

# Kwant和pybinding的联合编程

---

## 目录

---

[Kwant和pybinding的联合编程](#)

[目录](#)

[Kwant和pybinding简介](#)

## Kwant和pybinding简介

---

[Kwant](#)是一个免费（开源）、功能强大且易于使用的Python包，用于对紧束缚模型进行数值计算，重点关注量子输运。[pybinding](#)是一个用于科研的Python包，用于固态物理学中的数值紧束缚计算。Kwant具有优秀的处理量子输运计算的能力，而pybinding则在构建输运器件模型方面很有优势，并且能够提供简单易用的能和Kwant对接的接口。此外，pybinding的优势在于能够十分方便的定义器件的形状、对称性，并能够简单的添加磁场、势垒，也能很好的构建器件的缺陷以及对器件施加压力，最令人惊奇的是，pybinding能够随意的定义格点以及格点间的耦合（包括层间），这为研究多层石墨烯，旋转石墨烯提供了很好的工具。Kwant和pybinding的联合编程不仅使得输运程序的书写变得简单易行，同时也因pybinding的功能的丰富性使得我们突破了程序编写的限制。

该文本主要通过实例来介绍Kwant和pybinding的联合编程，其中许多例子很有记录的必要。