

Pakiet KWANT - symulacje transportu elektronowego w polu magnetycznym

Marta Wleklińska

May 2025

1 Wstęp

Obliczanie właściwości transportu kwantowego może być czasochłonne. Jednak definiowanie układu oraz metody obliczeniowej może być elastyczne i uniwersalne. Aby uniknąć konieczności wielokrotnego pisania kodu od podstaw, opracowano bibliotekę Kwant. Kwant to biblioteka języka Python, która umożliwia łatwe tworzenie, definiowanie oraz obliczanie właściwości transportowych układów kwantowych.

2 Nanodrut

Ćwiczenie rozpoczęliśmy od definicji układu nanodrutu. Będzie on zdyskretyzowany na siatce o długości dx . Równanie Schrödingera po dyskretyzacji przyjmie postać

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

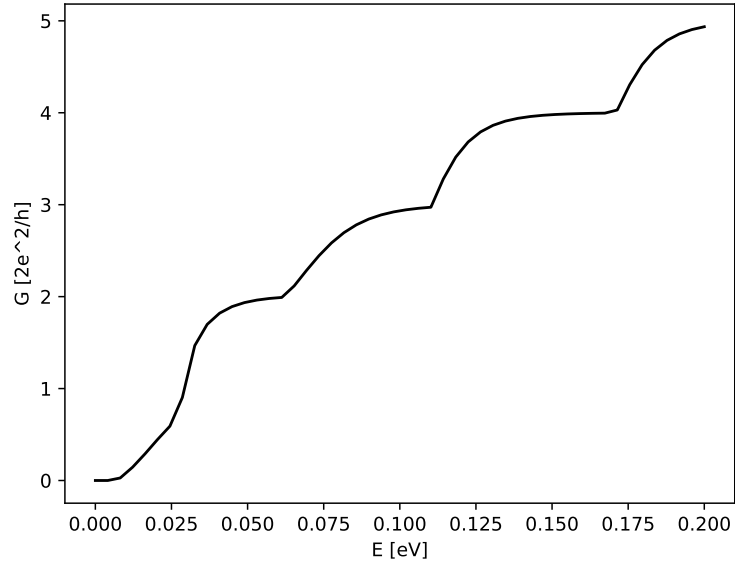
gdzie $t = \hbar^2/(2m^*dx^2)$. Pakiet Kwant umożliwia wygodnie obliczyć macierz rozpraszania oraz współczynniki transmisji elektronów przez układ.

W celu zbadania wpływu lokalnego potencjału rozpraszającego na transport w nanodrucie, wprowadziliśmy potencjał gaussowski

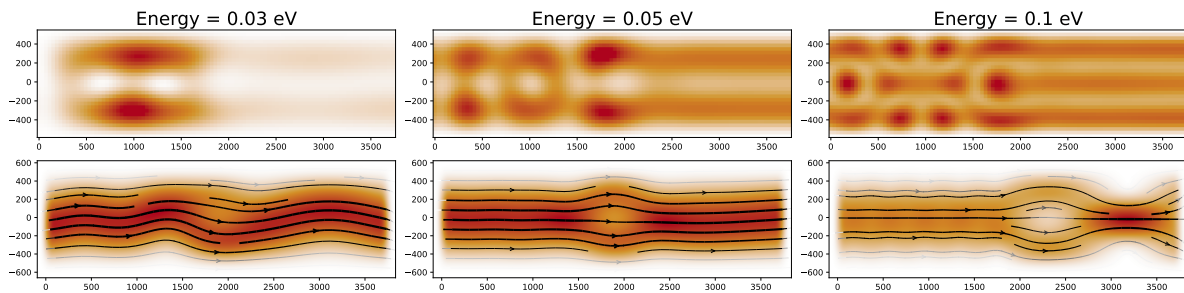
$$V(x, y) = V_0 \exp \left[\frac{-(x - x_0)^2 - (y - y_0)^2}{\sigma^2} \right], \quad (2)$$

zakładając $V_0 = 50$ meV, $\sigma = 10$ nm. Konduktancja w takim układzie w funkcji energii została przedstawiona na rysunku 1. Można zauważyć typowe dla przewodnictwa kwantowego schodki konduktancji, odpowiadające aktywacji kolejnych modów przewodzenia. Jednakże ich kształt jest wygładzony — efekt ten wynika z rozpraszania na wprowadzonej barierze potencjału. Obecność rozpraszającego centrum prowadzi do częściowej refleksji i modyfikacji funkcji falowych.

Następnie rysunek 2 zawiera wizualizacje funkcji falowej oraz gęstości prądu dla trzech różnych wartości energii padającego elektronu $E = \{0.02, 0.05, 0.1\}$ eV. Dla najniższej energii widoczna jest znaczna lokalizacja przed potencjałem, świadcząca o dominującym odbiciu. Wraz ze wzrostem energii, funkcje falowe stają się bardziej rozciągnięte przestrzennie, a prąd płynie przez cały układ — wskazując na zwiększoną transmitancję.



Rysunek 1: Wykres konduktancji w funkcji energii padającego elektronu dla układu z potencjałem rozpraszania w postaci gaussowskiej zlokalizowanym w środku nanodrutu



Rysunek 2: Wykres funkcji falowej oraz gęstości prądu dla układu z potencjałem rozpraszania w postaci gaussowskiej zlokalizowanym w środku nanodrutu dla $E = 0.5$ eV

Kwantowy efekt Halla

W kolejnym kroku, chcielibyśmy wprowadzić pole magnetyczne $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$. W modelu dyskretnym, takim jak stosowany w pakiecie kwant, pole magnetyczne uwzględnia się poprzez odpowiednią fazę dodaną do elementów macierzy Hamiltonianu, zgodnie z regułą Peierlsa.

Dla niesymetrycznego cechowania potencjałem wektorowym

$$\mathbf{A}(x, y) = (-yB_z, 0, 0),$$

faza Peierlsa pomiędzy punktami $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0)$ oraz $\mathbf{r}_1 = (x_1, y_1)$ dana jest wyrażeniem:

$$\vartheta = \frac{e}{\hbar} \int_{t(\mathbf{r}_0)}^{t(\mathbf{r}_1)} dt \mathbf{A}(\mathbf{r}(t)) \cdot \frac{d}{dt} \mathbf{r}(t).$$

Dokonyjemy parametryzacji przez trajektorię prostoliniową między punktami

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 + t(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0), \quad t \in [0, 1],$$

czyli

$$x(t) = x_0 + t(x_1 - x_0), \quad y(t) = y_0 + t(y_1 - y_0).$$

Zatem pochodna zupełna

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = (x_1 - x_0, y_1 - y_0).$$

Mamy teraz wszystkie dane aby wprowadzić do wyrażenia fazę

$$\vartheta = \frac{e}{\hbar} \int_0^1 \mathbf{A}(\mathbf{r}(t)) \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} dt = \frac{e}{\hbar} \int_0^1 (-B_z y(t))(x_1 - x_0) dt.$$

Możemy rozwinąć tę całkę do postaci

$$\vartheta = -\frac{eB_z}{\hbar} (x_1 - x_0) \int_0^1 (y_0 + t(y_1 - y_0)) dt$$

i ją obliczyć

$$\int_0^1 (y_0 + t(y_1 - y_0)) dt = y_0 + \frac{1}{2}(y_1 - y_0) = \frac{y_0 + y_1}{2}.$$

Zatem ostateczna postać fazy Peierlsa wynosi

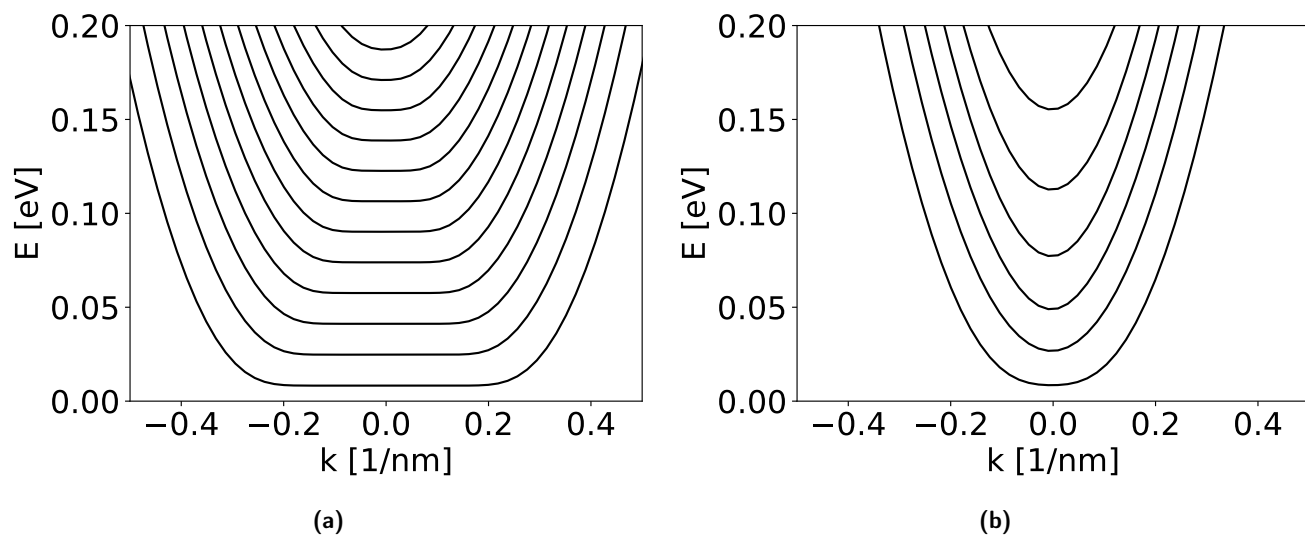
$$\vartheta = -\frac{eB_z}{\hbar} (x_1 - x_0) \cdot \frac{y_0 + y_1}{2}.$$

Tę fazę należy uwzględnić jako czynnik $e^{i\vartheta}$ w elementach hopping-u.

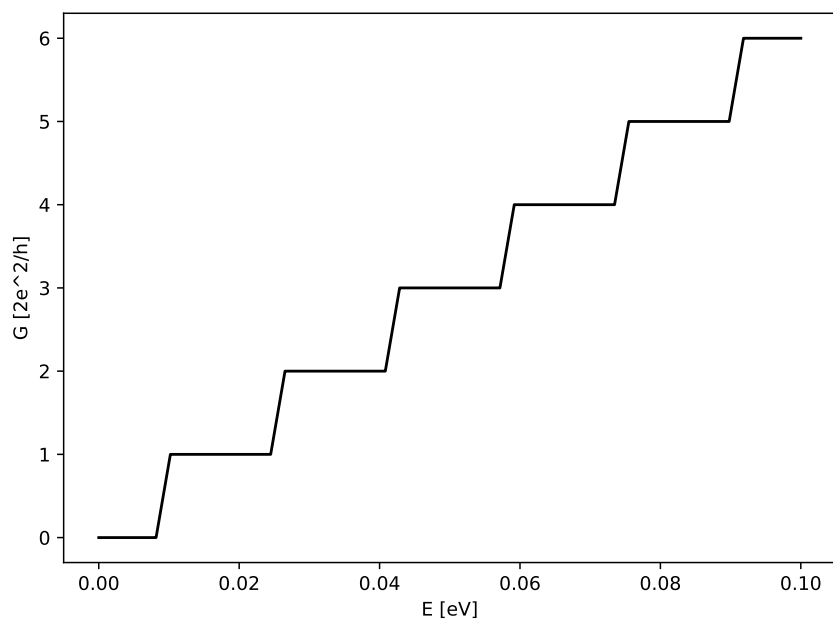
Na rysunku 3 pokazano relacje dyspersji $E(k)$ w lewym kontakcie dla dwóch szerokości nanodrutu: $W = 200$ nm oraz $W = 80$ nm. Dla szerszego układu pojawiają się wypłaszczenia przy małych wartościach k , charakterystyczne dla stanów Landaua. Oznacza to, że prąd w tych stanach nie przepływa (grupowa prędkość równa zero). Pojawiające się przerwy energetyczne między stanami sugerują obecność kwantowego efektu Halla — prąd przenoszony jest przez stany brzegowe, które są odporne na rozpraszanie.

Na rysunku 4 przedstawiono wykres konduktancji dla tego samego układu. W porównaniu do wcześniejszego przypadku bez pola magnetycznego, schodki konduktancji są bardziej wyraźne i dobrze zdefiniowane, co świadczy o silniejszej kwantyzacji przewodnictwa. Rysunek 5 prezentuje najniższe stany funkcji falowej dla elektronów wpuszczanych z lewego i prawego kontaktu. Obserwujemy ich lokalizację po przeciwnych stronach nanodrutu, co jest efektem działania siły Lorentza i jednoznacznie wskazuje na istnienie stanów brzegowych.

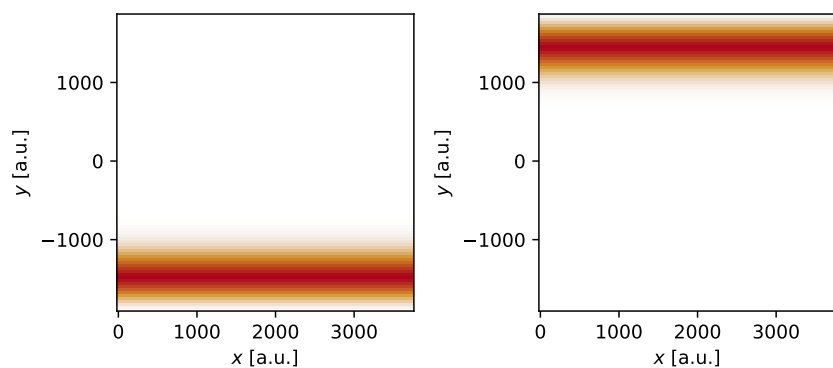
W kolejnej części ponownie dodaliśmy potencjał rozpraszający na górnym brzegu układu. Ponownie zatem wyznaczyliśmy konduktancję oraz funkcję falową najniższego stanu wstrzykiwanego z lewego kontaktu. Wykres konduktancji został przedstawiony na rysunku 6, a gęstość prądu oraz funkcja falowa na 7. Dla wykresów konduktancji nie notujemy dużych zmian przed i po wprowadzeniu potencjału rozpraszania. Przy mapach funkcji falowej, zauważymy formowanie się przy puszczeniu elektronu z lewego kontaktu pewne *odchylenie* w porównaniu do przypadku bez potencjału.



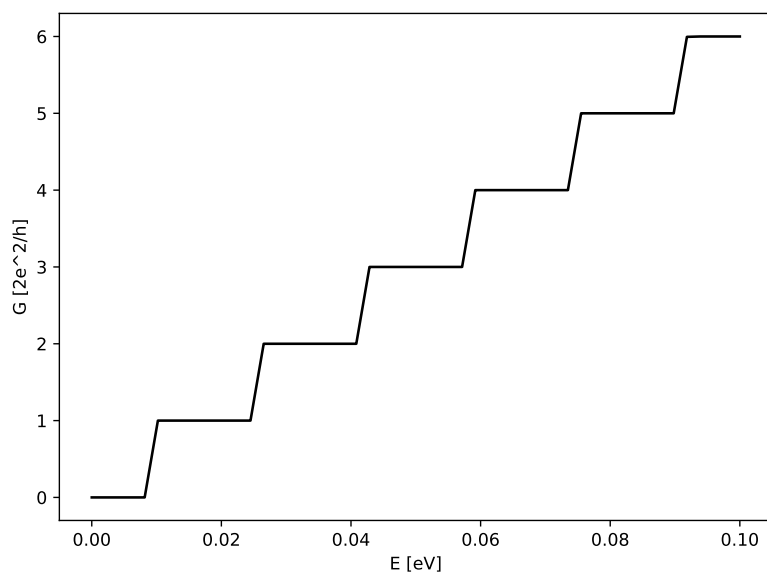
Rysunek 3: Relacje dyspersji w nanodrucie dla $B_z = 2$ T i **(a)** $W = 200$ nm, **(b)** $W = 80$ nm



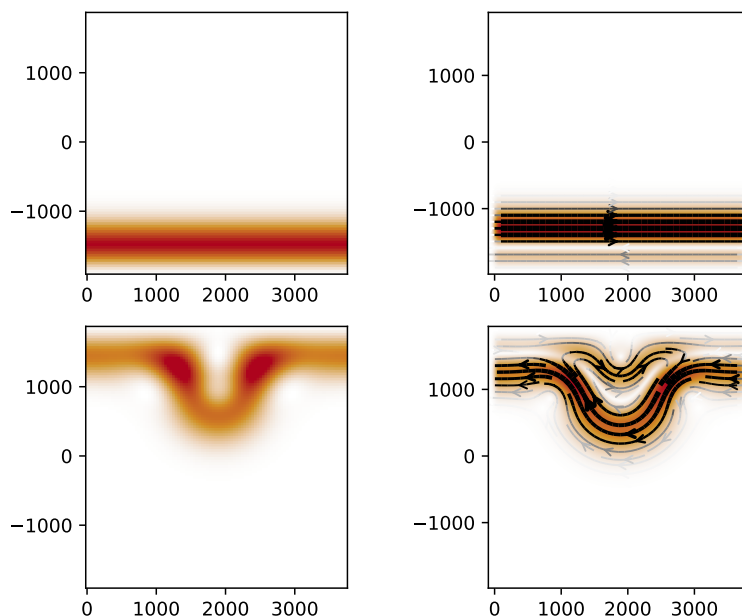
Rysunek 4: Wykres konduktancji w funkcji energii padającego elektronu dla $B_z = 2$ T i $W = 200$ nm



Rysunek 5: Funkcja falowa najniższego energetycznie stanu dla elektronu puszczonego z lewego i prawego kontaktu. Wyniki dla $B_z = 2$ T i $W = 80, 200$ nm



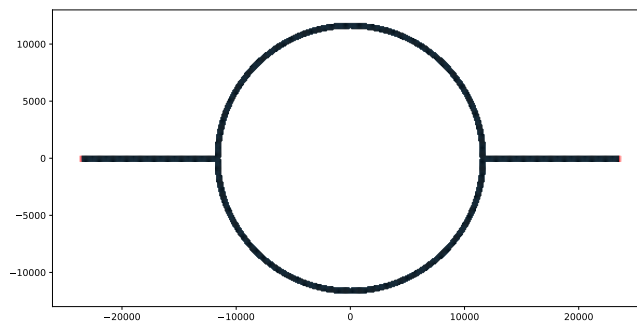
Rysunek 6: Wykres konduktancji w funkcji energii padającego elektronu przy potencjale rozproszenia na brzegu układu



Rysunek 7: Funkcja falowa (wykresy po lewej) i gęstość prądu (po prawej) przy potencjalnie rozpraszającym na brzegu układu

3 Pierścień kwantowy

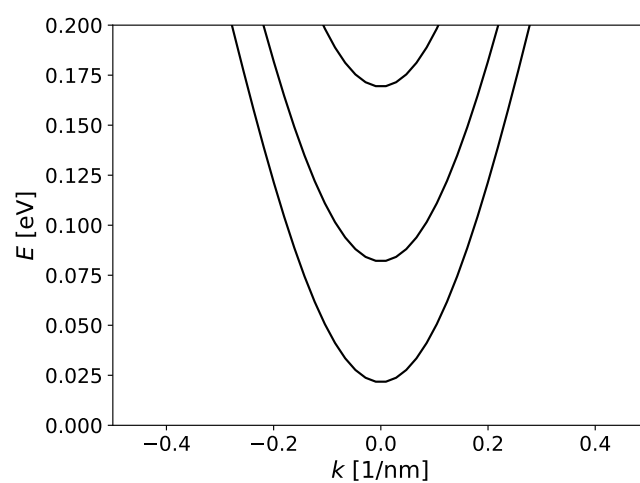
Ostatnia część ćwiczenia polegała na symulacji pierścienia kwantowego. Układ składał się z części kontaktu który został połączony z pierścieniem i wchodził do kontaktu leadu. Układ został przedstawiony na rysunku 8. Ponownie mogliśmy



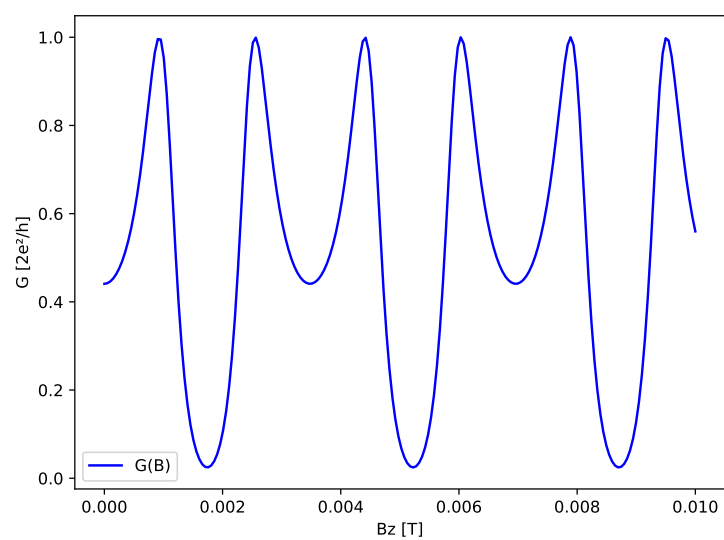
Rysunek 8: Układ pierścienia kwantowego

wyznaczyć relację dyspersji, która została zaprezentowana na rysunku 9. Mimo podobnego kształtu do pozostałych relacji z poprzednich części ćwiczenia obserwujemy mniejszą ich gęstość - do wartości $E = 0.2$ eV obserwujemy trzy. Na rysunku 10 ukazano konduktancję w funkcji pola magnetycznego dla ustalonej energii padającego elektronu ($E = 0.05$ eV). Obserwujemy wyraźne oscylacje konduktancji, charakterystyczne dla efektu Aharonova-Bohma. Zmiana strumienia magnetycznego przenikającego przez pierścień powoduje interferencję fal elektronowych, prowadzącą do naprzemiennego tłumienia i wzmocnienia transmisji.

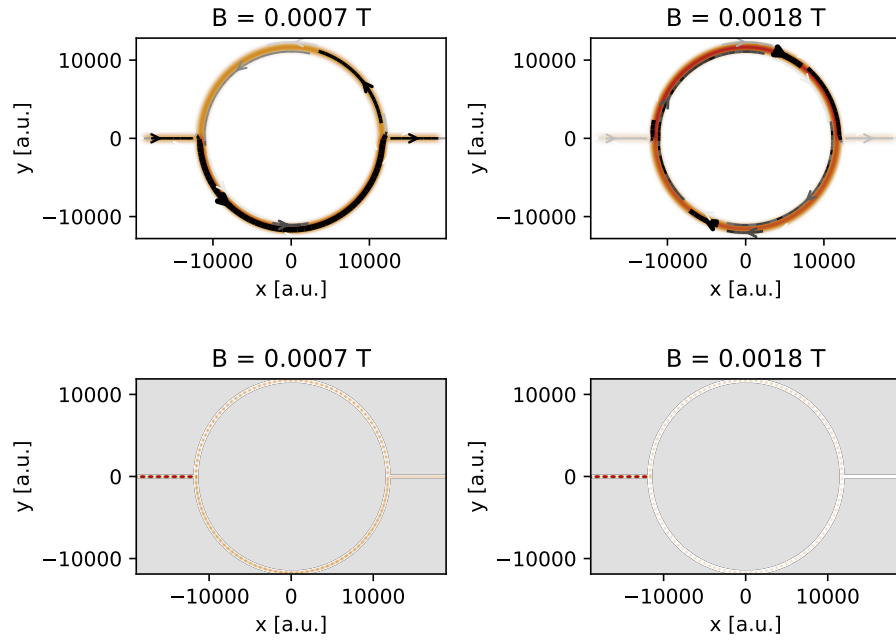
Odczytując minima i maksima (dla tych pól B) mogliśmy wyznaczyć gęstość prądu i funkcje falowe, które zostały przedstawione na rysunku 11. Szczególnie na mapach funkcji falowej możemy zauważyć różnice przy wartości $B_z = 1.8$ mT, dla której na zależności konduktancji występowało minimum. Funkcja falowa jest zlokalizowana w lewym kontakcie. W przypadku $B_z = 0.7$ mT (maksimum konduktancji) występowała ona również w pierścieniu.



Rysunek 9: Relacja dyspersji dla lewego kanału



Rysunek 10: Konduktancja w funkcji energii przy $E = 0.05$ eV



Rysunek 11: Funkcje falowe oraz gęstości prądu przy $B_z = 0.7 \text{ mT}$ oraz $B_z = 1.8 \text{ mT}$

4 Podsumowanie

Ćwiczenie miało na celu wprowadzić do wykonywania obliczeń w pakiecie Kwant. Analizowane zostały zależności konduktancji, gęstości prądu sterując parametrami w układach nanodrutu oraz pierścienia kwantowego. Zaletą tego programu jest dostępne obliczanie parametrów układu, kiedy jedyną trudnością jest definicja układu, co zdecydowanie przyspiesza obliczenia.