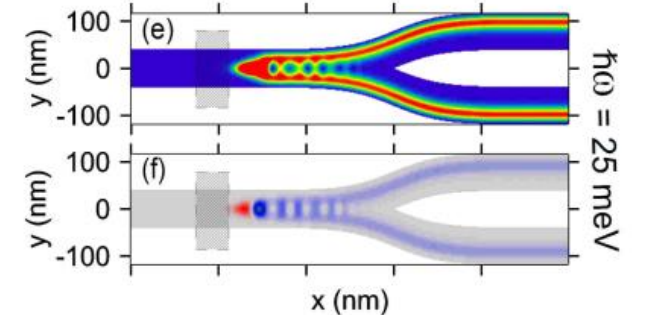
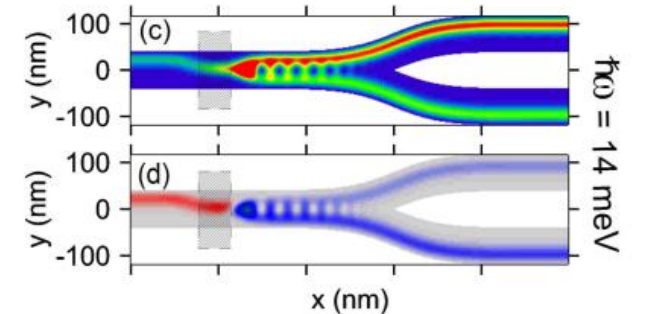
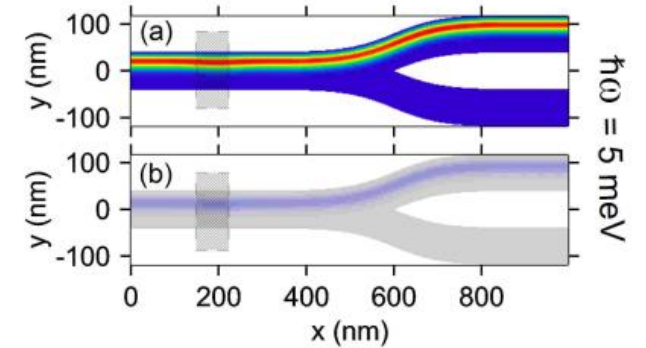
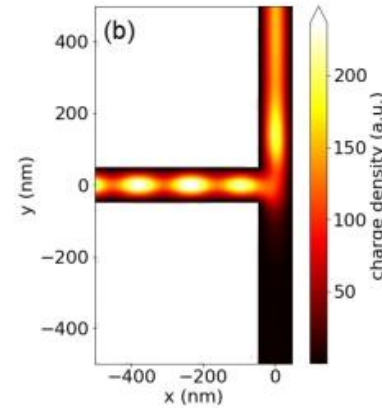
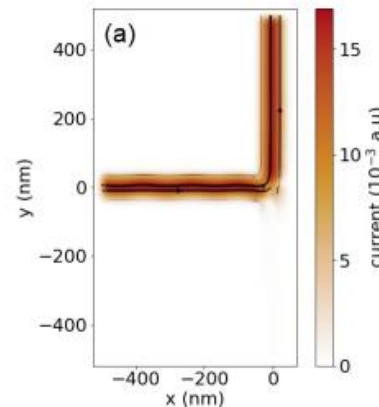
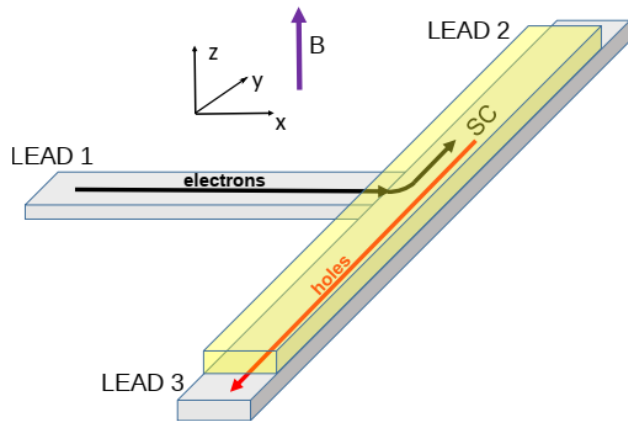


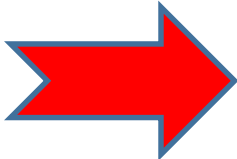
[example1.ipynb](#)

Czy można zdefiniować inny kształt urządzenia ?

Funkcja `lat.shape()` – pozwala zdefiniować dowolny kształt nanourządzenia.

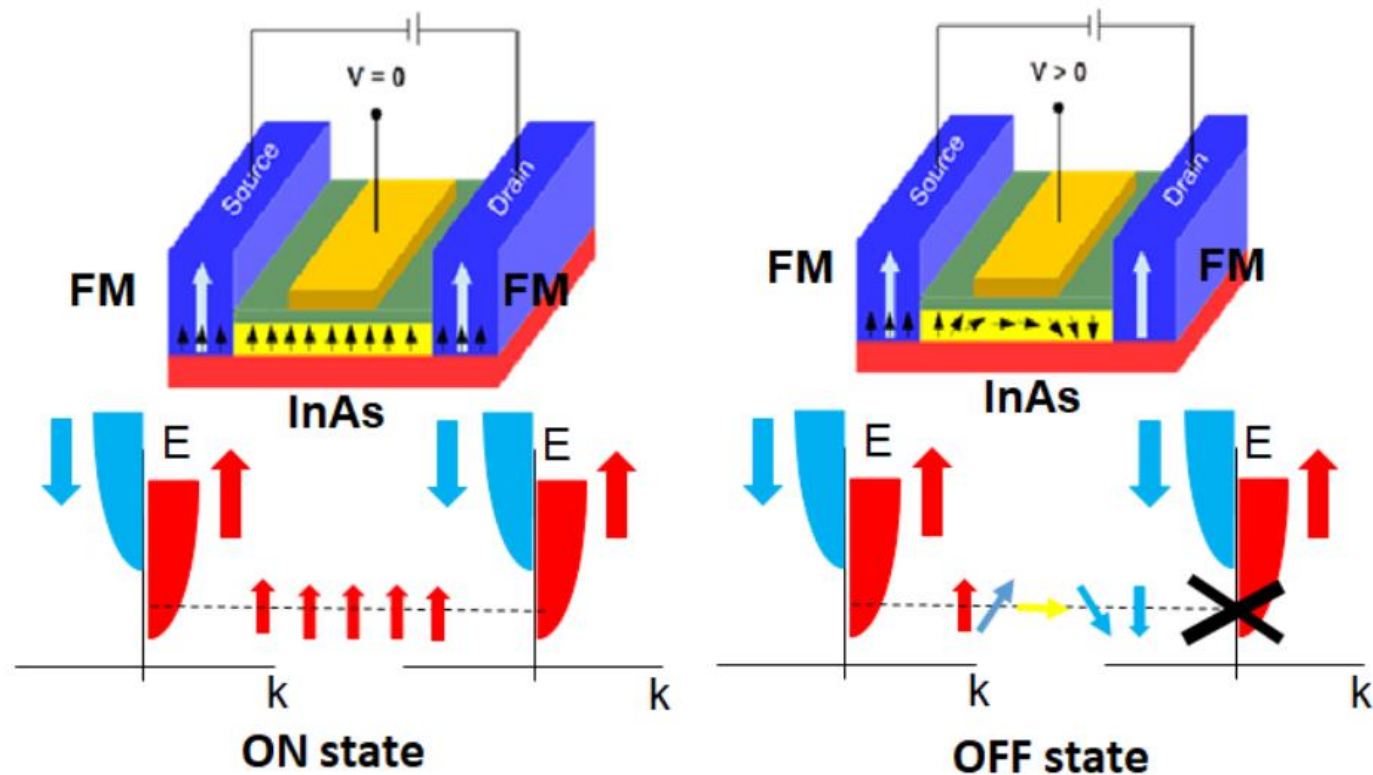
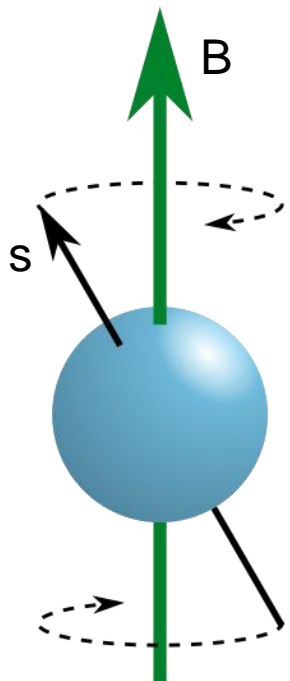
```
sys = kwant.Builder()
lat = kwant.lattice.square(dx, norbs=1)
sys[(lat.shape(ring, (0, R1)))] = onsite
```




example2.ipynb

Układ z większą liczbą orbitali na węźle

Przykład – tranzystor spinowy, transport zależny od spinu

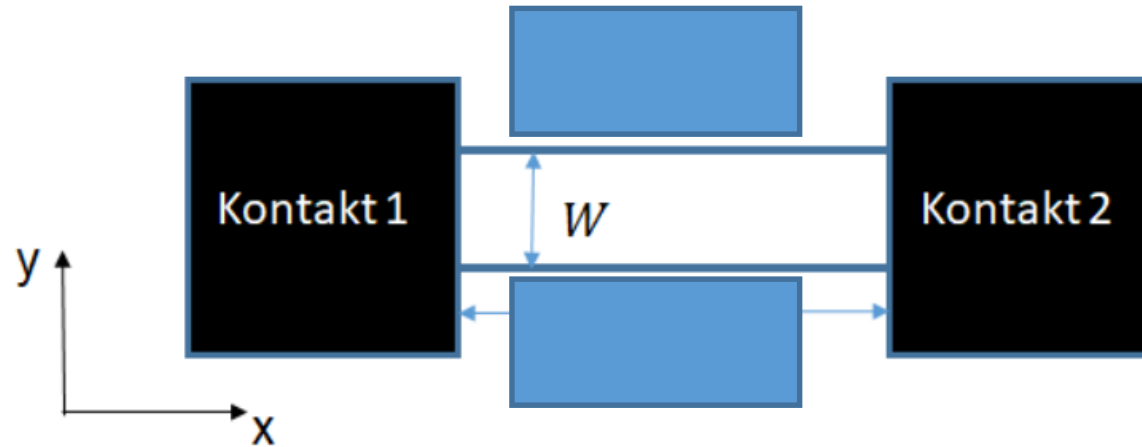


Oddziaływanie spin-orbita

$$H_{RSO} = \alpha(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y) = (\alpha k_y, -\alpha k_x) \cdot (\sigma_x, \sigma_y).$$

Układ z większą liczbą orbitali na węźle

Przykład – tranzystor spinowy, transport zależny od spinu



Równanie Pauliego

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + \frac{1}{2} g \mu_B \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \alpha (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) \right) \Psi(x, y) = E \Psi(x, y),$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Układ z większą liczbą orbitali na węźle

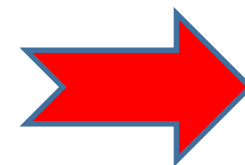
Równanie Pauliego

$$\begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + \frac{1}{2}g\mu_B B_z & \frac{1}{2}g\mu_B(B_x - iB_y) + \alpha(k_y + ik_x) \\ \frac{1}{2}g\mu_B(B_x + iB_y) + \alpha(k_y - ik_x) & -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - \frac{1}{2}g\mu_B B_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi^\uparrow(x, y) \\ \psi^\downarrow(x, y) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi^\uparrow(x, y) \\ \psi^\downarrow(x, y) \end{pmatrix}$$

dyskretyzacja

$$t\mathbb{I}_{2\times 2}(4\Psi_{i,j} - \Psi_{i+1,j} - \Psi_{i-1,j} - \Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j-1}) + \frac{1}{2}g\mu_B(B_x\sigma_x + B_y\sigma_y + B_z\sigma_z)\Psi_{i,j} \\ + it_{SO}\sigma_y(\Psi_{i+1,j} - \Psi_{i-1,j}) - it_{SO}\sigma_x(\Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j-1}) = E\Psi_{i,j}$$

gdzie $t = \frac{\hbar^2}{2m^*\Delta x^2}$, $t_{SO} = \frac{\alpha}{2\Delta x}$, $\Psi_{i,j} = \Psi(x_i, y_j) = (\psi^\uparrow(x_i, y_j), \psi^\downarrow(x_i, y_j))^T$

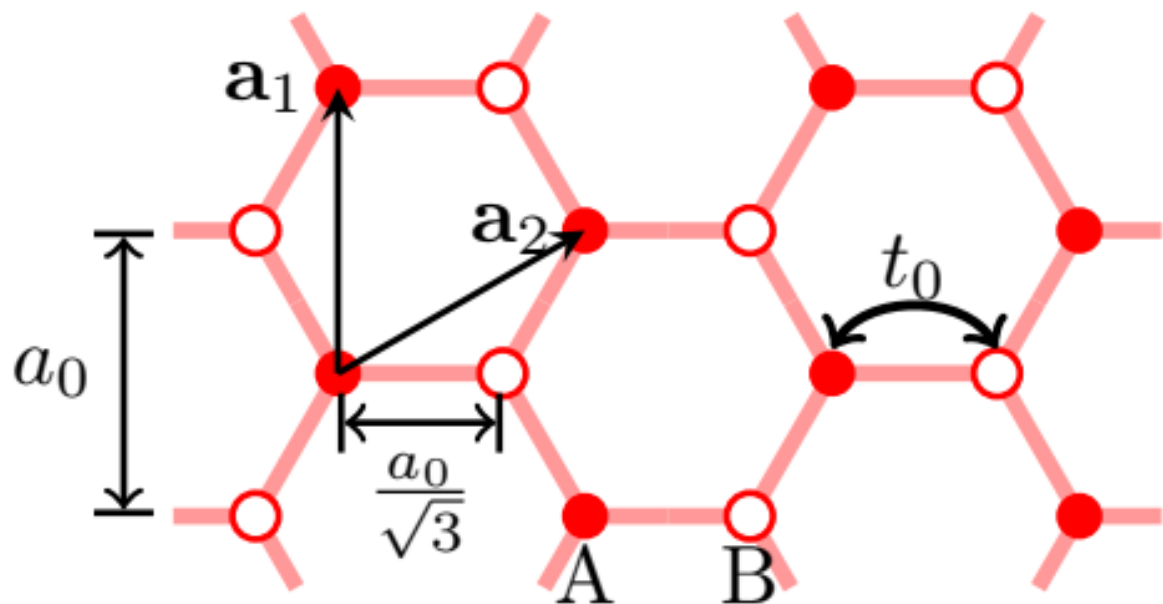


[example3.ipynb](#)

Forma macierzowa

$$t\mathbb{I}_{2\times 2}(4\langle\Psi_{i,j}|\Psi_{i,j}\rangle - \langle\Psi_{i,j}|\Psi_{i+1,j}\rangle - \langle\Psi_{i,j}|\Psi_{i-1,j}\rangle - \langle\Psi_{i,j}|\Psi_{i,j+1}\rangle - \langle\Psi_{i,j}|\Psi_{i,j-1}\rangle) + \frac{1}{2}\mu_B g(B_x\sigma_x + B_y\sigma_y + B_z\sigma_z)\langle\Psi_{i,j}|\Psi_{i,j}\rangle \\ + it_{SO}\sigma_y(\langle\Psi_{i,j}|\Psi_{i+1,j}\rangle - \langle\Psi_{i,j}|\Psi_{i-1,j}\rangle) - it_{SO}\sigma_x(\langle\Psi_{i,j}|\Psi_{i,j+1}\rangle - \langle\Psi_{i,j}|\Psi_{i,j-1}\rangle) = E\langle\Psi_{i,j}|\Psi_{i,j}\rangle,$$

Inne typy sieci - grafen

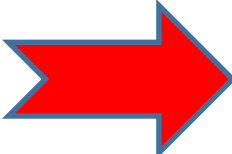


Hamiltonian TBA

$$H_{i,j} = \begin{cases} V(\mathbf{r}_i), & i = j, \\ t, & |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| = a_0/\sqrt{3}, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Wektory sieci

$$\mathbf{a}_1 = (0, a_0), \quad \mathbf{a}_2 = a_0(\cos(30^\circ), \sin(30^\circ))$$


example4.ipynb

Dziękuję za uwagę !!!