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 биллиардах со спин-орбитальным взаимодействием, обсуждению вопросов его сходимости и его возможностей. В качестве примера рассматривается круглый биллиард 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 биллиард, – по сути, является квантовой точкой с подведенными к ней квазиодномерными каналами. И несмотря на то, что биллиарды давно известны как объекты теоретических и экспериментальных исследований не только классического хаоса, но и квантового [4], работ, связанных с изучением квантовых биллиардов 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 биллиардом, 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 биллиарда 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 биллиарда, 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 биллиарде 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 биллиардом, 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

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

а также взаимодействие Дрессельхауза [21]:

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

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 α/β 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:

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

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:

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

Подставляя (4) в уравнение Шрёдингера, найдем энергетический спектр

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

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

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

Здесь $\varphi\left(\vec{k}\right) = Arg\left[\alpha\left(k_y - ik_x\right) + \beta\left(k_x - ik_y\right)\right]$, 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 β, закон дисперсии принимает более простой вид:

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

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

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

где индексы «±» указывают на знак соответствующего квантового числа λ. 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

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

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

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

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

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

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:

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

где $\varphi_n=\sqrt{2/d}\,\sin\big(\pi n(y+d/2)/d\big)$. 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 $\bar{s}_i(x,y)=\hbar/2\cdot\psi^+\hat{\sigma}_i\psi$ 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 χ_{ij} спинорных частей волновых функций i-го и j-го состояний с одинаковой спиновой поляризацией в случае СОВ Дрессельхауза равно ±2, а для СОВ Рашбы ±2i. Для состояний с разной спиновой поляризацией $\chi_{ij}=0$.

3. Транспортные свойства открытого биллиарда с СОВ

Теперь обратимся к расчёту транспортных характеристик открытого биллиарда 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:

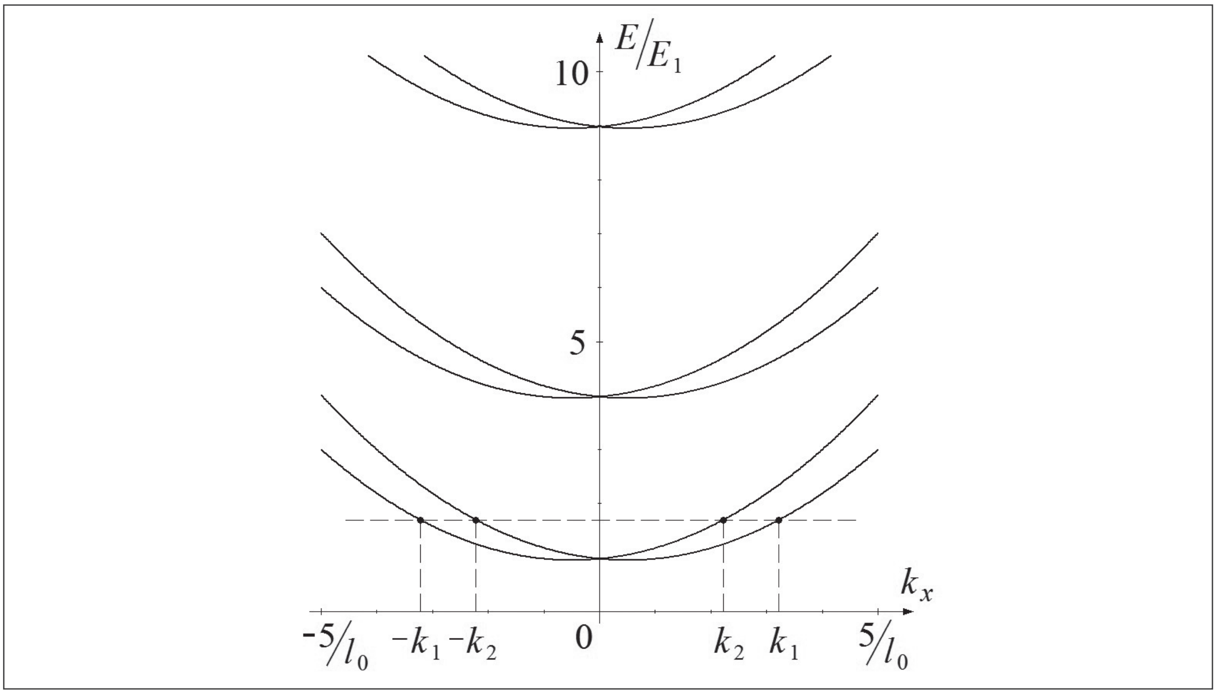

Рис. 1. Фрагмент энергетического спектра электрона в квазиодномерном канале с СОВ Дрессельхауза. Здесь $\beta/\beta_0 = 0.5$, $d/l_0 = 1$.

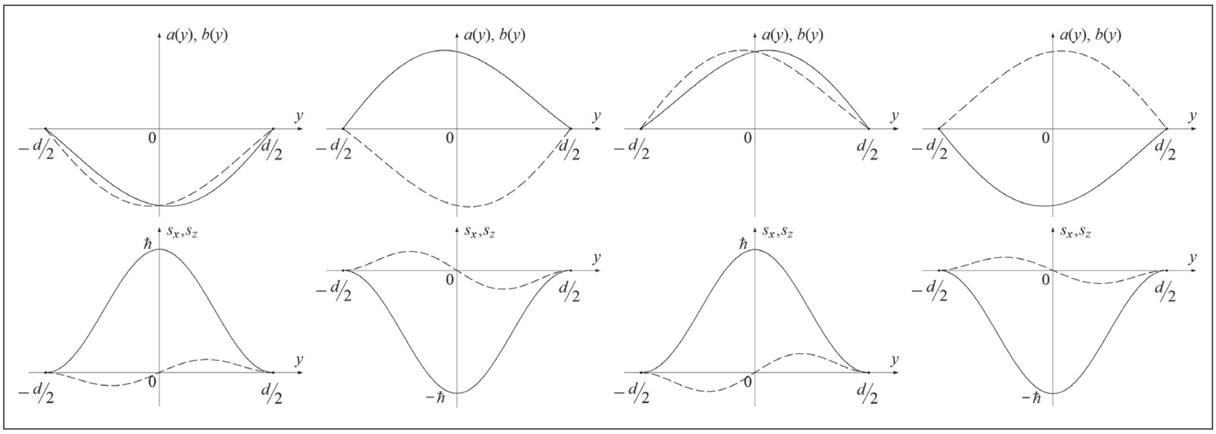

Рис. 2. Компоненты спиноров $a(y)$ (сплошная линия) и $b(y)$ (пунктирная линия), а также компоненты спиновой плотности $s_x(y)$ (сплошная линия) и $s_z(y)$ (пунктирная линия) как функции поперечной координаты y квазиодномерного канала для состояний с волновыми векторами $-k_1$, $-k_2$, k_2 и k_1 (слева 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.

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

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 канале 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

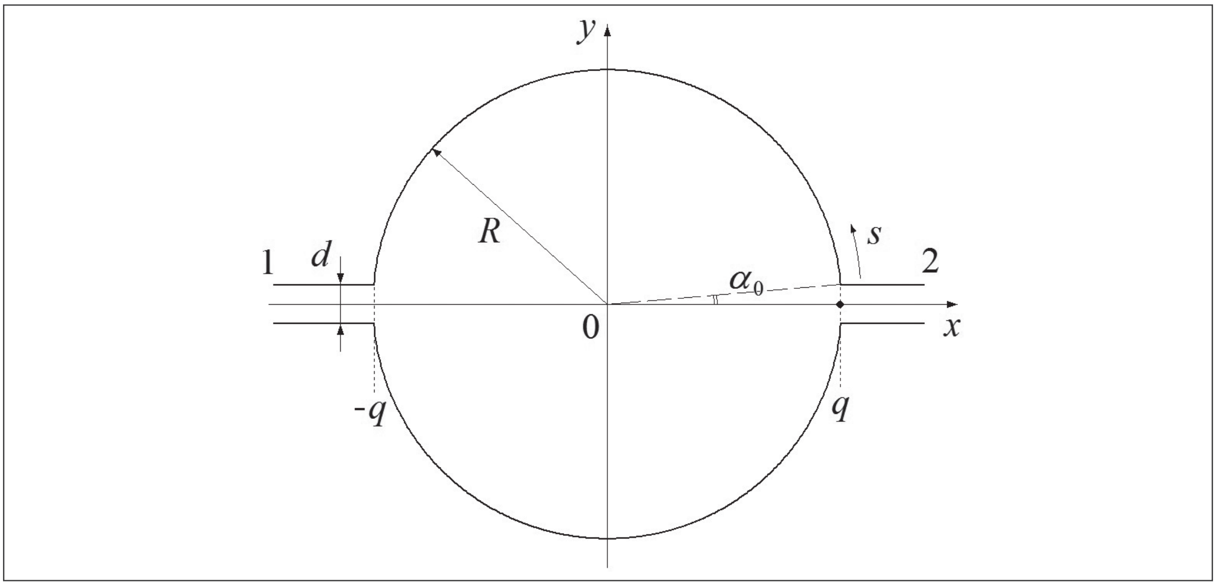

Рис. 3. Изучаемая система с круглым биллиардом. Начало отсчета координаты s показано точкой в середине правого канала.

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

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

во входном канале и

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

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

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

где θ – 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 ψ_{in} на стенках биллиарда, а также условий непрерывности и гладкости ψ-функции:

$$\begin{cases} \psi_{out,j}\big|_{x=q_j} = \psi_{in}\big|_{x=q_j}, \\ \dfrac{d\psi_{out,j}}{dx}\bigg|_{x=q_j} = \dfrac{d\psi_{in}}{dx}\bigg|_{x=q_j}, \end{cases} \tag{17}$$

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:

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

где введены обозначения

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

а также

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

Рассмотрим далее замкнутый контур, проходящий по границе биллиарда 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 Λ, равный его периметру. Это позволяет разложить данную функцию в ряд Фурье:

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

Система равенств между соответствующими коэффициентами рядов Фурье для функций $\psi_{in}(s)$ и $\psi_{out}(s)$ способна заменить как нулевые граничные условия на стенках биллиарда, 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:

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

где введены обозначения:

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

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

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

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

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

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

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

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 Дрессельхауза: 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 θ. В результате эта система преобразуется в систему линейных уравнений относительно коэффициентов $c(\theta_n)$ и $d(\theta_n)$, где θ_n – значения угла θ в узлах сетки ($n=0,1,\ldots,N$). 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 биллиардам 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 биллиарда 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 биллиарда (по переменной s) претерпевает разрыв в местах излома контура. Следовательно, сам контур должен быть по возможности максимально гладким. Применительно к биллиарду 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

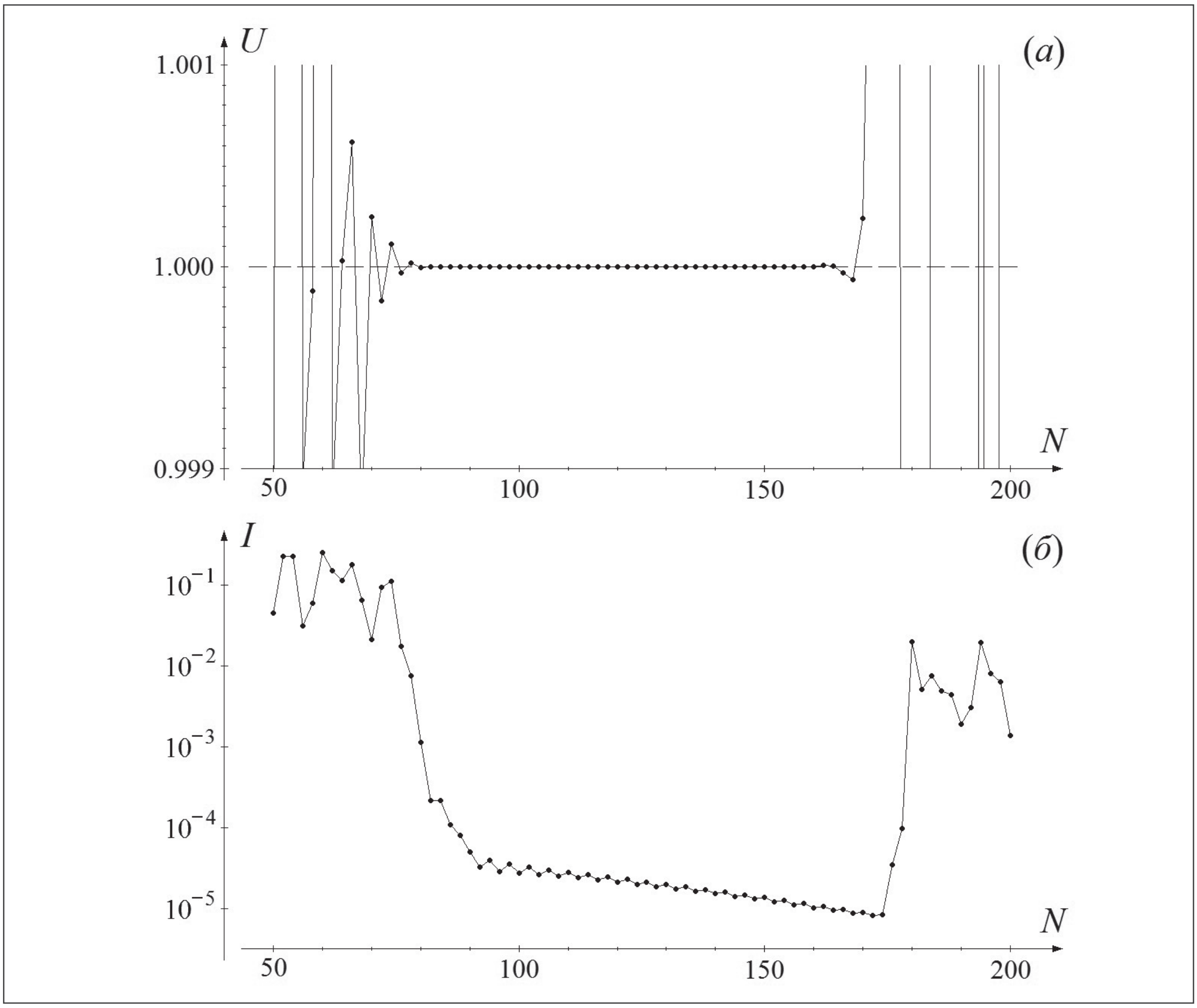

Рис. 4. Зависимости параметров U и I от частоты дискретизации N для $k_F d/\pi = 1.005$, $R/l_0 = 15$, $d/l_0 = 1$, $\beta/\beta_0 = 0.003$.

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 ψ_{in} по участку границы биллиарда – дуге окружности радиуса R:

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

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 $N = 76\ldots78$ 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 $\left(E = \hbar^2 k_F^2 / 2m\right)$, 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 биллиардом 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:

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

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 биллиарде не меняется их спиновая поляризация. Это согласуется с данными работы [8], где сохранение спиновой поляризации было доказано аналитически для произвольного биллиарда с СОВ Рашбы. Чрезвычайно важен при этом тот факт, что внутри биллиарда в равной мере распространяются волны обеих поляризаций: слагаемые с $c(\theta)$ 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 Δk_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

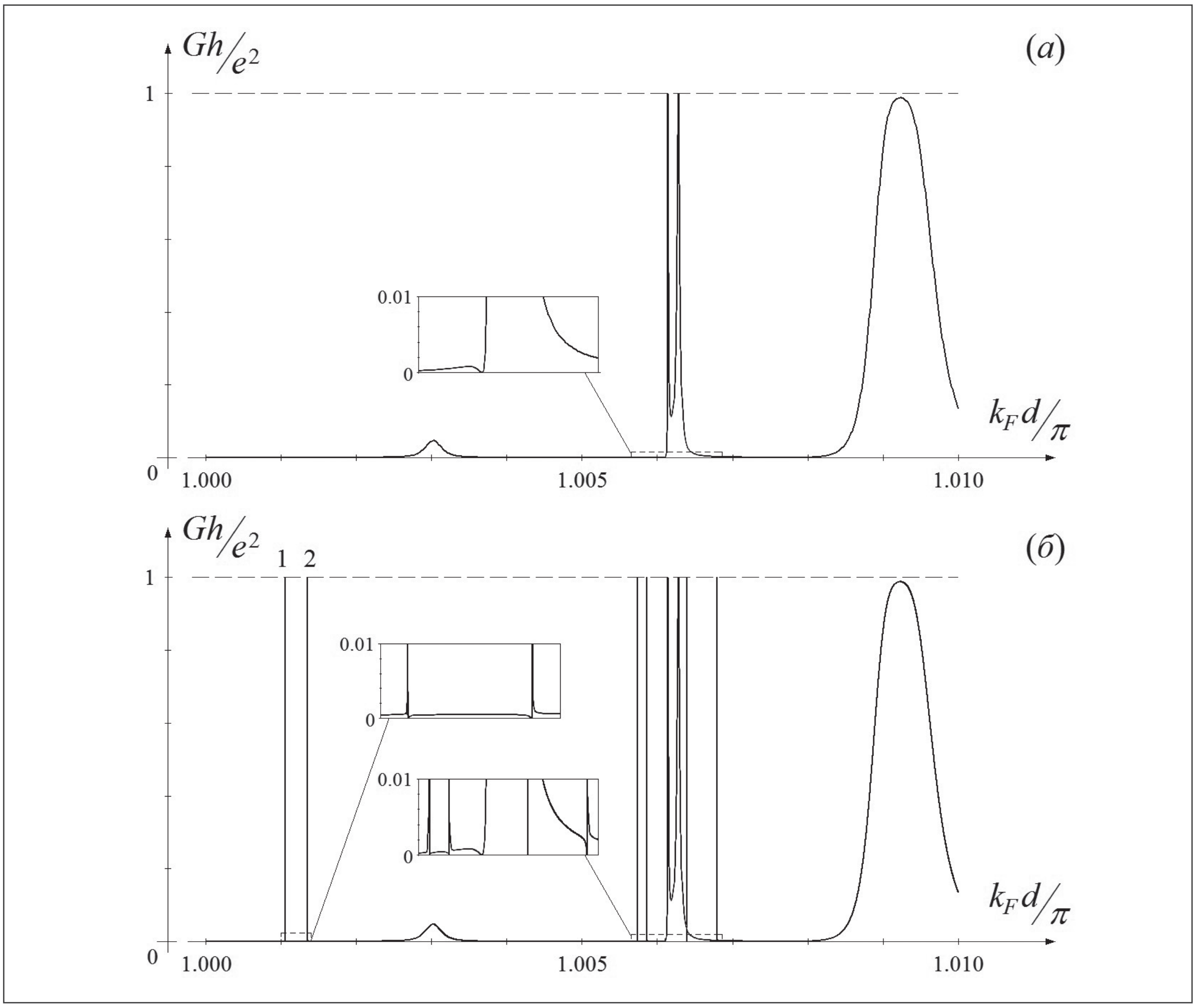

Рис. 5. Фрагмент зависимости кондактанса открытой системы с биллиардом от модуля волнового вектора k_F в системе без СОВ (*а*), а также с СОВ Дрессельхауза (*б*), $\beta/\beta_0 = 0.003$. На вставках показаны увеличенные фрагменты графиков.

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 α, 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.

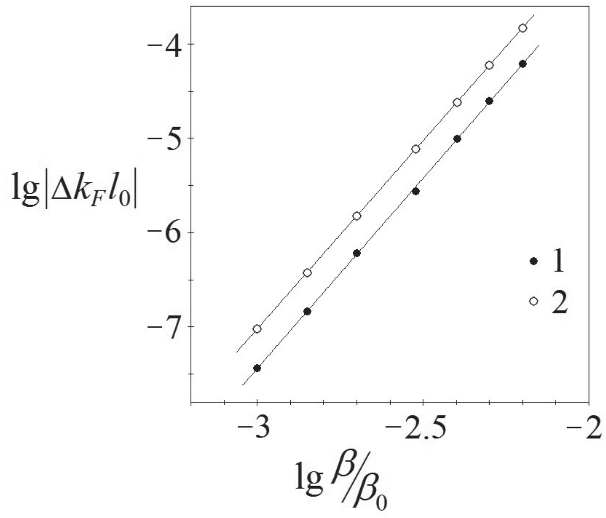

Рис. 6. Пример зависимости «ширины» резонансов Фано, отмеченных на рис. 5(*б*) как «1» и «2», от константы СОВ. Угловые коэффициенты прямых, проведённых по методу наименьших квадратов, равны соответственно 4.03 и 3.99.

Заключение

Итак, подведем итоги настоящей работы. В ней обсуждается один из методов расчёта двухкомпонентной волновой функции в открытом круглом биллиарде с СОВ. В его основе лежит метод, предложенный в работе [16] и применяемый ранее для открытых биллиардов 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 биллиард 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 биллиардов 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. *Хомицкий 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. *Рашба 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.