

# ОТКРЫТЫЕ КВАНТОВЫЕ БИЛЛИАРДЫ СО СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ: МЕТОД РАСЧЁТА ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ И КОНДАКТАНСА

Г.Г. Исупова, А.И. Малышев

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского*

malyshev@phys.unn.ru

Поступила 21.07.2011

Работа посвящена одному из методов расчёта волновой функции в открытых квантовых билиардах со спин-орбитальным взаимодействием, обсуждению вопросов его сходимости и его возможностей. В качестве примера рассматривается круглый билиард с входным и выходным каналами в присутствии спин-орбитального взаимодействия Рашбы и Дрессельхауза. Обсуждаются резонансные особенности зависимости проводимости такой системы от энергии носителей заряда.

УДК 538.915, 538.955, 538.935

## **Введение**

Как известно, спин-орбитальное взаимодействие (далее СОВ) определяет ряд фундаментальных эффектов в атомной физике и физике твёрдого тела. Это релятивистский эффект, возникновение которого качественно можно объяснить тем, что в системе координат, где электрон покоится, он «видит» магнитное поле движущихся на него ядер. Это поле действует на спин электрона – его собственный магнитный момент – и определяет как электронные квантовые состояния, так и многочисленные транспортные и оптические эффекты.

Интерес к изучению явлений, связанных с СОВ, в последние годы резко возрос, обсуждаются самые разные предложения, касающиеся использования спиновой степени

свободы при построении новых приборов и устройств (см., например, обзоры [1-3]). Весьма перспективным «материалом» в этом смысле является двумерный электронный газ – множество носителей заряда, запертых в тонком слое гетероструктуры. Прикладывая дополнительно отрицательный электрический потенциал к электродам, размещенным над электронным газом, можно различным образом ограничивать движение носителей заряда, формируя квазиодномерные каналы, квантовые точки и т.п.

Структура, изучению свойств которой посвящена настоящая работа – открытый квантовый бильярд, – по сути, является квантовой точкой с подведенными к ней квазиодномерными каналами. И несмотря на то, что бильярды давно известны как объекты теоретических и экспериментальных исследований не только классического хаоса, но и квантового [4], работ, связанных с изучением квантовых бильярдных с СОВ, не так уж и много (см., например, [5-9]).

Что же касается вычислительной стороны задач, связанных с решением уравнения Шрёдингера в структурах с бильярдом, здесь известен ряд методов, применяющихся как к открытым системам, так и к закрытым (т.е. не имеющим каких-либо входных/выходных отверстий). Так можно назвать, например, подход, связанный с простой дискретизацией уравнения Шрёдингера на двумерной сетке, метод рекурсивной функции Грина [10], метод граничных элементов [11-13], метод ограничивающего оператора [14] и т.д. Каждый из них, безусловно, имеет как свои преимущества, так и недостатки, поскольку любой численный метод представляет собой результат компромисса между желаемой точностью и необходимыми для её достижения ресурсами.

В настоящей работе речь пойдет об одном из вариантов метода, связанного с разложением волновой функции в области бильярда по плоским волнам (см., например, [15]). Известно, что при постоянной потенциальной энергии в качестве базиса для разложения волновой функции можно использовать решение стационарного уравнения Шрёдингера для свободной частицы, имеющее вид плоских волн. Тонкость заключается в том, чтобы обеспечить выполнение нулевых граничных условий на стенках бильярда, что требует надлежащего отбора волн, входящих в суперпозицию. Одна из методик, позволяющих произвести такой отбор, была предложена Накамурой и Ишио в [16] (см. также [17, 18]). Непосредственной целью настоящей работы явилось применение этого метода к задаче об открытом квантовом бильярде с двумя примыкающими к нему каналами с учётом СОВ, обсуждение вопросов, касающихся его сходимости, а также тех возможностей, что он предоставляет.

Работа построена следующим образом. Первые два раздела являются вводными, в них излагается материал, необходимый в основной части работы: приведено решение стационарного уравнения Шрёдингера для двумерного электронного газа с СОВ, а также для двумерного электронного газа, запертого в узком (квазиодномерном) канале, также с учётом СОВ. Раздел 3 служит постановке задачи с открытым бильярдом, а также изложению метода её решения. Разделы 4 и 5 посвящены выяснению вопросов сходимости предложенного метода и обсуждению получаемых с его помощью результатов.

## **1. Двумерный электронный газ с СОВ**

При изложении материала настоящего раздела работы будут приведены лишь основные соотношения, необходимые далее: за более глубоким введением в физику СОВ отошлём заинтересованного читателя к обзорной работе Хомицкого [19].

Итак, известно, что при описании двумерного электронного газа используются две модели СОВ – взаимодействие Рашбы [20] с гамильтонианом

$$\hat{H}_R = \frac{\alpha}{\hbar} (\hat{\sigma}_x \hat{p}_y - \hat{\sigma}_y \hat{p}_x), \quad (1)$$

а также взаимодействие Дрессельхауза [21]:

$$\hat{H}_D = \frac{\beta}{\hbar} (\hat{\sigma}_x \hat{p}_x - \hat{\sigma}_y \hat{p}_y). \quad (2)$$

Здесь  $\hat{\sigma}_x$  и  $\hat{\sigma}_y$  – матрицы Паули. Конкретная форма гамильтониана, описывающего СОВ, зависит от симметрии кристалла или низкоразмерной структуры, при этом в большинстве случаев вклады Рашбы и Дрессельхауза в СОВ присутствуют одновременно, а отношение параметров  $\alpha/\beta$  лежит в диапазоне от 1.5 до 2.2 (см., например, [22]).

Если кинетическая энергия определяется параболическим законом дисперсии с эффективной массой  $m$ , а потенциальная энергия постоянна, то квантовые состояния частицы с СОВ описываются гамильтонианом:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{\alpha}{\hbar} (\hat{\sigma}_x \hat{p}_y - \hat{\sigma}_y \hat{p}_x) + \frac{\beta}{\hbar} (\hat{\sigma}_x \hat{p}_x - \hat{\sigma}_y \hat{p}_y). \quad (3)$$

В силу коммутации операторов  $\hat{p}_x$ ,  $\hat{p}_y$  и  $\hat{H}$ , решение стационарного уравнения Шрёдингера удобно искать в виде произведения плоской волны на неизвестный двухкомпонентный спинор:

$$\psi = e^{i\vec{k}\vec{r}} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Подставляя (4) в уравнение Шрёдингера, найдем энергетический спектр

$$E_\lambda(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \lambda \sqrt{(\alpha k_y + \beta k_x)^2 + (\alpha k_x + \beta k_y)^2} \quad (5)$$

и компоненты спинора. Волновая функция в итоге примет следующий вид:

$$\psi_{\lambda, \vec{k}} = \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda e^{i\varphi(\vec{k})} \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Здесь  $\varphi(\vec{k}) = \text{Arg}[\alpha(k_y - ik_x) + \beta(k_x - ik_y)]$ , а  $\lambda = \pm 1$  – дискретное квантовое число, которое соответствует двум ветвям исходного параболического спектра, расщеплённого СОВ.

При занулении одной из констант СОВ (что потребуется далее), например  $\beta$ , закон дисперсии принимает более простой вид:

$$E_\lambda(k_x, k_y) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \lambda \alpha k. \quad (7)$$

При этом фиксированному значению энергии отвечают состояния, расположенные в плоскости  $(k_x, k_y)$  на окружностях радиусов

$$k_\pm = \frac{\sqrt{2mE + m^2 \alpha^2 / \hbar^2} \mp m\alpha / \hbar}{\hbar}, \quad (8)$$

где индексы « $\pm$ » указывают на знак соответствующего квантового числа  $\lambda$ . Подробности см. в п.1.3 работы [19].

## 2. Квантовые состояния в квазиодномерном канале с СОВ

Рассмотрим теперь двумерный электронный газ в бесконечном канале в присутствии СОВ типа Дрессельхауза. В этом случае гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\beta}{\hbar} (\hat{\sigma}_x \hat{p}_x - \hat{\sigma}_y \hat{p}_y) + V(y), \quad (9)$$

где  $V(y)$  описывает бесконечно-глубокую потенциальную яму:

$$V(y) = \begin{cases} 0, & \text{при } |y| < d/2, \\ \infty, & \text{при } |y| \geq d/2. \end{cases} \quad (10)$$

Поскольку в условиях данной задачи  $p_x$  – интеграл движения, решение стационарного уравнения Шрёдингера имеет следующую структуру:

$$\psi = \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a(y) \\ b(y) \end{pmatrix}, \quad (11)$$

где функции  $a(y)$  и  $b(y)$  удовлетворяют нулевым граничным условиям на стенках канала.

Определение явного вида этих функций может проводиться различными способами. Один из этих способов заключается в поиске функций  $a(y)$  и  $b(y)$  в виде разложения по собственным функциям поперечных мод в канале без СОВ:

$$a(y) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cdot \varphi_n(y) \quad \text{и} \quad b(y) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \cdot \varphi_n(y), \quad (12)$$

где  $\varphi_n = \sqrt{2/d} \sin(\pi n(y + d/2)/d)$ . Это обеспечивает автоматическое выполнение нулевых граничных условий (см., например, [23]).

Прежде, чем перейти непосредственно к анализу расчётных данных, необходимо определиться с используемыми единицами измерений. Так, примем безразмерные постоянную Планка и эффективную массу носителей за единицу. Приняв за  $l_0$  единицу длины, определим тем самым единицу энергии  $e_0 = \hbar^2/ml_0^2$  и единицу измерения константы СОВ  $\beta_0 = \hbar^2/ml_0$ .

Пример энергетического спектра в канале с СОВ Дрессельхауза, нормированного для удобства на энергию первой поперечной моды  $E_1 = \pi^2 \hbar^2/2md^2$ , представлен на рис. 1. Легко видеть, что он состоит из серии ветвей, расщепленных СОВ. Если рассмотреть нижнюю пару ветвей, то фиксированному значению энергии будут отвечать четыре состояния – волны с волновыми векторами  $\pm k_1$  и  $\pm k_2$ , бегущие вправо и влево вдоль канала. При этом пара состояний с волновыми векторами  $k_1$  и  $-k_2$  отличается от пары состояний с векторами  $-k_1$  и  $k_2$  спиновой поляризацией: компоненты спиновой плотности  $\bar{s}_i(x, y) = \hbar/2 \cdot \psi^\dagger \hat{\sigma}_i \psi$  в каждой точке пространства имеют противоположные знаки (см. рис. 2). Заметим, что  $\bar{s}_y(x, y) \equiv 0$ , поскольку функции  $a(y)$  и  $b(y)$  здесь могут быть выбраны действительными.

При рассмотрении СОВ типа Рашбы решение уравнения Шрёдингера имеет качественно тот же вид, однако теперь действительной компоненте спинора  $a(y)$  отвечает чисто мнимая компонента  $b(y)$  и наоборот, что приводит к занулению  $x$ -компоненты спиновой плотности:  $\bar{s}_x(x, y) \equiv 0$ .

По отношению к рассмотренным выше четырём состояниям можно заметить полезное свойство: скалярное произведение  $\chi_{ij}$  спиновых частей волновых функций  $i$ -го и  $j$ -го состояний с одинаковой спиновой поляризацией в случае СОВ Дрессельхауза равно  $\pm 2$ , а для СОВ Рашбы  $\pm 2i$ . Для состояний с разной спиновой поляризацией  $\chi_{ij} = 0$ .

### 3. Транспортные свойства открытого бильярда с СОВ

Теперь обратимся к расчёту транспортных характеристик открытого бильярда типа «круг» (рис. 3) методом, изложенным в работе [16], с учётом СОВ. Для определенности выберем модель СОВ Дрессельхауза. Таким образом, необходимо решить стационарное уравнение Шрёдингера с гамильтонианом:

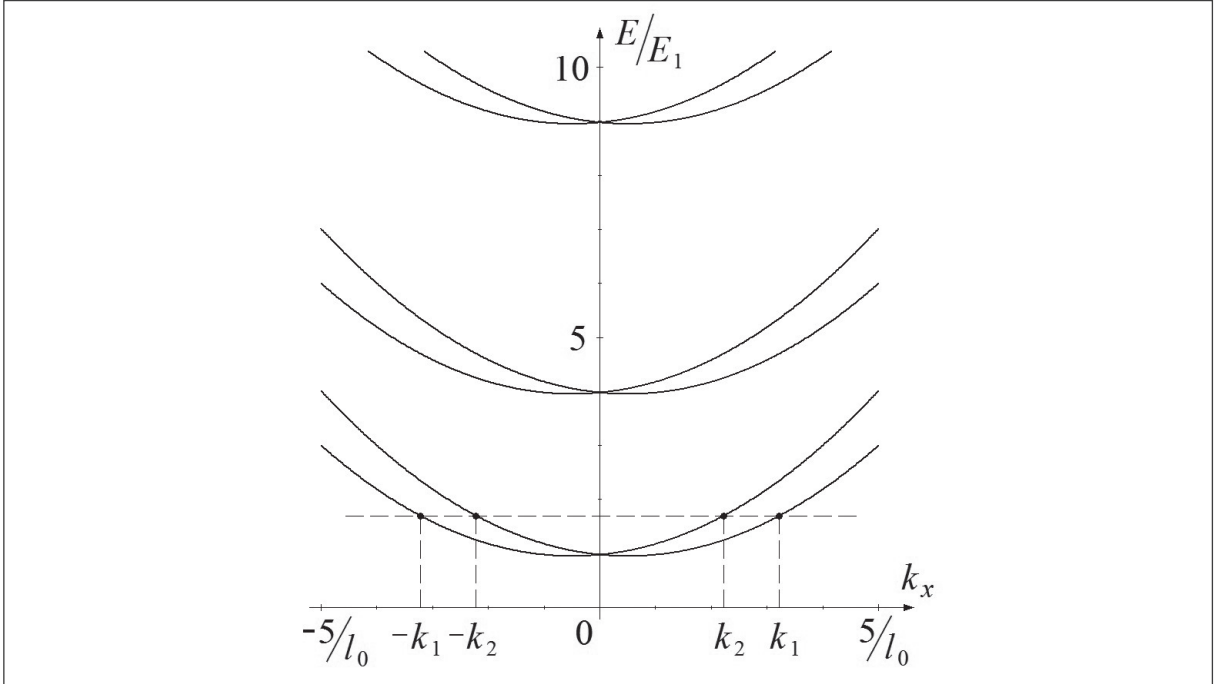


Рис. 1. Фрагмент энергетического спектра электрона в квазиодномерном канале с СОВ Дрессель-хауза. Здесь  $\beta/\beta_0 = 0.5$ ,  $d/l_0 = 1$ .

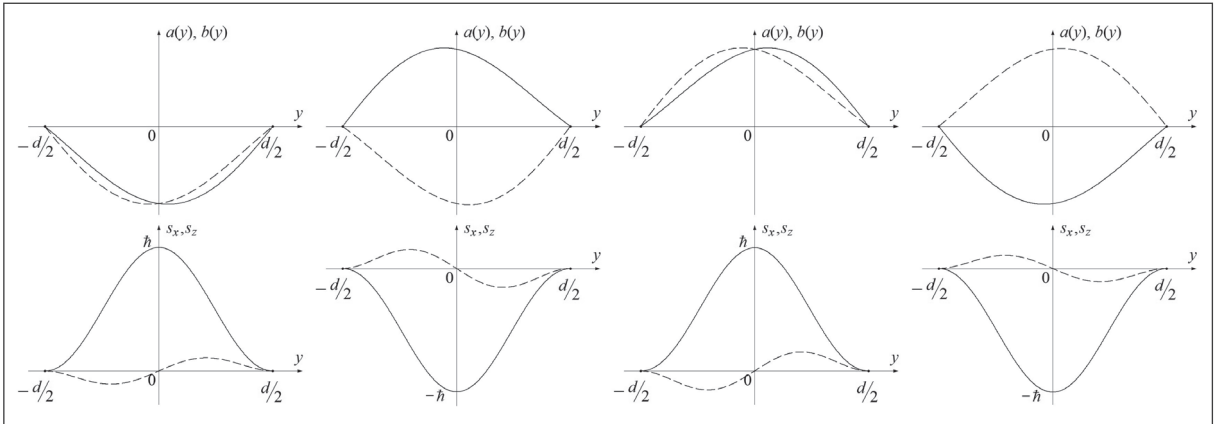


Рис. 2. Компоненты спиноров  $a(y)$  (сплошная линия) и  $b(y)$  (пунктирная линия), а также компоненты спиновой плотности  $s_x(y)$  (сплошная линия) и  $s_z(y)$  (пунктирная линия) как функции поперечной координаты  $y$  квазиодномерного канала для состояний с волновыми векторами  $-k_1$ ,  $-k_2$ ,  $k_2$  и  $k_1$  (слева направо), отмеченных на рис. 1. Заметим, что интегралы от  $a^2(y)$  и  $b^2(y)$  на отрезке  $[-d/2, d/2]$  равны единице, интеграл от  $s_x(y)$  даёт  $\hbar/2$ , а интеграл от  $s_z(y)$  равен нулю. Параметры те же, что на рис. 1.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\beta}{\hbar} (\hat{\sigma}_x \hat{p}_x - \hat{\sigma}_y \hat{p}_y) + V(x, y), \quad (13)$$

где  $V(x, y)$  описывает бесконечный скачок потенциала на границе биллиарда и примыкающих к нему каналов.

Рассматривая первую пару ветвей спектра (см. рис. 1), будем придерживаться следующей постановки задачи. Пусть в канал 1 (слева) входит волна с волновым вектором  $k_1$ , а в канал 2 (справа) распространяются прошедшие волны с волновыми векторами  $k_1$  и  $k_2$ , с амплитудами  $c_1$  и  $c_2$  соответственно. В канале 1 при этом распространяются

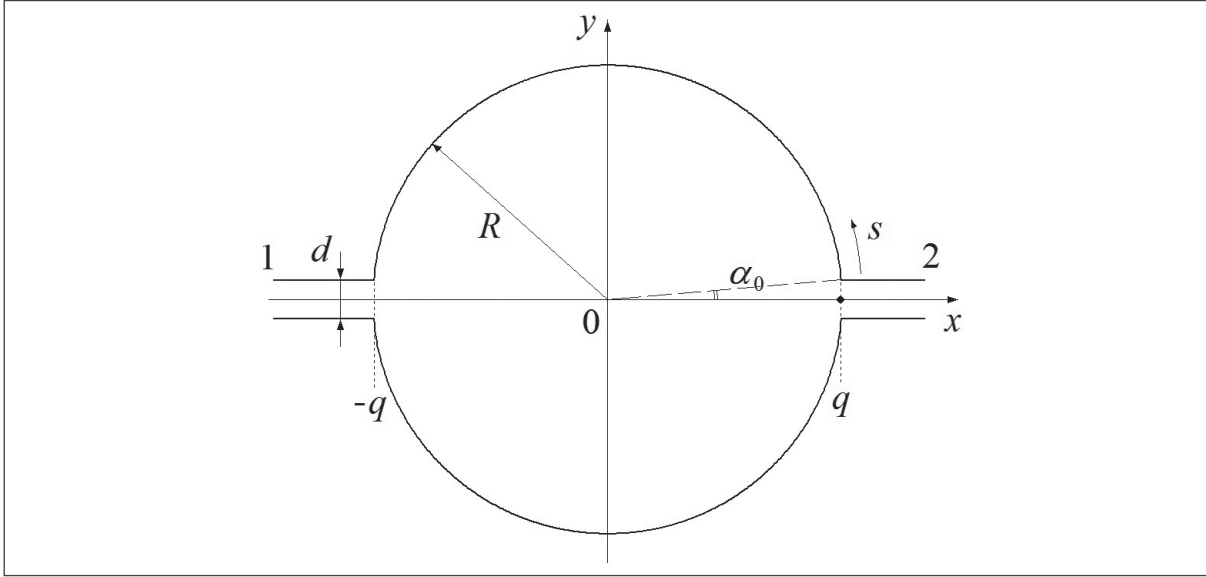


Рис. 3. Изучаемая система с круглым бильярдом. Начало отсчета координаты  $s$  показано точкой в середине правого канала.

и отражённые волны с волновыми векторами  $k_3 = -k_1$  и  $k_4 = -k_2$ , с амплитудами  $c_3$  и  $c_4$  соответственно. Таким образом, волновая функция имеет следующий вид

$$\psi_{out,1}(x, y) = \frac{e^{ik_1(x+q)}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a^{(1)}(y) \\ b^{(1)}(y) \end{pmatrix} + c_3 \frac{e^{ik_3(x+q)}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a^{(3)}(y) \\ b^{(3)}(y) \end{pmatrix} + c_4 \frac{e^{ik_4(x+q)}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a^{(4)}(y) \\ b^{(4)}(y) \end{pmatrix} \quad (14)$$

во входном канале и

$$\psi_{out,2}(x, y) = c_1 \frac{e^{ik_1(x-q)}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a^{(1)}(y) \\ b^{(1)}(y) \end{pmatrix} + c_2 \frac{e^{ik_2(x-q)}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a^{(2)}(y) \\ b^{(2)}(y) \end{pmatrix} \quad (15)$$

в выходном. Здесь  $q = \sqrt{R^2 - d^2/4}$ . Во внутренней области бильярда решение запишем в виде суперпозиции плоских волн

$$\psi_{in}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{d}} \int_0^{2\pi} c(\theta) e^{ik_+(x \cos \theta + y \sin \theta)} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\theta} \end{pmatrix} d\theta + \frac{1}{\sqrt{d}} \int_0^{2\pi} d(\theta) e^{ik_-(x \cos \theta + y \sin \theta)} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\theta} \end{pmatrix} d\theta, \quad (16)$$

где  $\theta$  – угол в плоскости  $(k_x, k_y)$ , отсчитываемый от положительного направления оси  $k_x$ , а  $k_{\pm}$  определяется аналогично (8). Потребуем далее выполнения нулевых граничных условий для  $\psi_{in}$  на стенках бильярда, а также условий непрерывности и гладкости  $\psi$ -функции:

$$\begin{cases} \psi_{out,j}|_{x=q_j} = \psi_{in}|_{x=q_j}, \\ \left. \frac{d\psi_{out,j}}{dx} \right|_{x=q_j} = \left. \frac{d\psi_{in}}{dx} \right|_{x=q_j}, \end{cases} \quad (17)$$

что даст возможность рассчитать как амплитуды  $c_i$ , так и функции  $c(\theta)$  и  $d(\theta)$ .

Следуя далее методу, изложенному в [16], сшиваем в первую очередь производные волновой функции в местах примыкания каналов. С учетом условий ортогональности, о которых говорилось в заключение раздела 2, сшивка приводит к системе линейных уравнений относительно коэффициентов  $c_i$ , решение которой имеет вид:

$$c_1 = J_1(q), \quad c_2 = J_2(q), \quad c_3 = J_3(-q), \quad c_4 = J_4(-q) + \chi_{41} k_1 / 2k_4, \quad (18)$$

где введены обозначения

$$J_j(q) = \frac{1}{2k_j} \left( \int_0^{2\pi} c(\theta) k_+ \cos \theta e^{ik_+ \cos \theta q} \left( \sum_{m=1}^{\infty} a_m^{(j)*} g_m(k_+) + e^{-i\theta} \sum_{m=1}^{\infty} b_m^{(j)*} g_m(k_+) \right) d\theta + \right. \\ \left. + \int_0^{2\pi} d(\theta) k_- \cos \theta e^{ik_- \cos \theta q} \left( \sum_{m=1}^{\infty} a_m^{(j)*} g_m(k_-) - e^{-i\theta} \sum_{m=1}^{\infty} b_m^{(j)*} g_m(k_-) \right) d\theta \right), \quad (19)$$

а также

$$g_m(k) = \sqrt{\frac{2}{d}} \int_{-d/2}^{d/2} e^{ik \sin \theta y} \varphi_m(y) dy = \frac{2\pi m}{(kd \sin \theta)^2 - (\pi m)^2} \cdot \left( e^{i \frac{kd}{2} \sin \theta} (-1)^m - e^{-i \frac{kd}{2} \sin \theta} \right). \quad (20)$$

Рассмотрим далее замкнутый контур, проходящий по границе билиарда и включающий в себя отрезки прямых в областях примыкания каналов. Введем координату  $s$ , отсчитываемую вдоль этого контура от середины выходного канала против часовой стрелки. Очевидно, что любая функция  $F(s)$ , заданная на подобном замкнутом контуре, имеет период  $\Lambda$ , равный его периметру. Это позволяет разложить данную функцию в ряд Фурье:

$$F(s) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} F_l e^{i2\pi \frac{s}{\Lambda}}. \quad (21)$$

Система равенств между соответствующими коэффициентами рядов Фурье для функций  $\psi_{in}(s)$  и  $\psi_{out}(s)$  способна заменить как нулевые граничные условия на стенках билиарда, так и условие непрерывности волновой функции [16].

Ставя в соответствие паре чисел  $(x, y)$  значение координаты  $s$ , раскладываем далее функции  $\psi_{in}(s)$  и  $\psi_{out}(s)$  в ряд Фурье. Набор равенств  $\psi_{in,l} = \psi_{out,l}$  приводит в свою очередь к системе интегральных уравнений следующего вида:

$$\int_0^{2\pi} c(\theta) A_l(\theta) d\theta + \int_0^{2\pi} d(\theta) B_l(\theta) d\theta = D_l, \quad (22)$$

где введены обозначения:

$$A_l(\theta) = \sum_{i=1}^2 S_i^+(q) \begin{pmatrix} \sum_n a_n^{(i)} f_{nl} \\ \sum_m b_m^{(i)} f_{ml} \end{pmatrix} - \sum_{i=3}^4 S_i^+(-q) \begin{pmatrix} \sum_n a_n^{(i)} (-1)^{n+l} f_{nl} \\ \sum_m b_m^{(i)} (-1)^{m+l} f_{ml} \end{pmatrix} + (I_{1l}(k_+) + I_{2l}(k_+)) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\theta} \end{pmatrix}, \quad (23)$$

$$B_l(\theta) = \sum_{i=1}^2 S_i^-(q) \begin{pmatrix} \sum_n a_n^{(i)} f_{nl} \\ \sum_m b_m^{(i)} f_{ml} \end{pmatrix} - \sum_{i=3}^4 S_i^-(-q) \begin{pmatrix} \sum_n a_n^{(i)} (-1)^{n+l} f_{nl} \\ \sum_m b_m^{(i)} (-1)^{m+l} f_{ml} \end{pmatrix} + (I_{1l}(k_-) + I_{2l}(k_-)) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\theta} \end{pmatrix}, \quad (24)$$

$$D_l = \begin{pmatrix} \sum_n a_n^{(1)} (-1)^{n+l} f_{nl} \\ \sum_m b_m^{(1)} (-1)^{m+l} f_{ml} \end{pmatrix} + \frac{\chi_{41} k_1}{2k_4} \begin{pmatrix} \sum_n a_n^{(4)} (-1)^{n+l} f_{nl} \\ \sum_m b_m^{(4)} (-1)^{m+l} f_{ml} \end{pmatrix}, \quad (25)$$

$$f_{nl} = \frac{\pi m d \cdot (-1)^n}{(2\pi d / \Lambda)^2 - (\pi m)^2} \left( e^{i\pi d / \Lambda} - (-1)^n e^{-i\pi d / \Lambda} \right), \quad (26)$$

$$S_j^\pm(q) = \frac{k_\pm}{2k_j} \cos \theta e^{ik_\pm q \cos \theta} \left( \sum_{m=1}^{\infty} a_m^{(j)*} g_m(k_\pm) \pm e^{-i\theta} \sum_{m=1}^{\infty} b_m^{(j)*} g_m(k_\pm) \right), \quad (27)$$



$$I_{1l}(k) = e^{ikq \cos \theta} \cdot \frac{2 \sin \left( \frac{d}{2} \cdot \left( k \sin \theta - \frac{2\pi l}{\Lambda} \right) \right)}{k \sin \theta - \frac{2\pi l}{\Lambda}} + (-1)^l e^{-ikq \cos \theta} \cdot \frac{2 \sin \left( \frac{d}{2} \cdot \left( k \sin \theta + \frac{2\pi l}{\Lambda} \right) \right)}{k \sin \theta + \frac{2\pi l}{\Lambda}}, \quad (28)$$

$$I_{2l}(k) = \int_{\alpha_0}^{\pi - \alpha_0} e^{-i \frac{2\pi l}{\Lambda} \left( \frac{d}{2} + R(\alpha - \alpha_0) \right)} \left( e^{i k R (\cos \theta \cos \alpha + \sin \theta \sin \alpha)} + e^{-i \pi l} e^{-i k R (\cos \theta \cos \alpha + \sin \theta \sin \alpha)} \right) R d\alpha, \quad (29)$$

а также  $\alpha_0 = \arcsin(d/2R)$  (см. рис. 3). Суммы по  $n$  и  $m$ , стоящие в выражениях для  $A_l(\theta)$ ,  $B_l(\theta)$  и  $D_l$ , берутся в пределах от единицы до бесконечности.

Решением системы уравнений (22) являются функции  $c(\theta)$  и  $d(\theta)$ , которые в свою очередь позволяют рассчитать все коэффициенты  $c_i$ . Таким образом, задача о нахождении волновой функции в системе оказывается полностью решенной.

Последнее замечание будет относиться к СОВ Рашбы. Учет этой модели СОВ в описанном методе не имеет каких-либо особенностей по сравнению с моделью Дресельхауза: достаточно лишь произвести в (16), (22) и последующих выражениях замену  $\exp(-i\theta)$  на  $-i \exp(i\theta)$ .

#### 4. Определение области сходимости численной схемы

Решить систему интегральных уравнений (22) аналитически невозможно и приходится прибегать к дискретизации интегралов по переменной  $\theta$ . В результате эта система преобразуется в систему линейных уравнений относительно коэффициентов  $c(\theta_n)$  и  $d(\theta_n)$ , где  $\theta_n$  – значения угла  $\theta$  в узлах сетки ( $n = 0, 1, \dots, N$ ). Чтобы количество уравнений соответствовало количеству неизвестных, необходимо ограничить также и число учитываемых гармоник в рядах Фурье (21). При этом представляется естественным при дискретизации интегралов взять шаг как можно меньше, а также учесть как можно больше Фурье-гармоник. Однако тут возникает проблема, связанная с плохой обусловленностью решаемой системы уравнений, которая проявляется в том, что при увеличении числа учитываемых гармоник в системе появляются уравнения с малыми коэффициентами. Это приводит к возникновению большой погрешности при нахождении решений системы, что фатально сказывается на сходимости численных схем. Таким образом, количество уравнений должно быть конечным, а уже в соответствии с ним следует выбирать и число узлов сетки при дискретизации интегралов.

Применительно к бильярдам круглой формы вместо плоских волн в (16) в качестве базиса можно использовать решение уравнения Шрёдингера для свободной частицы в полярных координатах [24]. Безусловно, это лучше отражает симметрию задачи, однако не улучшает качественно сходимость метода. В этой связи в работе [13] функции Бесселя, используемые при разложении волновой функции в радиальном направлении, были перенормированы с той целью, чтобы на границе бильярда функции с различными номерами имели сравнимые амплитуды. Как показывает анализ, сходимость метода при этом заметно улучшается.

Проблемы сходимости могут быть вызваны также и тем, что производная волновой функции вдоль периметра бильярда (по переменной  $s$ ) претерпевает разрыв в местах излома контура. Следовательно, сам контур должен быть по возможности максимально гладким. Применительно к бильярду круглой формы это означает, что радиус внутренней области  $R$  должен быть заметно больше ширины каналов  $d$ .

Поскольку вопрос сходимости используемого метода отнюдь не тривиален, он требует отдельного рассмотрения. Так одной из естественных характеристик сходимости



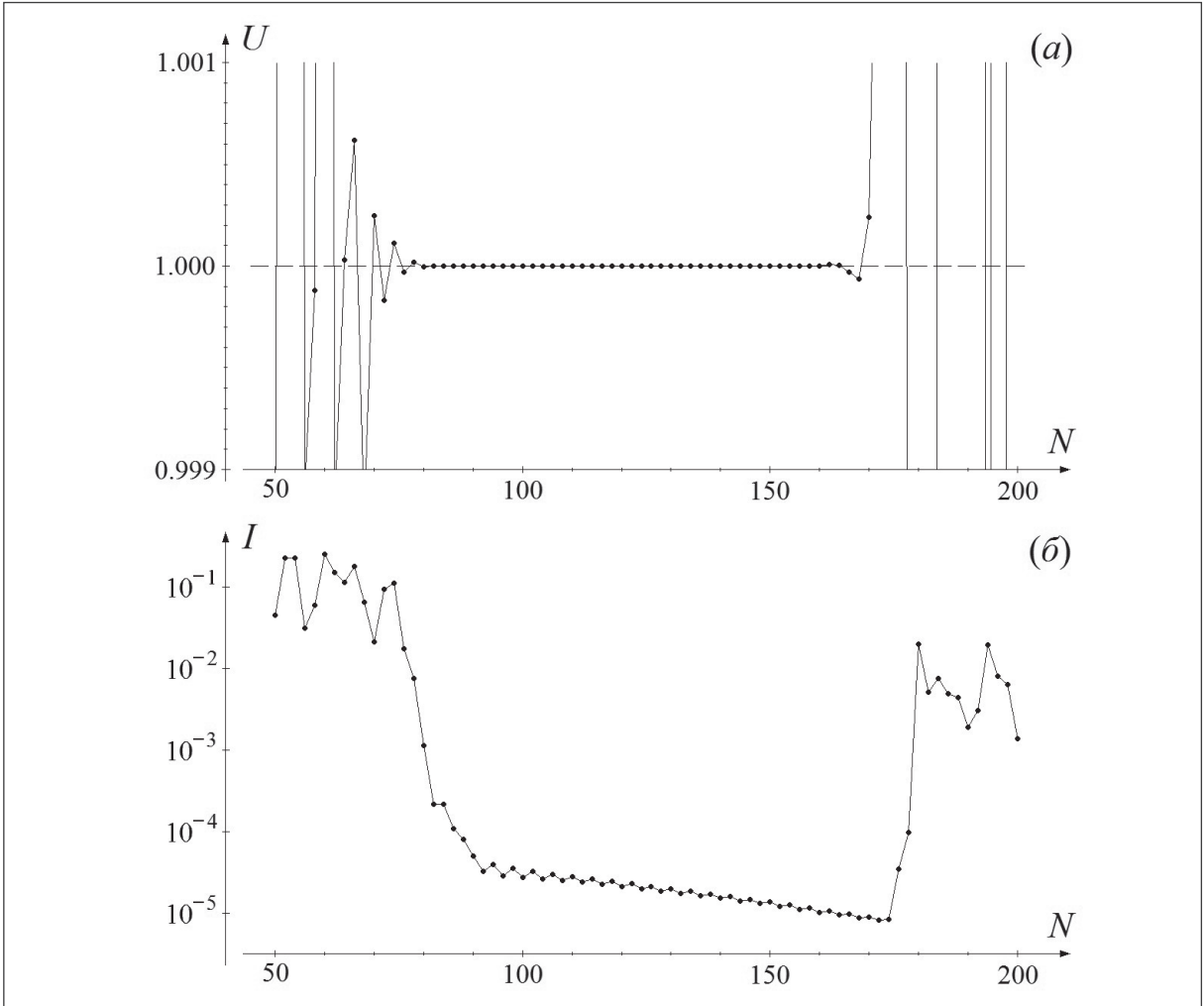


Рис. 4. Зависимости параметров  $U$  и  $I$  от частоты дискретизации  $N$  для  $k_F d/\pi = 1.005$ ,  $R/l_0 = 15$ ,  $d/l_0 = 1$ ,  $\beta/\beta_0 = 0.003$ .

является выполнение условий нормировки волновой функции. В связи с этим, введем величину  $U = \sum_{i=1}^4 |c_i|^2$  и будем следить за степенью её отклонения от единицы. В качестве другой характеристики возьмем интеграл от квадрата модуля волновой функции  $\psi_{in}$  по участку границы билиарда – дуге окружности радиуса  $R$ :

$$I = \int_{R\alpha_0}^{R(\pi-\alpha_0)} |\psi_{in}(s)|^2 ds. \quad (30)$$

Вследствие нулевых граничных условий этот интеграл в идеале должен равняться нулю, однако при численном решении задачи этот ноль, безусловно, не достигается. С другой стороны, надлежащим подбором размера системы уравнений интеграл  $I$  может быть минимизирован, насколько это вообще возможно.

На рис. 4 (а, б) представлены примеры зависимостей параметров  $U$  и  $I$  от частоты дискретизации  $N$ , который принимает лишь чётные значения, поскольку при дискретизации интегралов в системе уравнений (22) использовался метод парабол. При этом индекс  $l$ , нумерующий гармоники рядов Фурье, изменяется соответственно от  $-N/2$  до  $N/2$ . Из рис. 3 ясно видна довольно широкая область по  $N$  (приблизительно от 90 до 170), внутри которой параметр  $U$  отличается от единицы менее чем на  $10^{-4}$ , а также интеграл  $I$  принимает вполне допустимые значения, причем имеет тенденцию к уменьшению с возрастанием  $N$ . Общий довольно большой размер области сходимости

позволяет, в частности, при проведении каких-либо грубых, оценочных расчетов работать вблизи нижней её границы, беря  $N$  в районе 90-100. С другой стороны, при необходимости достижения лучшей точности правильнее выбирать значения  $N$  в области правой границы, т.е. в данном случае 150-170.

При обсуждении сходимости необходимо отметить, что ориентироваться только лишь на нормировку волновой функции, как это было, например, в [13], недостаточно. Так, например, при  $N = 76 \dots 78$  отличие  $U$  от единицы уже менее  $10^{-4}$ , что, в общем, вполне удовлетворительно. При этом, однако, значения  $I$  лежат в области  $10^{-2}$ , что, безусловно, далеко от идеала и на три порядка превышает реально достижимые значения.

С возрастанием характерных значений волнового вектора  $k_F$ , характеризующего полную энергию – энергию Ферми ( $E = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ ), и, соответственно, с уменьшением характерных масштабов длин волн вся область сходимости плавно сдвигается в сторону больших значений  $N$ . При этом, проведя анализ сходимости посредством параметров  $U$  и  $I$ , и определив тем самым оптимальные значения  $N$  при различных значениях энергии, становится возможным проведение расчетов в широком диапазоне значений  $k_F$ .

## 5. Расчёт транспортных характеристик

В результате решения задачи о нахождении волновой функции в открытой структуре с билиардом появляется возможность анализировать как особенности распределения плотности вероятности, так и компонент спиновой плотности, а также рассчитывать проводимость. Последняя в данном случае может быть найдена по формуле Ландауэра:

$$G = \frac{e^2}{h} (|c_1|^2 + |c_2|^2). \quad (31)$$

Пример зависимости проводимости от  $k_F$  в системе без СОВ, а также с СОВ Дрессельхауза представлен на рис. 5.

Интересным фактом является то, что амплитуда  $c_2$  не даёт вклада в расчёт проводимости: во всех экспериментах её абсолютная величина не превышала  $10^{-5}$ . То же самое относится и к амплитуде  $c_3$ . Таким образом, при прохождении и отражении волн в исследуемом билиарде не меняется их спиновая поляризация. Это согласуется с данными работы [8], где сохранение спиновой поляризации было доказано аналитически для произвольного билиарда с СОВ Рашбы. Чрезвычайно важен при этом тот факт, что внутри билиарда в равной мере распространяются волны обеих поляризаций: слабые  $c(\theta)$  и  $d(\theta)$  в (16) имеют один порядок величины.

Несмотря на то, что решение вопроса о сходимости описанного метода требует весьма деликатного подхода, сам метод позволяет наблюдать и достаточно тонкие эффекты. К примеру, было замечено (см. рис. 5 (а, б)), что включение СОВ приводит к появлению на зависимости проводимости от  $k_F$  дополнительных асимметричных резонансов типа Фано (см. обзор [25] и ссылки в нём). На рис. 5(б) легко обнаружить шесть таких резонансов. Причем увеличение константы СОВ приводит лишь к уширению этих резонансов, практически не сказываясь на их положении. Под «шириной» резонансов Фано в данном случае имеется в виду расстояние  $\Delta k_F$  между «единицей» и «нулём» резонанса. График зависимости этой величины от параметра СОВ Дрессельхауза приведен на рис. 6; результаты относятся к первым двум таким резонансам, отмеченным на рис. 5(б) цифрами 1 и 2. Угловые коэффициенты обеих аппроксимирующих прямых с хорошей точностью равны 4.0, откуда следует, что ширина резонансов Фано, вызванных включением СОВ в изучаемой системе, оказывается пропорциональной

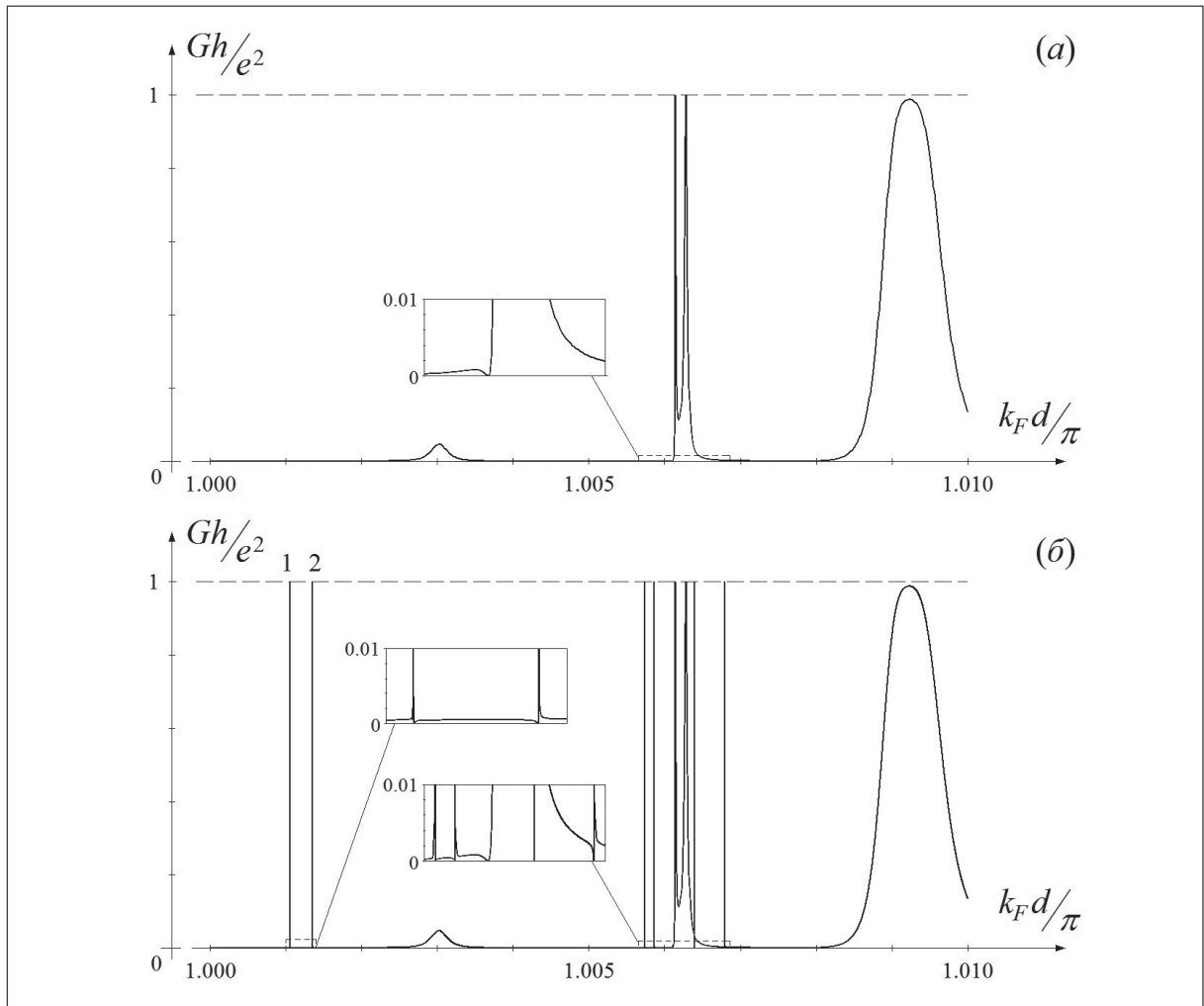


Рис. 5. Фрагмент зависимости кондактанса открытой системы с биллиардом от модуля волнового вектора  $k_F$  в системе без СОВ (а), а также с СОВ Дрессельхауза (б),  $\beta/\beta_0 = 0.003$ . На вставках показаны увеличенные фрагменты графиков.

четвертой степени параметра СОВ. По-видимому, в такой ситуации есть все основания говорить об известном явлении коллапса резонансов Фано [26, 27], происходящем в данном случае при стремлении константы СОВ к нулю, хотя этот вопрос, безусловно, заслуживает отдельного обсуждения.

В заключении приведем некоторые численные оценки. Так, если выбрать ширину входного и выходного каналов, к примеру, равной 30 нм, то диаметр самого биллиарда составит 0.9 мкм. Ориентируясь на величину эффективной массы электронов проводимости в GaAs  $0.067m_e$ , получим единицу измерения константы СОВ, равную 38.5 мЭВ·нм. В этой ситуации значения постоянной СОВ Дрессельхауза от нуля до  $0.01\beta_0$  соответствуют интервалу от нуля до 0.38 мЭВ·нм. Это меньше тех значений, что имеет место в реальных структурах (снова заметим, что все обсуждаемые здесь результаты справедливы также и для СОВ Рашбы, причём при тех же численных значениях параметра  $\alpha$ , что брались для константы СОВ Дрессельхауза). Оправданием тому служит желание пронаблюдать область параметров с малой интенсивностью СОВ, при которой стало возможным выделить степенной закон в зависимости ширины резонансов от параметра СОВ.

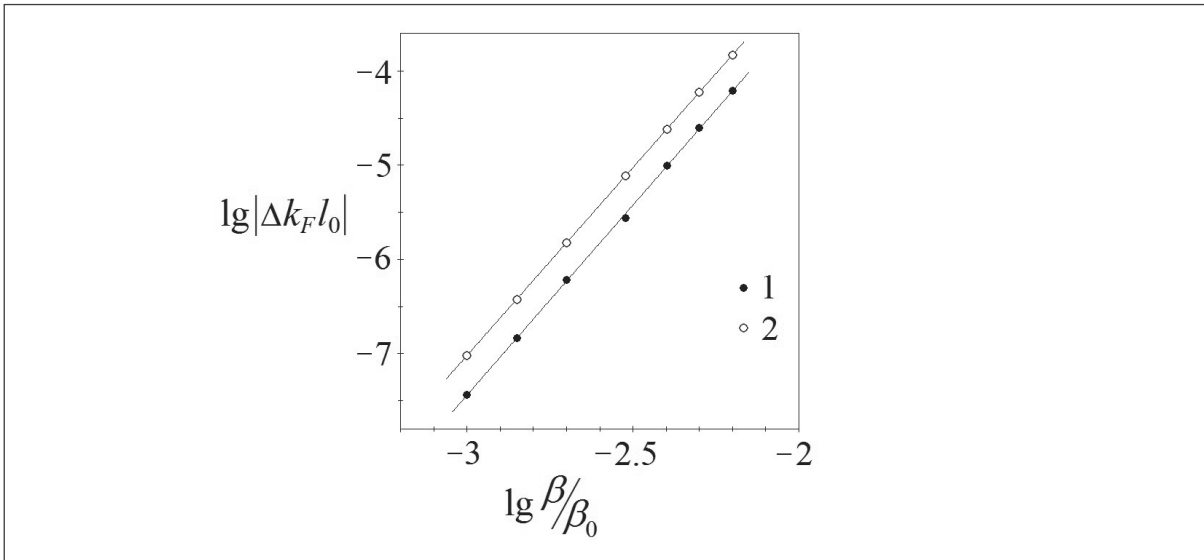


Рис. 6. Пример зависимости «ширины» резонансов Фано, отмеченных на рис. 5(б) как «1» и «2», от константы СОВ. Угловые коэффициенты прямых, проведённых по методу наименьших квадратов, равны соответственно 4.03 и 3.99.

### Заключение

Итак, подведем итоги настоящей работы. В ней обсуждается один из методов расчёта двухкомпонентной волновой функции в открытом круглом бильярде с СОВ. В его основе лежит метод, предложенный в работе [16] и применяемый ранее для открытых бильярдов типа «круг» и «стадион» с различным расположением входных и выходных каналов [16-18]. На примере СОВ типа Дрессельхауза и Рашбы определена область сходимости данного метода при различных значениях энергии. В частности, показано, что выполнение условий нормировки волновой функции с достаточной точностью еще не является надежным критерием сходимости метода.

Одним из физических результатов расчётов является экспериментальное установление факта того, что при прохождении через открытый бильярд спиновая поляризация состояния не изменяется; это согласуется с литературными данными [8].

Другой результат состоит в установлении факта появления на зависимости кондактанса от  $k_F$  дополнительных асимметричных резонансов типа Фано, вызванного «включением» в системе СОВ. По-видимому, это означает проявление эффекта коллапса резонансов Фано, происходящего при стремлении константы СОВ к нулю.

В заключение заметим, что обсуждаемый метод нахождения волновой функции в открытой системе с СОВ является достаточно быстрым, приводит к разумным результатам, а также позволяет наблюдать и весьма тонкие эффекты. По-видимому, с учетом всех замечаний, сделанных в разделе 4, в дальнейшем он может найти свое применение при решении подобных задач.

Авторы выражают благодарность А.М. Сатанину за полезные обсуждения как физической, так и математической стороны настоящей задачи. Работа выполнена при поддержке «Российского фонда фундаментальных исследований» (проект № 12-02-33063), а также фонда «Династия».

## Литература

1. *Wu M.W., Jianga J.H., and Weng M.Q.* Spin dynamics in semiconductors // *Phys. Rep.* 2010, V. 493, P. 61-236.
2. *Кусраев Ю.Г.* Спиновые явления в полупроводниках: физика и приложения // *УФН* 2010, Т. 180, С. 759-773.
3. *Awshalom D. and Flatte M.E.* Challenges for semiconductor spintronics // *Nature Physics* 2007, V. 3, P. 153-159.
4. *Штокман Х.-Ю.*, Квантовый хаос: Введение // М.: Физматлит, 2004.
5. *Krich J.J. and Halperin B.I.* Cubic Dresselhaus Spin-Orbit Coupling in 2D Electron Quantum Dots // *Phys. Rev. Lett.* 2007, V. 98, P. 226802-1-226802-4.
6. *Béri B., Bardarson J. H. and Beenakker C.W.J.* Effect of spin-orbit coupling on the excitation spectrum of Andreev billiards // *Phys. Rev. B* 2007, V. 75, P. 165307-1-165307-5.
7. *Cserti J., Csordás A., and Zülicke U.* Electronic and spin properties of Rashba billiards // *Phys. Rev. B* 2004, V. 70, P. 233307-1-233307-4.
8. *Bulgakov E.N. and Sadreev A.F.* Spin rotation for ballistic electron transmission induced by spin-orbit interaction // *Phys. Rev. B* 2002, V. 66, P. 075331-1-075331-11; Statistics of wave functions and currents induced by spin-orbit interaction in chaotic billiards // *Phys. Rev. E* 2004, V. 70, P. 056211-1-056211-6.
9. *Булгаков Е.Н., Садреев А.Ф.* Статистика собственных функций хаотических билиардов с учётом спин-орбитального взаимодействия Рашбы // *Письма в ЖЭТФ* 2003, Т. 78, Вып. 7, С. 911-914.
10. *Rotter S. et al* Modular recursive Green's function method for ballistic quantum transport // *Phys. Rev. B* 2000, V. 62, P. 1950-1960.
11. *De Mey G.* Calculation of eigenvalues of the Helmholtz equation by an integral equation // *Int. J. Num. Meth. Engng.* 1976, V. 10, P. 59-66.
12. *Riddell R. J.* Boundary-distribution solution of the Helmholtz equation for a region with corners // *J. Comp. Phys.* 1979, V. 31, P. 21-41; Numerical solution of the Helmholtz equation for two-dimensional polygonal regions // *J. Comp. Phys.* 1979, V. 31, P. 42-59.
13. *Schwieters C.D., Alford J.A., and Delos J.B.* Semiclassical scattering in a circular semiconductor microstructure // *Phys. Rev. B* 1996, V. 54, P. 10652-10657.
14. *McGrew D.A. and Bauer W.* Constraint operator solution to quantum billiard problems // *Phys. Rev. E* 1996, V. 54, P. 5809-5818.
15. *Heller E., O'Connor P. and Gehlen J.* The eigenfunctions of classically chaotic systems // *Phys. Scr.* 1989, V. 40, P. 354.
16. *Nakamura K. and Ishio H.* Quantum transport in open billiards: comparison between circle and stadium // *J. Phys. Soc. J.* 1992, V. 61, P. 3939-3944.
17. *Yang X., Ishio H., Burgdörfer J.* Statistics of magnetoconductance in ballistic cavities // *Phys. Rev. B* 1995, V. 52, P. 8219-8225.
18. *Ishio H., Burgdörfer J.* Quantum conductance fluctuation and classical short-path dynamics // *Phys. Rev. B* 1995, V. 51, P. 2013-2016.
19. *Хомичский Д.В.* Немагнитная спинтроника: моделирование спиновых текстур в наноструктурах со спин-орбитальным взаимодействием // *Наноструктуры. Мат. физика и моделир.* 2009, Т. 1, № 1, С. 83-113.
20. *Раушба Э.И.* Свойства полупроводников с петлей экстремумов. I. Циклотронный и комбинированный резонанс в магнитном поле, перпендикулярном плоскости петли // *ФТТ* 1960, Т. 2, В. 6, С. 1224-1238.
21. *Dresselhaus G.* Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures // *Phys. Rev.* 1955, V. 100, P. 580-586.
22. *Ganichev S.D. et al* Experimental Separation of Rashba and Dresselhaus Spin Splittings in Semiconductor Quantum Wells // *Phys. Rev. Lett.* 2004, V. 92, P. 256601-1-256601-4.
23. *Демиховский В.Я., Тележников А.В.* Zitterbewegung волновых пакетов и кондактанс квазиодномерного канала в присутствии спин-орбитального взаимодействия // *Пов. Рентг., синхр. и нейтр. иссл.* 2010, № 1, С. 1-9.
24. *Doron E., Smilansky U., and Frenkel A.* Chaotic scattering and transmission fluctuations // *Physica D* 1991, V. 50, P. 367-390.
25. *Yong S. J., Satanin A.M., and Kim C.S.* Classical analogy of Fano resonances // *Phys. Scr.* 2006, V. 74, P. 259-266.

26. Ким Ч.С., Сатанин А.М., Джо Ю.С., Косби Р.М. Коллапс резонансов в квазиодномерных квантовых каналах // ЖЭТФ 1999, Т. 116, Вып. 1(7), С. 263-275.
27. Ким Ч.С., Рознова О.Н., Сатанин А.М., Штенберг В.Б. Интерференция квантовых состояний в электронных волноводах с примесями // ЖЭТФ 2002, Т. 121, Вып. 5, С. 1157-1173.

## OPEN QUANTUM BILLIARDS WITH SPIN-ORBIT INTERACTION: METHOD OF CALCULATION OF WAVE FUNCTION AND CONDUCTANCE

G.G. Isupova, A.I. Malyshev

*Nizhniy Novgorod State University after N.I. Lobachevskiy*

malyshev@phys.unn.ru

Received 21.07.2011

This paper is devoted to the method of calculation of wave function in open quantum billiards with spin-orbit interaction. Its convergence and possibility are discussed. As an example circle billiard with two attached channels with spin-orbit interaction of Rashba and Dresselhaus types is considered. Resonance features of conductance dependence on electron energy are discussed.