

---

# **Opis transportu elektronowego**

**Michał Sliwinski**

**14 cze 2021**



---

## Contents:

---

<b>1</b>	<b>Opis Transportu Elektronowego</b>	<b>1</b>
1.1	generator_hamiltonian module . . . . .	1
1.2	generator_struktura_benzenu module . . . . .	2
1.3	transmisja module . . . . .	2
<b>2</b>	<b>Indices and tables</b>	<b>3</b>
	<b>Indeks modułów Pythona</b>	<b>5</b>
	<b>Indeks</b>	<b>7</b>



## 1.1 generator\_hamiltonian module

`generator_hamiltonian.diagAndLowerTriangle()`

Uzupełnia dolny trójkąt i przekątną hamiltonianu ribbonu.

`generator_hamiltonian.distSites(n, m)`

Oblicza odległość między danymi dwoma atomami i wyraża ją w nanometrach.

### Parametry

- **n** – (int) Numer pierwszego rozważanego atomu.
- **m** – (int) Numer drugiego rozważanego atomu.

**Zwraca** (double) Odległość w nanometrach między danymi dwoma atomami.

`generator_hamiltonian.plotSaveStructure()`

Zapisuje wizualizację struktury do pliku w postaci wykresu XY.

`generator_hamiltonian.printAppHD()`

Wyświetla w konsoli hamiltonian ribbonu z przybliżonymi wartościami.

`generator_hamiltonian.saveHDtoFile()`

Zapisuje hamiltonian ribbonu do pliku.

`generator_hamiltonian.upperTriangle()`

Wypełnia górny trójkąt hamiltonianu ribbonu.

## 1.2 generator\_struktura\_benzenu module

`generator_struktura_benzenu.zapiszPozycje (i, ifNextLine)`

Generuje pozycje kolejnych atomów w łańcuchu oligofenylowym o zadanej długości.

### Parametry

- **i** – (int) Numer obecnie rozpatrywanego oczka w łańcuchu benzenowym.
- **ifNextLine** – (bool) Informacja o potrzebie przejścia do nowej linii.

## 1.3 transmisja module

`transmisja.argNowa4 (new_h0)`

Generuje macierze h0, h1l (związaną z doczepieniem lewej elektrody) i h1r (związaną z doczepieniem prawej elektrody) dla struktury oligoacenu o szerokości 2,48 anstrema.

**Parametry** **new\_h0** – (array) Macierz h0 pobrana z pliku. W tej funkcji nadpisuje się ją i zwraca.

**Zwraca** (array, array, array) Macierze h0, h1l i h1r dla rozważanej struktury.

`transmisja.argNowa6 (new_h0, sysarg3)`

Generuje macierze h0, h1r (związaną z doczepieniem prawej elektrody) oraz ewentualnie h1l (związaną z doczepieniem lewej elektrody) dla struktury oligoacenu o szerokości 4,92 anstrema.

### Parametry

- **new\_h0** – (array) Macierz h0 pobrana z pliku. W tej funkcji nadpisuje się ją i zwraca.
- **sysarg3** – (int) Wartość logiczna w formie liczby, określająca, czy elektrody prawa i lewa się różnią od siebie.

**Zwraca** (array, array, array/int) Macierze h0, h1l i h1r dla rozważanej struktury.

---

### Indices and tables

---

- `genindex`
- `modindex`
- `search`





### g

`generator_hamiltonian`, [1](#)

`generator_struktura_benzenu`, [2](#)

### t

`transmisja`, [2](#)



### A

`argNowa4()` (w module *transmisja*), 2  
`argNowa6()` (w module *transmisja*), 2

### D

`diagAndLowerTriangle()` (w module *generator\_hamiltonian*), 1  
`distSites()` (w module *generator\_hamiltonian*), 1

### G

*generator\_hamiltonian*  
moduł, 1  
*generator\_struktura\_benzenu*  
moduł, 2

### M

moduł  
    *generator\_hamiltonian*, 1  
    *generator\_struktura\_benzenu*, 2  
    *transmisja*, 2

### P

`plotSaveStructure()` (w module *generator\_hamiltonian*), 1  
`printAppHD()` (w module *generator\_hamiltonian*), 1

### S

`saveHDToFile()` (w module *generator\_hamiltonian*), 1

### T

*transmisja*  
moduł, 2

### U

`upperTriangle()` (w module *generator\_hamiltonian*), 1

### Z

`zapiszPozycje()` (w module *generator\_struktura\_benzenu*), 2