

Electron Transport Simulations in the Real-Space Finite-Difference (RSFD) Formalism

Hidekazu Goto
goto@prec.eng.osaka-u.ac.jp

Computational Physics Group,
Division of Precision Science & Technology and Applied Physics,
Graduate School of Engineering,
Osaka University
JAPAN

16th Sep 2009

1

Time evolution of wave function (1)

時間依存シュレディンガー方程式

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = H\psi(\mathbf{r},t)$$

時間発展演算子(プロパゲータ)

$$U = \exp[-i(t-t_0)H] \text{ を用いて } \psi(\mathbf{r},t) = U\psi(\mathbf{r},t_0)$$

鈴木-ロッター公式により、微小時間 Δt 後の波動関数は、

$$\psi(\mathbf{r},t+\Delta t) = e^{-i\frac{1}{2}\Delta t V(\mathbf{r})} e^{-i\Delta t \hat{K}} e^{-i\frac{1}{2}\Delta t V(\mathbf{r})} \psi(\mathbf{r},t) \quad \left[\hat{K} \equiv -\frac{1}{2}\nabla^2 : \text{運動エネルギー演算子} \right]$$

実空間差分法を適用

$$-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x_j,t) \approx -\frac{1}{2}\sum_{n=-N_f}^{N_f} c_n \psi(x_j + nh_x, t) + O(h_x^{2N+2})$$

h_v ($v = x, y, z$) は v 方向の空間刻み幅
 c_n は重み係数

H.Goto and K.Hirose., J. Phys.: Condens. Matter 19 (2007) 365205
H.Goto and K.Hirose, Phys. Rev. E, in preparation.

国内特許出願:
「時間依存シュレディンガー方程式の数値シミュレーション装置」(特願2006-247367)
JST(科学技術振興機構)より国際特許出願中(2009)

Time evolution of wave function (2)

実空間差分法におけるプロパゲータの表式

$$\psi(\mathbf{r}_j, t+\Delta t) = \frac{1}{\pi^3} e^{-i\frac{\Delta t}{2}V(\mathbf{r}_j, t+\frac{\Delta t}{2})} \times \sum_{j_x'} \sum_{j_y'} \sum_{j_z'} \left[\prod_{v=x,y,z} \int_0^\pi [\cos(j_v - j_v')\theta] \exp\left(i\frac{\Delta t}{h_v} \sum_{l=0}^{N_f} c_l \left(1 - \frac{1}{2}\delta_{0l}\right) \cos(l\theta)\right) d\theta \right] \times e^{-i\frac{\Delta t}{2}V(\mathbf{r}_j, t+\frac{\Delta t}{2})} \psi(\mathbf{r}_{j'}, t)$$

自由電子のプロパゲータ

例えば、中心差分の場合 $-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x_j, t) \approx -\frac{1}{2}\frac{\psi(x_{j+1}, t) - 2\psi(x_j, t) + \psi(x_{j-1}, t))}{h_x^2}$

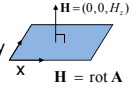
$$\psi(\mathbf{r}_j, t+\Delta t) = e^{-i\frac{\Delta t}{2}V(\mathbf{r}_j)} \sum_{j_x'} \sum_{j_y'} \sum_{j_z'} \left[\prod_{v=x,y,z} i^{j_v - j_v'} e^{-i\frac{\Delta t}{h_v^2} J_{j_v - j_v'}(\frac{\Delta t}{h_v^2})} \right] e^{-i\frac{\Delta t}{2}V(\mathbf{r}_{j'})} \psi(\mathbf{r}_{j'}, t)$$

自由電子のプロパゲータ
 $J_n(x)$ はBessel関数 h_v は v 方向の空間刻み幅

この式を繰り返し利用すれば、波動関数の時間発展を追跡することができる。

Time evolution of wave function (3)

Hamiltonian $\hat{H} = -\frac{1}{2}\left[\nabla + i\frac{1}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right]^2 + V(\mathbf{r},t)$

$\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ はベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(x,y) = \left(-H_z \frac{y}{2}, H_z \frac{x}{2}\right)$ 

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{H_z}{2c}(xP_y - P_x y) + \frac{H_z^2}{8c^2}(x^2 + y^2) + V(x,y)$$

運動エネルギー $\left(P_x = -i\frac{\partial}{\partial x}, P_y = -i\frac{\partial}{\partial y}\right)$ 運動量

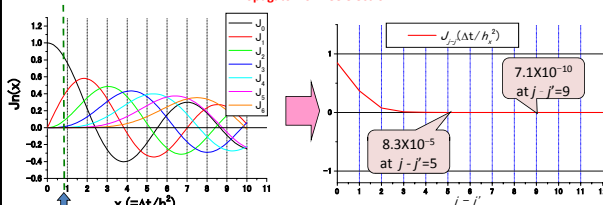
$\psi(\mathbf{r}, t+\Delta t) = \exp[-i\Delta t \hat{H}] \psi(\mathbf{r}, t)$ に、実空間差分法(中心差分法)を適用すると、

$$\psi(j_x, j_y, j_z, t+\Delta t) = e^{-i\frac{\Delta t}{2}V(j_x, j_y)} e^{-i\frac{\Delta t}{2} \frac{H_z^2}{8c^2} h^2 (j_x^2 + j_y^2)} \times \sum_{j_x''} \sum_{j_y''} \left[J_{j_x - j_x''} \left(-\Delta t \frac{H_z}{2c} j_y \right) \right] \left[J_{j_y - j_y''} \left(\Delta t \frac{H_z}{2c} j_x \right) \right] \times \sum_{j_x'} \sum_{j_y'} \left[e^{\frac{\Delta t}{h^2} i^{j_x - j_x'} J_{j_x - j_x'} \left(\frac{\Delta t}{h^2} \right)} \right] \left[e^{\frac{\Delta t}{h^2} i^{j_y - j_y'} J_{j_y - j_y'} \left(\frac{\Delta t}{h^2} \right)} \right] \times e^{-i\frac{\Delta t}{2}V(j_x', j_y', j_z)} e^{-i\frac{\Delta t}{2} \frac{H_z^2}{8c^2} h^2 (j_x'^2 + j_y'^2)} \psi(j_x', j_y', j_z, t) \quad J_n(x) \text{はBessel関数}$$

Attenuation characteristics of the propagator (1)

$$\psi(\mathbf{r}_j, t+\Delta t) = e^{-i\frac{\Delta t}{2}V(\mathbf{r}_j, t+\frac{\Delta t}{2})} \sum_{j_x'} \sum_{j_y'} \sum_{j_z'} \left[\prod_{v=x,y,z} i^{j_v - j_v'} e^{-i\frac{\Delta t}{h_v^2} J_{j_v - j_v'}(\frac{\Delta t}{h_v^2})} \right] e^{-i\frac{\Delta t}{2}V(\mathbf{r}_{j'})} \psi(\mathbf{r}_{j'}, t)$$

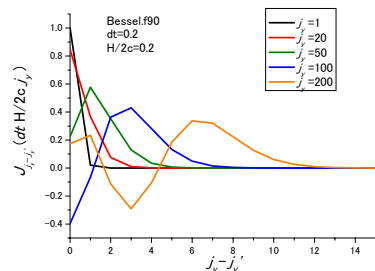
Propagator for free electron



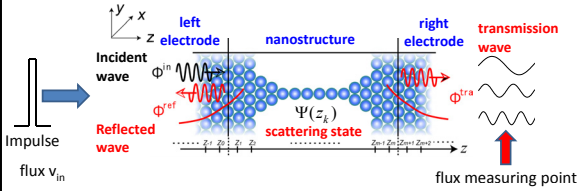
5

Attenuation characteristics of the propagator (2)

$$\psi(j_x, j_y, j_z, t+\Delta t) = e^{-i\frac{\Delta t}{2}V(j_x, j_y)} e^{-i\frac{\Delta t}{2} \frac{H_z^2}{8c^2} h^2 (j_x^2 + j_y^2)} \times \sum_{j_x''} \sum_{j_y''} \left[J_{j_x - j_x''} \left(-\Delta t \frac{H_z}{2c} j_y \right) \right] \left[J_{j_y - j_y''} \left(\Delta t \frac{H_z}{2c} j_x \right) \right] \sum_{j_x'} \sum_{j_y'} \left[e^{\frac{\Delta t}{h^2} i^{j_x - j_x'} J_{j_x - j_x'} \left(\frac{\Delta t}{h^2} \right)} \right] \left[e^{\frac{\Delta t}{h^2} i^{j_y - j_y'} J_{j_y - j_y'} \left(\frac{\Delta t}{h^2} \right)} \right] \times e^{-i\frac{\Delta t}{2}V(j_x', j_y', j_z)} e^{-i\frac{\Delta t}{2} \frac{H_z^2}{8c^2} h^2 (j_x'^2 + j_y'^2)} \psi(j_x', j_y', j_z, t)$$



Impulse-Response method (1)



初期パルス関数 (x, y 方向が周期系、Jellium電極を用いる場合)

$$\chi_{n_x, n_y}(\mathbf{r}_\ell, t_0) = \begin{cases} \exp[i(G_{n_x} x_\ell + G_{n_y} y_\ell)] & \cdots z_\ell = z_0 \\ 0 & \cdots z_\ell \neq z_0 \end{cases}$$

ここに、 G_{n_x}, G_{n_y} は、逆格子ベクトル $G_{n_x} = \frac{2\pi}{L_x} n_x$, $G_{n_y} = \frac{2\pi}{L_y} n_y$ (n_x, n_y は整数).

初期パルス関数 (x, y 方向が孤立系の場合)

$$\chi_n(\mathbf{r}_\ell, t_0) = \begin{cases} \phi_n(x_\ell, y_\ell) & \cdots z_\ell = z_0 \\ 0 & \cdots z_\ell \neq z_0 \end{cases}$$

Impulse Response Method (2)

左電極から入射する電子の定常的な散乱波動関数:

$$\psi(\mathbf{r}_j; E) = \gamma(E) \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{t_0}^T dt e^{iE(t-t_0)} \chi(\mathbf{r}_j, t) \quad (z_j \geq z_0)$$

散乱波動関数 ← 周波数解析 ← 時間発展解

$$\gamma(E) = \frac{I^{in}(z_j; E)}{h_z} \frac{\phi_L^{in}(z_j; E)}{|\phi_L^{in}(z_j; E)|^2}$$

h_z は z 方向の空間刻み幅

$I^{in}(z_j; E)$ は入射波 $\phi_L^{in}(z_j; E)$ のflux

Jellium電極の場合は $\phi_L^{in}(z_j; E) = e^{ik_z z}$

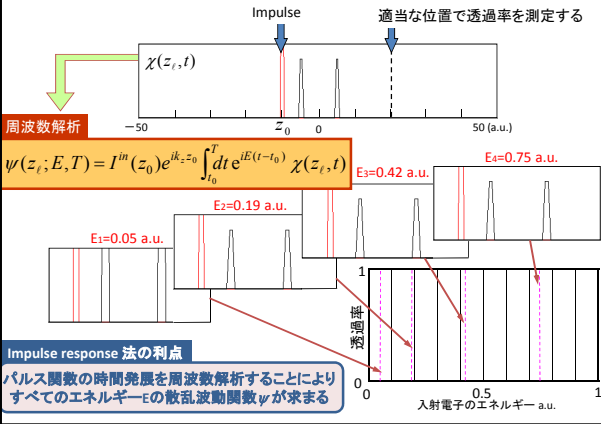
パルス関数 χ_{n_x, n_y} の時間発展を1回だけ実行し、それを周波数解析することにより $x-y$ mode (n_x, n_y) に関するすべてのエネルギー-Eの散乱波動関数 ψ が求まる。

★国内特許出願：(広瀬喜久治、後藤英和)

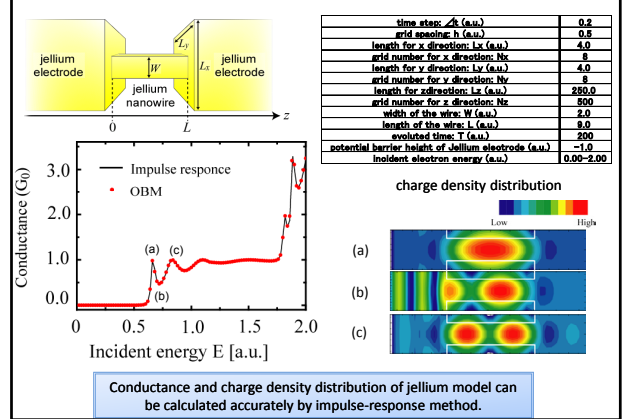
「時間依存シュレディンガー方程式の数値シミュレーション装置」(特願2006-247367)

★JST(科学技術振興機構)より国際特許出願中(2009)

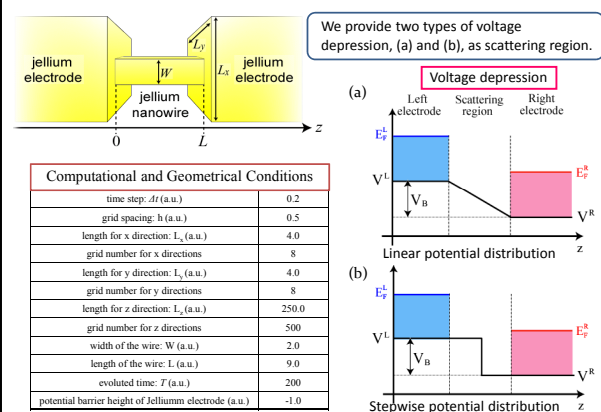
Demonstration: 二重障壁共鳴トンネル伝導



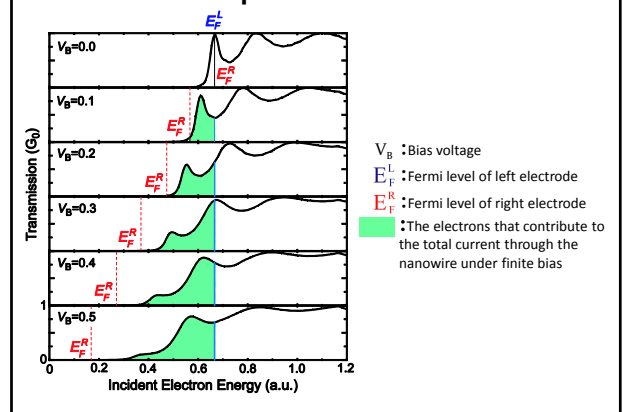
Demonstration: 3-D Jellium structure



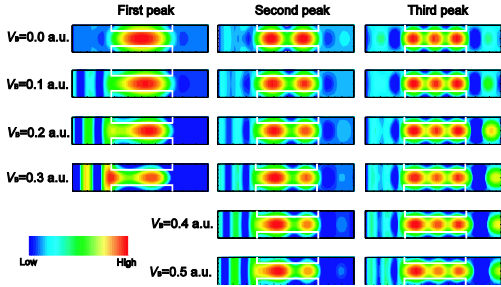
Jellium model under electric field



Linear potential distribution



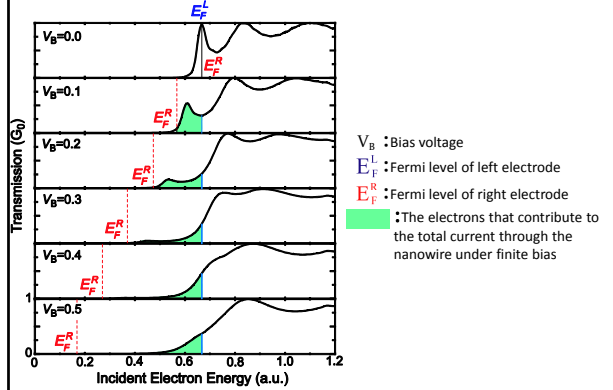
Cross-sectional views of the electron charge density distribution



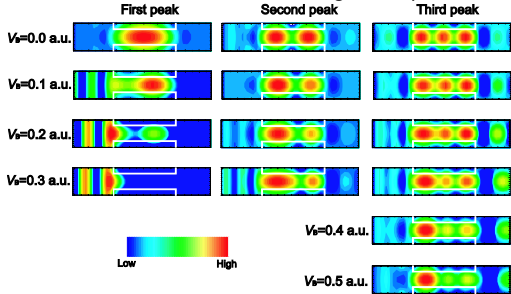
The planes are perpendicular to the y-direction and include the wire axis. In the cases where the applied potential is 0.4 and 0.5 (a.u.), the first and second peaks disappear from the conductance curve, so that the density distributions are not shown.

As the first peak and the second peak of transmission evanesce, resonance states in the nanowire fade away and the boundary face between the wire and the left electrode reflect incident electrons.

Stepwise potential distribution



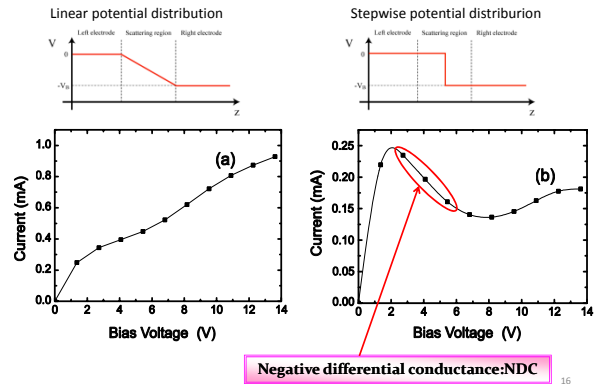
Cross-sectional views of the electron charge density distributions



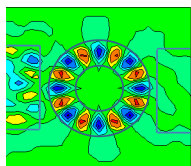
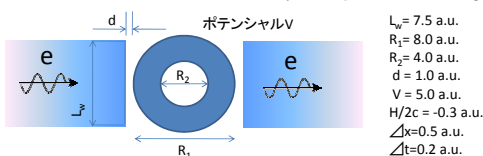
The planes are perpendicular to the y-direction and include the wire axis. In the cases where the applied potential is 0.4 and 0.5 (a.u.), the first and second peaks disappear from the conductance curve, so that the density distributions are not shown.

As the first peak of transmission evanesce, resonance states in the nanowire fade away. When bias voltage is only 0.3 a.u., the boundary face between the wire and the left electrode reflect almost all incident electrons.

Negative differential conductance (NDC)

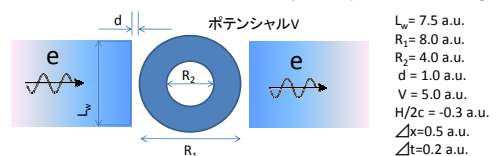


円形量子ドットによる磁場共鳴トンネル伝導(2)

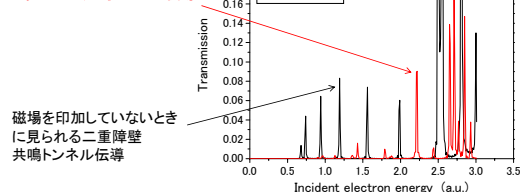


Impulse-Response 法により求めた散乱波動関数 ($E=2.22$ a.u.) の実数成分の時間発展の様子 (赤: 正値、青: 負値)

円形量子ドットによる磁場共鳴トンネル伝導(3)

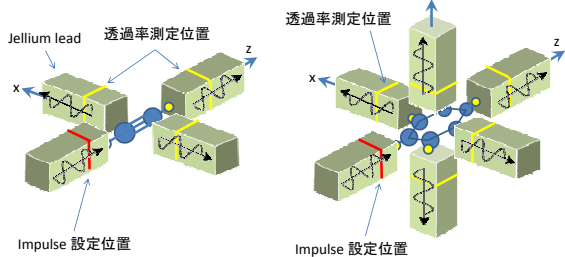


磁場を印加したときにだけ見られる共鳴トンネル伝導

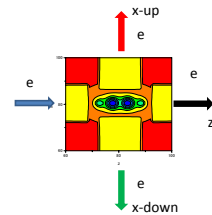
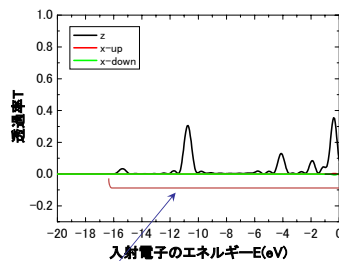


分子軌道による共鳴トンネル伝導

Jellium leadを用いたacetyleneとbenzeneの電子輸送特性シミュレーション



acetylene 分子



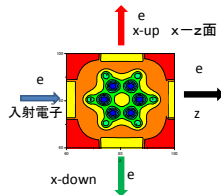
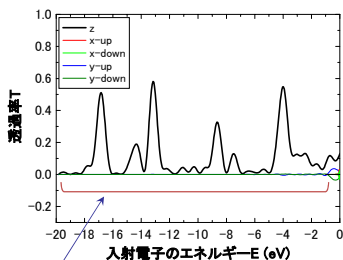
共鳴トンネル伝導によるピーク

(リード分子間ポテンシャル障壁高さより入射電子のエネルギーが小さくても、電子は共鳴トンネル伝導現象により透過する。)

特定のエネルギーの電子だけを透過させることが可能

トンネル伝導はz方向のみに発生し、x方向への電子の透過は生じなかった

benzene 分子



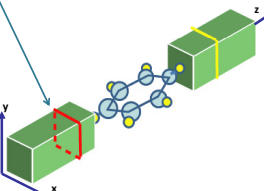
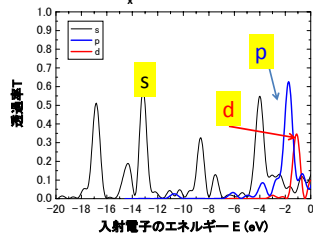
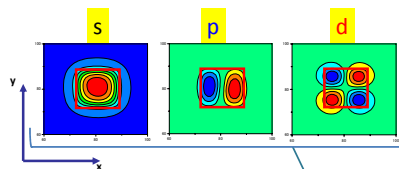
共鳴トンネル伝導によるピーク

(Lead-分子間ポテンシャル障壁高さより入射電子のエネルギーが小さくても、共鳴トンネル伝導現象により透過する。)

透過する電子のエネルギーはアセチレンとは異なる。

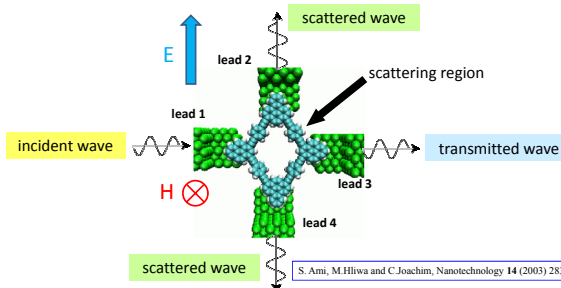
アセチレンと同様に、トンネル電流はz方向にのみ生じた

初期波導関数の固有振動モードと透過率



ベンゼン分子の共鳴トンネル透過率は、入射電子の固有状態に強く依存していることがわかった。

Future plans: Design of Molecular Multilead Devices



- ・電磁場下でのシミュレーション
- ・電子相関を取り入れた多体系でのシミュレーション

References

[Real-space finite-difference method]

J. R. Chelikowsky, N. Troullier, K. Wu and Y. Saad, Phys. Rev. B 50 11355 (1994).
K. Hirose, T. Ono, Y. Fujimoto and S. Tsukamoto, in First-Principles Calculations in Real-Space Formalism, Imperial College Press, London (2005).

[Impulse-response method]

H. Goto, T. Ono and K. Hirose, J. Phys.: Condens. Matter, 19, 365205 (2007).
T. Suzuki, H. Goto and K. Hirose, Surf. Interface Anal. 40, 1113 (2008).

[Negative Differential Conductance]

S. Tsukamoto and K. Hirose, Phys. Rev. B 66, 161402 (2002).
H. Goto, S. Aiba, T. Suzuki and K. Hirose, J. Comput. Theor. Nanosci. (2008) in press.