

Pakiet KWANT - symulacje transportu elektronowego w polu magnetycznym

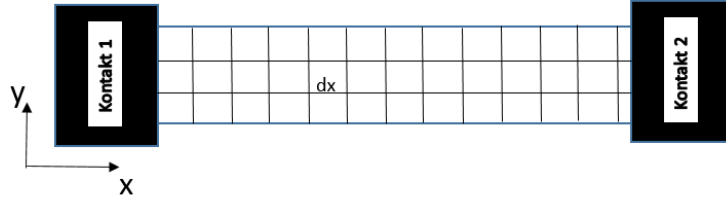
P. Wójcik

3 kwietnia 2022; ostatnia aktualizacja 9 maja 2023

1 Wstęp

Na laboratorium poznamy pakiet KWANT do symulacji transportu elektronowego w urządzeniach nanoskopowych, oparty na metodzie ciasnego wiązania. Pełna dokumentacja pakietu KWANT wraz z wieloma przykładami znajduje się na stronie pakietu pod adresem <https://kwant-project.org/doc/dev/>.

Zanim przejdziemy do zadań dzisiejszego laboratorium dokonajmy krótkiej analizy prostego przykładu nanodrutu o szerokości $2W$ i długości L - patrz rys. 1.



Rysunek 1: Schemat nanodrutu.

Obliczenia numeryczne wykonane zostaną na kwadratowej siatce o szerokości dx . Równanie opisujące transport elektronów w tym układzie to równanie Schrödingera

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x, y) + V(x, y)\psi(x, y) = E\psi(x, y), \quad (1)$$

które po dyskretyzacji na siatce $(x_i, y_j) \rightarrow (i, j)$, przyjmuje postać

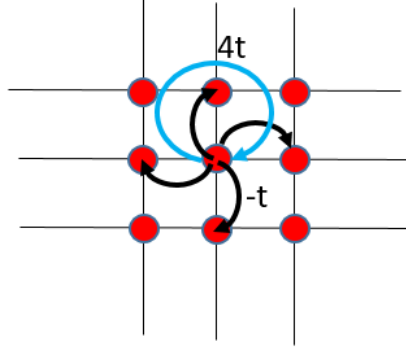
$$t(4\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j} - \psi_{i+1,j} - \psi_{i,j-1} - \psi_{i,j+1}) + V_{i,j}\psi_{i,j} = E\psi_{i,j}, \quad (2)$$

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

Jak pokazano na poprzednich laboratoriach równanie to należy rozwiązać zakładając odpowiednie warunki brzegowe w postaci fal płaskich wchodzących i wychodzących z układu, co prowadzi do tzn. macierzy rozpraszania. Pakiet KWANT pozwala nam uzupełnić macierz główną oraz wyznaczyć macierz rozpraszania wraz ze współczynnikami transmisji w bardzo łatwy i efektywny sposób. W tym celu należy nasze równanie dyskretne zapisać w postaci macierzowej, zakładając jak w modelu TBA, że ψ_{ij} odpowiada orbitalowi zlokalizowanemu na węźle (i, j) . Wówczas

$$t(4|\psi_{i,j}\rangle\langle\psi_{i,j}| - |\psi_{i-1,j}\rangle\langle\psi_{i,j}| - |\psi_{i+1,j}\rangle\langle\psi_{i,j}| - |\psi_{i,j-1}\rangle\langle\psi_{i,j}| - |\psi_{i,j+1}\rangle\langle\psi_{i,j}|) + V_{i,j}|\psi_{i,j}\rangle\langle\psi_{i,j}| = E|\psi_{i,j}\rangle\langle\psi_{i,j}|, \quad (3)$$

ma formę macierzy, której poszczególne elementy odpowiadają energii, jakiej należy dodać do układu by zrealizować przeskok pomiędzy sąsiednimi węzłami oraz przeskok do tego samego węzła - patrz rys. 2. W ramach przykładu proszę wraz z prowadzącym przeanalizować skrypt nanowire.ipynb.



Rysunek 2: Energie nawęzłowe i międzywęzłowe.

2 Rozpraszanie na potencjale

Korzystając z przykładu w pliku nanowire.ipynb proszę do układu wprowadzić potencjał rozpraszania w postaci gaussianu scentralizowanego w środku nanodrutu

$$V(x, y) = V_0 \exp \left(\frac{-(x - x_0)^2 - (y - y_0)^2}{\sigma^2} \right), \quad (4)$$

zakładając $V_0 = 50$ meV oraz $\sigma = 10$ nm. Następnie policzyć konduktancje w funkcji energii oraz wyznaczyć funkcje falowe i gęstość prądu w układzie dla energii padającego elektronu $E = 30, 50, 100$ meV.

3 Kwantowy efekt Halla

Wprowadźmy do naszego układu pole magnetyczne skierowane prostopadle, tzn. $B = (0, 0, B_z)$. Wówczas, klasycznie, na elektron działa siła Lorentza prostopadła do wektora prędkości elektronu oraz pola magnetycznego, zakrzywiając tor ruchu elektronu. Z punktu widzenia elektrodynamiki efekt orbitalny pochodzący od pola magnetycznego możemy wprowadzić zastępując pęd tak zwanym pędem kanonicznym

$$p \rightarrow \Pi = p - q\mathbf{A},$$

gdzie \mathbf{A} jest potencjałem wektorowym takim, że

$$\text{rot}(\mathbf{A}) = \mathbf{B}.$$

Wybór potencjału \mathbf{A} jest dowolny (niezmienniczość względem cechowania), a w naszym przypadku założmy cechowanie niesymetryczne w postaci

$$\mathbf{A} = (-yB, 0, 0).$$

Równanie Schrödingera przyjmuje postać

$$\frac{1}{2m^*} \left(\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - eyB \right)^2 - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x, y) + V(x, y)\psi(x, y) = E\psi(x, y). \quad (5)$$

Możemy dokonać dyskretyzacji tego równania, lecz znacznie lepszym rozwiązaniem (nie tylko numerycznym) jest skorzystanie z faktu, że wprowadzone w ten sposób pole w sensie rozwiązania powoduje jedynie przemnożenie funkcji falowej przez pewną fazę zależną od pola wektorowego i drogi, a mianowicie

$$\psi(x, y) \rightarrow \psi(x, y) \exp \left(i \frac{e}{\hbar} \int_0^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right)$$

Chcąc zatem utrzymać równanie (3) w mocy musimy każdy element macierzowy tego równania przemnożyć przez pewien czynnik fazowy nazywany w literaturze fazą Peierlsa, tzn.

$$t_{nm} \rightarrow t_{nm} \exp \left(i \frac{e}{\hbar} \int_{\mathbf{r}_n}^{\mathbf{r}_m} \mathbf{A}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right).$$

Proszę wykonać następujące zadania:

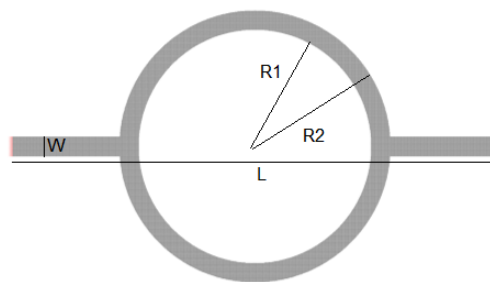
1. Wyprowadzić postać fazy Peierlsa dla założonego niesymetrycznego cechowania w postaci $\mathbf{A} = (-yB_z, 0, 0)$
2. Wprowadzić odpowiednio fazę Peierlsa do programu.
3. Dla układu bez potencjału rozpraszającego wykonać wykresy relacji dyspersji $E(k)$ w lewym kontakcie dla $B_z = 2$ T zakładając całkowitą szerokość nanodrutu $W = 80, 200$ nm. Co możemy zauważyć i jak to zinterpretować ?
4. Dla pola magnetycznego $B_z = 2$ T i $W = 200$ nm wykonać wykres konduktancji w funkcji energii.
5. Pokazać jak wygląda funkcja falowa najniższego stanu (nieco powyżej wypłaszczenia), gdy elektron wpuszczamy z lewego i prawego kontaktu.
6. Proszę ustawić potencjał rozpraszający na brzegu próbki (górny brzeg) i ponownie policzyć konduktancję w funkcji energii, jak również funkcję falową i gęstość prądu najniższego stanu wstrzykiwanego z lewego kontaktu.
7. Proszę odpowiednio skomentować uzyskane wyniki w kontekście kwantowego zjawiska Halla.

4 Efekt Aharonova-Bohma

Jak wspomniano w poprzednim zadaniu elektron przepływający przez nanourządzenie nabiera fazy pochodzącej od pola magnetycznego. Możemy zatem spróbować zaprojektować urządzenie, w którym elektron będzie nabierał innej fazy poruszając się po dwóch różnych ramionach nanourządzenia. Kontrolując wartość pola magnetycznego będziemy mogli kontrolować wielkość fazy nabieranej przez funkcję falową elektronu w obu ramionach. Możemy w ten sposób obserwować konstruktywną lub destruktywną interferencję elektronu z samym sobą i związany z nią wzrost i spadek przepływu prądu. Zjawisko to nosi nazwę efektu Aharonova-Bohma (UWAGA! w efekcie AB zakłada się, że potencjał wektorowy zlokalizowany jest jedynie wewnątrz pierścienia - dokładny opis na wykładzie).

Proszę wykonać następujące zadania.

1. Korzystając z dokumentacji KWANTA [kliknij tutaj] zdefiniować nanourządzenie w kształcie pierścienia kwantowego jak przedstawiono na rys. 3, o następujących rozmiarach $R1 = 600$ nm $R2 = 630$ nm, $W = 30$ nm , $L = 2500$ nm.



Rysunek 3: Schemat pierścienia kwantowego.

2. Wyznaczyć relacje dyspersji w lewym kanale.
3. Zakładając energie padającego elektronu odpowiadającą najniższemu stanowi poprzecznemu proszę wykonać wykres konduktancji w funkcji pola magnetycznego B_z , w niskim zakresie pól $[0, 10]$ mT. Z czym związane są pojawiające się oscylacje ?
4. Dla pola magnetycznego odpowiadającego minimum i maksimum konduktancji obliczyć moduł funkcji falowej oraz gęstość prądu. Czy widać na nim wspomniane zjawisko konstruktywnej i destruktywnej interferencji ?