

Orbity węzowe w złączu pn w grafenie

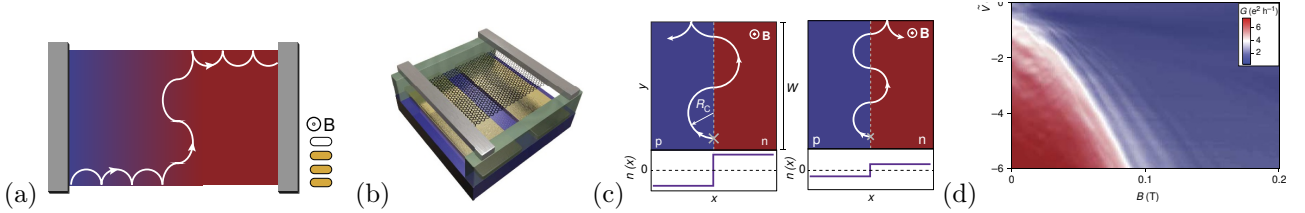
A. Mreńca-Kolasińska

14 maja 2022; ostatnia aktualizacja 29 maja 2024

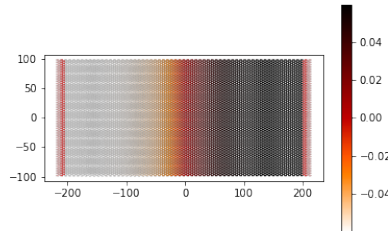
1 Wstęp

Zajmiemy się symulacją transportu ładunku w złączach $p-n$ w grafenie w prostopadłym polu magnetycznym. Klasycznie, w polu magnetycznym cząstki poruszają się po zakrzywionych trajektoriach o kierunku zależnym od pola magnetycznego i ładunku. W grafenie, ze względu na tunelowanie Kleina, na złączu $n-p$ powstają stany propagujące się wzdłuż tego złącza, tzw. stany węzowe (snake states) [Rys. 1(a)]. W tym laboratorium zajmujemy się symulacją tego zjawiska. Rozważamy układ dwu-terminalowy [Rys. 1(a), Rys. 2], analogiczny do eksperymentu opisanego w pracy Nat. Commun. 6, 6470 (2015) [Rys. 1(b)]. Promień orbity cyklotronowej R_c zmienia się wraz ze zmianą pola magnetycznego B lub energii, zależnie od R_c , klasycznie trajektoria cząstek może przebiec spowrotem do lewego kontaktu lub przepłynąć do prawego [Rys. 1(c)]. Zjawisko można zaobserwować poprzez pomiar przewodności – oscyluje ona w funkcji pola magnetycznego i wysokości bariery (którą ustawia się przez zmianę napięcia bramek) [zob. Rys. 1(d)].

W zadaniu obliczymy przewodność w układzie lecz tylko w funkcji B i dla ustalonej wysokości bariery – odpowiednik pojedynczego przekroju wykresu 1(d). Ze względu na krótki czas laboratorium, ograniczymy się do mniejszego układu [choć możliwa jest symulacja pełnowymiarowego problemu i dokonano tego m.in. we wspomnianej pracy – por. wykres przewodności zmierzonej, Fig. 3(d) i zasymulowanej Fig. 4(a)]. Rozwiążemy zadanie przy pomocy pakietu Kwant.



Rysunek 1: (a) Trajektoria w dwu-końcówkowym układzie ze złączem $n-p$. Wzdłuż złącza trajektoria skręca tworząc tzw. stany węzowe. (b) Grafen nad podwójną bramką indukującą złącze $n-p$. (c) Schematyczne trajektorie dla różnych napięć (a więc i różnych energii i promieni cyklotronowych). (d) Transmisja w funkcji B i napięcia.



Rysunek 2: Schemat układu rozważany w zadaniu z mapą profilu potencjału.

1.1 Zadania do wykonania

Obliczenia w tzw. modelu ciasnego wiązania (tight binding) dla grafenu opisuje hamiltonian, w którym elementy macierzowe mają niezerową wartość tylko pomiędzy atomami węgla będącymi w bezpośrednim sąsiedztwie. Można to opisać jako

$$H_{i,j} = \begin{cases} V(\mathbf{r}_i), & i = j, \\ t, & |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| = a_0/\sqrt{3}, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (1)$$

Ponadto, jak pokazane w wykładzie, dla niskiej energii relacja dyspersji grafenu daje się opisać prostym wzorem $E = \frac{\sqrt{3}}{2} t a k$. Stąd istnieje przybliżenie, tzw. model skalowany dla grafenu: stała sieci grafenu jest przemnożona przez czynnik s_f , a element macierzowy podzielony przez ten sam czynnik, co daje $E = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{t}{s_f} a s_f k = \frac{\sqrt{3}}{2} t_0 a_0 k$, gdzie $t_0 = t/s_f$, $a_0 = s_f a$ i $a = 0.25$ nm jest stałą sieci. Na początku programu zdefiniujemy zatem stałą sieci i dodatkowe zmienne pomocnicze (nm_au jest tu funkcją przeliczającą na jednostki atomowe)

```
a0 = nm_au(0.25)*sf
sin_30 = np.sin(30*np.pi/180)
cos_30 = np.cos(30*np.pi/180)
```

W celu zaobserwowania stanów węzowych, układ musi być wystarczająco szeroki, ale na tyle wąski, aby obliczenia były wykonalne w rozsądnym czasie. Przyjmijmy więc $y_{\min} = -79.9$ nm, $y_{\max} = 79.9$ nm, przyjmijmy także $x_{\min} = -200$ nm, $x_{\max} = 200$ nm oraz współczynnik skalowania sieci $s_f = 16$. Takie s_f może być nieco za wysokie do dokładnych obliczeń, ale zastosujemy je dla przyspieszenia zadania. Zakładamy, że prąd wpływa z kontaktu z lewej strony, wypływa z prawej i układ jest prostokątną wstęgą (Rys. 1).

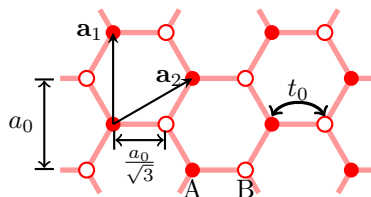
Schodek potencjału wyindukowany przez bramki elektrostatyczne przybliżymy przez profil potencjału

$$V(x, t) = V_{\text{np}} \tanh(x/d),$$

gdzie d reguluje gładkość złącza. Przyjmijmy $d = 50$ nm i $V_{\text{np}} = 0.1$ eV.

1. Stworzymy siatkę o strukturze plastra miodu. W tym celu można wykorzystać z tutorial Kwanta¹, modyfikując fragmenty kodu. Przykład w tutorialu tworzy wstęgę typu tzw. zigzag, lecz my zdefiniujemy sieć o orientacji typu tzw. armchair wzdłuż kierunku x .

Sieć grafenu w jednej komórce elementarnej zawiera dwa atomy bazy, zwane A i B. Dlatego tworząc tę sieć, w Kwancie podajemy wektory sieci oraz położenia atomów bazy. Wektory sieci zdefiniujemy zatem jako $\mathbf{a}_1 = (0, a_0)$, $\mathbf{a}_2 = a_0(\cos(30^\circ), \sin(30^\circ))$. Położenia atomów bazy A i B to odpowiednio $(0, 0)$ i $(a_0/\sqrt{3}, 0)$ [zob. Rys. 3].



Rysunek 3: Sieć grafenu wraz z zaznaczonymi wektorami sieci i atomami bazy.

W pakiecie Kwant sieć z bazą opisaną powyżej można stworzyć przy pomocy:

```
graphene = kwant.lattice.general([(0, a0), (cos_30*a0, sin_30*a0)],
                                [(0, 0), (a0 / np.sqrt(3), 0)], norbs=1)
a, b = graphene.sublattices
```

Proszę utworzyć układ o kształcie prostokąta. Budowę układu wykonujemy np.

```
def rect(pos):
    x, y = pos
    # definicja kształtu ...
    # return: wartosc logiczna
```

¹Przydatny tutorial do implementacji sieci grafenowej przy pomocy pakietu Kwant: link.

```

def potential(site):
    (x, y) = site.pos
    # definicja profilu energii potencjalnej
    # return ... (wartosc energii potencjalnej w wezle site)

sys = kwant.Builder()
sys[graphene.shape(rect, (0, 0))] = potential

```

2. Proszę zaimplementować funkcje niezbędne do zdefiniowania hamiltonianu układu. Pamiętajmy o przeskalowaniu całki przeskoku: $t_0 = t/s_f$, gdzie $t = -3$ eV. W celu uwzględnienia zewnętrznego pola magnetycznego, całki przeskoku przemnażamy dodatkowo przez $\exp(i\phi)$, $\phi = \frac{e}{\hbar} \int_{r_j}^{r_j} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}$, co dla potencjału wektorowego wybranego $\mathbf{A} = (-yB, 0)$ daje $\phi = -B \frac{e}{\hbar} (y_i + y_j)(x_j - x_i)/2$. Wszystko to uwzględniamy we własnej funkcji o nazwie np. `nn_hopping`, która jest następnie przypisana do odpowiednich sąsiadów:

```

def nn_hopping(site1, site2, p):
    (x1, y1) = site1.pos
    (x2, y2) = site2.pos
    flux = # do zdefiniowania
    return t0 * np.exp(1j * flux)

sys[graphene.neighbors()] = nn_hopping

```

W pół-nieskończonych kontaktach po lewej i prawej (Rys. 1) wybieramy wektor translacji zgodny z szerokością komórki elementarnej wstęgi typu armchair, czyli $\Delta x = (\sqrt{3}a_0, 0)$, np. w lewym kontakcie:

```

sym0 = kwant.TranslationalSymmetry([-np.sqrt(3)*a0, 0])
def lead_shape(pos):
    x, y = pos
    return -W < y < W
lead0 = kwant.Builder(sym0)
lead0[graphene.shape(lead_shape, (0, 0))] = # energia potencjalna w lewym kontakcie
lead0[graphene.neighbors()] = nn_hopping

```

Przedostatnia linia określa energię potencjalną w kontakcie; wartość powinna być tu taka, aby profil potencjału był gładki. Ostatnia linia to dodanie połączeń między sąsiadami. Prawy kontakt definiujemy analogicznie.

3. Na początek tworzymy mały układ: $y_{\min} = -12.9$ nm, $y_{\max} = 12.9$ nm, $x_{\min} = -15$ nm, $x_{\max} = 15$ nm oraz $V_{\text{np}} = 0$. Proszę przy pomocy funkcji dostępnych w Kwancie wykonać wykresy relacji dyspersji w lewym kontakcie przy $s_f = 1$ oraz $s_f = 16$ i dla zerowego pola magnetycznego (**10 pkt**). Wykresy dla $s_f = 1$ i $s_f = 16$ proszę także wykonać razem na jednym wykresie. Oba przy niskiej energii ($|E| \lesssim 0.1$ eV) powinny się ze sobą zgadzać (**10 pkt**). Do obliczeń relacji dyspersji można wykorzystać `kwant.physics.Bands`. [Uwaga co do rysowania wykresu: w przykładzie pod podanym linkiem `momenta = k\Delta x` są w zakresie $[-\pi/\pi)$, a Δx jest długością komórki elementarnej. Aby na osi k_x otrzymać wektor falowy w 1/nm, należy podzielić przez Δx : `plot(momenta/(np.sqrt(3)*a_0), energies)`].

4. Wracamy do $y_{\min} = -79.9$ nm, $y_{\max} = 79.9$ nm, $x_{\min} = -200$ nm, $x_{\max} = 200$ nm i $V_{\text{np}} = 0.1$ eV. Proszę narysować mapę układu wraz z potencjałem (**10 pkt**), korzystając z funkcji

```

kwant.plot(sys, site_color=potential, site_lw=0.1, site_size=0.5, cmap='gist_heat_r')

```

Można zmienić opcje `cmap` i inne. Proszę narysować relację dyspersji dla $B = 1.5$ T, przy $s_f = 16$ (**10 pkt**). Wyrażając B w jednostkach atomowych, powinniśmy przeliczyć $B \rightarrow B * 4.25475 \times 10^{-6}$. Proszę sprawdzić, czy widoczne są poziomy Landaua (płaskie pasma) oraz czy spektrum jest przesunięte o V_{np} .

5. Proszę wykonać obliczenia transmisji w funkcji pola magnetycznego w zakresie od $B = 1$ T do $B = 3$ T np. co $\Delta B = 0.05$ T lub gęściej. Rysujemy wykres transmisji (**40 pkt**). Chcąc przedstawić przewodność $G = 2 \frac{e^2}{h} T$, na osi y podajemy jednostki $2 \frac{e^2}{h}$.
6. Otrzymany wykres $G(B)$ powinien zawierać kilka minimów i maksimów. Proszę wybrać przynajmniej dwie wartości B , w tym przynajmniej jedną w minimum i jedną w maksimum G i wykonać dla nich mapy prądu (dla pierwszego modu) korzystając z `kwant.operator.Current()`² (**20 pkt**).

²przydatna strona