03,05

Влияние обменного взаимодействия на спиновые флуктуации локализованных электронов

© Д.С. Смирнов, М.М. Глазов, Е.Л. Ивченко

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия E-mail: smirnov@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 24 июня 2013 г.)

Построена микроскопическая теория спиновых флуктуаций ансамбля электронов, локализованных на донорах в объемном полупроводнике. Учитывается как сверхтонкое взаимодействие электронного спина с ядерными спинами основной решетки, так и обменное взаимодействие между электронами. Разработана модель кластеров для расчета спектров спинового шума ансамбля локализованных носителей заряда. Показано, что межэлектронное обменное взаимодействие приводит к эффективному усреднению случайных ядерных полей и сдвигу пика в спектре спиновых флуктуаций к более низким частотам.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, гранта Президента РФ НШ-5442.2012.2, Министерства образования и науки (контракт 11.G34.31.0067 с СПбГУ и ведущим ученым А.В. Кавокиным), фонда Династия — МЦФФМ и гранта EC SPANGL4Q.

1. Введение

Бурное развитие полупроводниковой спинтроники и поиск систем со сверхдлинными временами спиновой релаксации носителей заряда привели к развитию экспериментальных методик изучения спиновой динамики. Одним из наиболее перспективных методов такого рода является спектроскопия спинового шума, предложенная Александровым и Запасским более тридцати лет назад для исследования магнитного резонанса в атомных газах [1] (см. также [2]) и развитая в последние годы для изучения динамики спинов в объемных полупроводниках, квантовых ямах и квантовых точках [3–9] (см. также обзоры [10,11]). Наряду с этим экспериментально и теоретически исследуются спиновый шум ядер [12] и флуктуации спинового тока [13,14].

Спектроскопия спинового шума основана на пропускании через образец зондирующего линейно поляризованного луча и измерении флуктуаций углов фарадеевского или керровского вращения, а также эллиптичности. Эти флуктуации характеризуются корреляционными функциями, которые связаны с автокорреляционной функцией компонент спина $\langle S_z(t)S_z(t')\rangle$, где ось z — направление распространения зондирующего луча. Фурьеобраз спинового коррелятора характеризует интенсивность спиновых флуктуаций, он содержит информацию о распределении частот спиновой прецессии и о временах спиновой релаксации и/или дефазировки.

В работе [15] развита теория спиновых флуктуаций в ансамблях электронов и дырок, локализованных в квантовых точках. В частности, было показано, что спектр спинового шума отражает особенности распределения случайных ядерных полей, которые играют определяющую роль в дефазировке спинов локализованных носителей заряда. Другой перспективной системой с точки зрения исследования спиновых шумов является ансамбль доноров или акцепторов в объемных полупроводниках [16]. При низких температурах и не слишком высоких концентрациях примесей электроны и дырки локализованы, и их спины эффективно взаимодействуют со спинами ядер решетки. Именно в таких системах можно достичь предельно длинных времен спиновой релаксации электронов [17–19]. Однако в объемных полупроводниках для локализованных электронов существенную роль может играть обменное взаимодействие между ними [19,20].

Цель настоящей работы состоит в теоретическом исследовании проявлений обменного взаимодействия между электронами в спектрах их спиновых флуктуаций.

2. Модель

Рассматривается ансамбль электронов, локализованных на донорах в объемном полупроводнике типа GaAs. Учитывается сверхтонкое взаимодействие электронного спина с окружающими ядерными спинами, а также обменное взаимодействие между локализованными электронами. Гамильтониан такой системы может быть представлен в виде

$$\hat{\mathscr{H}} = \hbar \sum_{i} \Omega_{i} \hat{\mathbf{s}}_{i} + \sum_{i \neq k} J_{ik} \hat{\mathbf{s}}_{i} \hat{\mathbf{s}}_{k}.$$
 (1)

Здесь нижние индексы *i*, *k* нумеруют доноры, $\hat{\mathbf{s}}_i$ — оператор спина электрона с компонентами $\sigma_x^{(i)}/2$, $\sigma_y^{(i)}/2$, $\sigma_z^{(i)}/2$, где $\sigma_a^{(i)}$ ($\alpha = x, y, z$) — матрицы Паули, действующие на спиновые переменные *i*-го электрона (точнее говоря, электрона, локализованного на *i*-м доноре), Ω_i — частота прецессии спина электрона в поле ядерной флуктуации, $J_{ik} = J_{ki}$ — константа обменного взаимодействия *i*-го и *k*-го электронов. Последняя экспоненци-

ально зависит от расстояния между донорами R_{ik} [21,22]:

$$J_{ik} \approx 0.82 \mathscr{R} \left(\frac{R_{ik}}{a_{\rm B}} \right)^{5/2} \exp \left(-2 \frac{R_{ik}}{a_{\rm B}} \right).$$

Здесь \mathcal{R} и $a_{\rm B}$ — электронный ридберг и боровский радиус соответственно (в GaAs $\mathcal{R} \approx 4$ meV, $a_{\rm B} \approx 120$ Å); предполагается, что $R_{ik} \gg a_{\rm B}$. В равновесии ядерные спиновые флуктуации описываются распределением Гаусса [15,23]

$$\mathscr{F}_{\delta_e}(\Omega) = \frac{1}{\pi^{3/2} \delta_e^3} \exp\left(-\frac{\Omega^2}{\delta_e^2}\right),\tag{3}$$

где величина δ_e характеризует дисперсию флуктуаций: $\langle \Omega^2 \rangle = 3 \delta_e^2 / 2$. Типичная величина частоты спиновой прецессии в поле ядерной флуктуации в арсениде галлия составляет $\sqrt{\langle \Omega^2 \rangle} \sim 2 \cdot 10^8$ s⁻¹ [16,23], так что при расстоянии между донорами $\sim 0.1\,\mu{
m m}$ межэлектронное обменное взаимодействие сопоставимо со сверхтонким. Это соответствует концентрации доноров $n_d = 10^{14} - 10^{15} \,\mathrm{cm}^{-3}$. Отметим, что в GaAs переход изолятор-металл происходит при значительно больших концентрациях доноров: $\sim 2 \cdot 10^{16} \, {\rm cm}^{-3}$ [19]. Таким образом, для описания спинового шума электронов, локализованных на донорах в объемных полупроводниках, даже при достаточно низком уровне легирования следует учитывать конкуренцию обменного взаимодействия между электронами и сверхтонкого взаимодействия спинов электронов и ядер. Анализ этой конкуренции является основной целью настоящей работы.

Детектирование спиновых флуктуаций осуществляется путем измерения флуктуаций спиновых эффектов Фарадея, Керра или эллиптичности пробного (зондирующего) линейно поляризованного луча света, падающего на образец [2,4,7]. Пусть зондирующий луч сфокусирован в пятно площадью S на поверхности образца, толщина образца L и несущая частота зондирующего луча ω₀ несколько меньше частоты фундаментального края поглощения E_g/\hbar (E_g — ширина запрещенной зоны), так что луч распространяется в области слабого поглощения. Мгновенные значения угла фарадеевского или керровского вращения, а также наведенной эллиптичности определяются флуктуациями полного спина $\hat{\mathbf{S}} = \sum_{i=1}^{N} \hat{\mathbf{s}}_i$ подсистемы из $N = n_d LS$ электронов в объеме засветки лучом зондирования. В соответствии с этим введем корреляционную функцию $\langle \hat{S}_{\alpha}(t+\tau)\hat{S}_{\beta}(t)\rangle$ компонент полного спина этой подсистемы, где угловые скобки обозначают усреднение по времени t при фиксированной разнице времен т [15,24-26]. Удобно ввести также корреляционную функцию $\langle s_{\alpha}(t+\tau)s_{\beta}(t)\rangle$ и спектр мощности $(s_{\alpha}s_{\beta})_{\omega}$ спиновых флуктуаций, нормированные на одну частицу, согласно

$$\langle s_{\alpha}(t+\tau)s_{\beta}(t)\rangle = \frac{1}{N} \langle \hat{S}_{\alpha}(t+\tau)\hat{S}_{\beta}(t)\rangle,$$

$$(s_{\alpha}s_{\beta})_{\omega} = \int_{-\infty}^{\infty} \langle s_{\alpha}(t+\tau)s_{\beta}(t)\rangle e^{i\omega\tau} d\tau.$$

$$(4)$$

Далее представлен расчет указанных корреляционных функций. Введем базисные состояния $|n\rangle$, $|m\rangle$ и т.д., отвечающие собственным значениям E_n , E_m , ... гамильтониана (1). Воспользовавшись представлением Гейзенберга для операторов проекций полного спина, получаем [27]

$$(s_{\alpha}s_{\beta})_{\omega} = \frac{2^{1-N}\pi}{N} \sum_{n,m} \langle n|\hat{S}_{\alpha}|m\rangle \langle m|\hat{S}_{\beta}|n\rangle \Delta \left(\omega - \frac{E_n - E_m}{\hbar}\right).$$
(5)

Здесь суммирование ведется по всем собственным состояниям системы, введена уширенная δ-функция

$$\Delta(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\tau_s}{1 + (x\tau_s)^2},$$

 τ_s — время релаксации одиночного спина, не связанное со сверхтонким или обменным взаимодействием, оно выступает в качестве феноменологического параметра теории и предполагается одинаковым для всех электронов. При выводе (5) предполагается, что температура системы Т, выраженная в энергетических единицах, значительно превосходит характерные расщепления между уровнями энергии $|E_n - E_m|$, поэтому усреднение в (5) выполняется по равновесной матрице плотности, отвечающей равнозаселенным состояниям. Это условие заведомо выполнено в экспериментах по спектроскопии спинового шума, проводимых при температурах вплоть до гелиевых, поскольку характерные расщепления между уровнями n и m, обусловленные как обменным, так и сверхтонким взаимодействием, соответствуют $T \sim 10^{-3}$ К.

3. Спиновый шум в модели кластеров

Непосредственный расчет спектров спинового шума по общей формуле (5) не представляется возможным, поскольку в типичных экспериментальных условиях, когда концентрация доноров составляет $n_d = 10^{14} \, \mathrm{cm}^{-3}$, площадь пятна зондирования $S > 1000 \, \mu m^2$, а толщина области зондирования L > 10 µm, число доноров в объеме зондирования превышает 10⁶. Однако экспоненциальная зависимость константы обменного взаимодействия J_{ik} от расстояния между донорами приводит к тому, что взаимодействие между достаточно далекими электронами оказывается несущественным. Таким образом, обменное взаимодействие является важным только для групп доноров, расположенных достаточно близко друг от друга. Это позволяет разработать подход для расчета спектров спинового шума, аналогичный теории протекания и используемый для анализа эффектов электронного транспорта в неупорядоченных системах [28].

Структура спиновых состояний ансамбля электронов определяется конкуренцией обменного взаимодействия между носителями заряда и сверхтонкого взаимодействия с ядрами решетки. Ясно, что если абсолютные величины ядерных полей $|\Omega_i|$ и $|\Omega_k|$, действующие на электроны *i* и *k*, превосходят константу обменного межэлектронного взаимодействия J_{ik} , то обменное взаимодействие между этими электронами несущественно.

В противном случае главным является именно межэлектронное обменное взаимодействие, и спиновые состояния электронов квантуются по полному магнитному моменту. В рамках этой модели естественно разбить весь ансамбль локализованных электронов на группы (кластеры) доноров. Внутри каждого кластера обменное взаимодействие доминирует над сверхтонким:

$$J_{ik} > A\hbar\delta_e, \tag{6}$$

где A — безразмерный коэффициент порядка единицы; от его конкретной величины окончательные результаты зависят слабо. Введем характерное расстояние между донорами R_c , при котором $J(R_c) = A\hbar\delta_e$, тогда задача о формировании кластеров в ансамбле электронов, локализованных на донорах, аналогична задаче о формировании кластеров при изучении высокочастотной проводимости неупорядоченной системы. В последнем случае параметр R_c зависит от частоты электромагнитного поля и характеризует смещение электрона за полупериод осцилляций поля [29]. Строго говоря, к одному кластеру относится группа доноров с расстоянием между ближайшими соседями, меньшим или равным R_c . Введем безразмерный параметр

$$\eta = \frac{\pi}{6} n_d R_c^3,\tag{7}$$

показывающий, какую объемную долю пространства занимают сферы радиусом $R_c/2$. Параметр определяет статистику кластеров в системе — функцию $\mathcal{P}(N)$, описывающую вероятность найти кластер из N электронов. Приведем первые два значения $\mathcal{P}(N)$ при случайном распределении доноров [30]

$$\mathscr{P}(1) = \exp\left(-\frac{4\pi n_d R_c^3}{3}\right) = e^{-8\eta},$$
$$\mathscr{P}(2) = e^{-8\eta} \int_0^{R_c} 4\pi n_d r^2 dr \exp\left[-\pi n_d \left(R_c^2 r - \frac{r^2}{12}\right)\right]$$
$$= 24\eta e^{-8\eta} \int_0^1 u^2 \exp\left[-6\eta \left(u - \frac{u^3}{12}\right)\right] du. \tag{8}$$

Последний интеграл при изменении η в пределах от 0 до 0.2 монотонно уменьшается от 1/3 до примерно ~ 0.1.

Отметим, что при $\eta \approx 0.34$ в системе формируется кластер бесконечного размера [28,31]. Это соответствует критической концентрации доноров $n_c \sim 10^{15}$ сm⁻³. Мы сосредоточимся на случае $n_d \ll n_c$, когда подавляющее большинство кластеров представляет собой "одиночные" электроны и группы из небольшого числа доноров N = 2, 3, 4, связанных сильным обменным взаимодействием. Даже при $\eta = 0.1$ вероятность обнаружения кластера из четырех электронов составляет не больше 8%, а значения $\mathcal{P}(N)$ при N > 4 пренебрежимо малы.

Структура уровней в кластере, состоящем из N электронов, определяется в первую очередь обменным взаимодействием. Это приводит к тому, что в нулевом приближении по сверхтонкому взаимодействию имеющиеся 2^N уровней объединяются в группы, относящиеся к фиксированному полному спину всех электронов M (при четном N полный спин электронов может быть 0, 1, ..., N/2, а при нечетном — M = 1/2, 3/2, ..., N/2). Число групп состояний (или мультиплетов) со спином M есть [32]

$$\mathcal{N}(M) = \frac{(2M+1)N!}{(N/2 + M + 1)!(N/2 - M)!}.$$
(9)

Введем собственные функции электронов $\Psi_l(M, m)$ и собственные энергии $E_l(M)$ в кластере, где m — проекция полного спина M на ось z, пробегающая 2M + 1 значений от -M до M, индекс l нумерует $\mathcal{N}(M)$ различных уровней энергии с заданным значением полного спина M. Энергетические зазоры между этими уровнями определяются константами обменного взаимодействия. Фазы собственных функций выберем так, чтобы при преобразованиях координат в спиновом пространстве наборы $\Psi_l(M, m)$ при фиксированных l и M преобразовывались по представлению D_M как сферические функции $Y_{Mm}(\theta, \varphi)$. В этом случае матричные элементы оператора суммарного спина $\mathbf{S}_N = \sum_{i=1}^N \mathbf{s}_i$ в кластере определяются формулами

$$\langle \Psi_l(M, m') | S_{lpha} | \Psi_l(M, m)
angle = J^M_{lpha;m'm}$$

где $J^{M}_{\alpha;m'm}$ — стандартные матрицы операторов проекций углового момента *M*. Поскольку в прямом произведении

$$D_M imes D_M = \sum_{M'=0}^{2M} D_{M'}$$

представление D_1 содержится только один раз, матричные элементы отдельного спина *i* пропорциональны элементам матрицы $J^M_{\alpha;m'm}$, а именно

$$\langle \Psi_l(M,m')|s_{i,\alpha}|\Psi_l(M,m)\rangle = c_i^{(M,l)} J^M_{\alpha;m'm}.$$
 (10)

Здесь $c_i^{(M,l)}$ — коэффициент, зависящий от энергетического уровня *l*, но не зависящий от *m* и *m'*. Представим состояние $\Psi_l(M, m)$ в виде разложения

$$\Psi_l(M,m) = \sum_{m_1...m_i...m_N} C^{(M,m,l)}_{m_1...m_N} \chi(m_1...m_i...m_N), \quad (11)$$

где $m_i = \pm 1/2$ — проекция спина *i*-го электрона на ось $z; i = 1, 2, ..., N, \chi(m_1 ... m_i ... m_N)$ — *N*-частичная базисная спиновая функция для состояния с заданным набором проекций спинов m_i . Очевидно, что коэффициенты $C_{m_1...m_N}^{(M,m,l)}$ могут быть отличны от нуля лишь при условии $\sum_i m_i = m$. Коэффициент $c_i^{(M,l)}$ в (10) выражается через коэффициенты разложения (11) в виде

$$c_{i}^{(M,l)} = \sum_{m_{1}...m_{i-1}m_{i+1}...m_{N}} \frac{1}{2M} \left(|C_{m_{1}...m_{i}=1/2...m_{N}}^{(M,m,l)}|^{2} - |C_{m_{1}...m_{i}=-1/2...m_{N}}^{(M,m,l)}|^{2} \right).$$

Величины $C_{m_1...m_N}^{(M,m,l)}$, а значит, и $c_i^{(M,l)}$ зависят от конкретной реализации констант обменного взаимодействия в кластере и могут быть найдены в общем случае только численно.

В первом приближении по сверхтонкому взаимодействию различные мультиплеты, т. е. состояния с различными значениями M и l, не смешиваются, однако внутри каждой группы при фиксированных M и l происходит расщепление состояний на 2M + 1 подуровней за счет взаимодействия спинов электронов и ядер. Эффективный гамильтониан сверхтонкого взаимодействия может быть представлен в виде

$$\hat{\mathscr{H}}^{(M,l)} = \hbar \hat{\mathbf{M}}_l \Omega_{\text{eff}}^{(M,l)}, \qquad (12)$$

где $\Omega_{\text{eff}}^{(M,l)}$ — эффективное ядерное поле, действующее на полный спин \mathbf{M}_l . Согласно (1) и (10), оно имеет вид

$$\mathbf{\Omega}_{\text{eff}}^{(M,l)} = \sum_{i} c_i^{(M,l)} \mathbf{\Omega}_i.$$
 (13)

Сверхтонкое взаимодействие полностью снимает вырождение по проекции полного спина M и расщепляет вырожденный уровень $E_l(M)$ на эквидистантные подуровни $E_l(M, M_{z'})$ с заданными значениями проекции $M_{z'}$ полного момента на ось эффективного ядерного поля и расщеплением $\hbar\Omega_{\text{eff}}^{(M,l)}$ между соседними подуровнями. Обозначим соответствующие собственные функции системы $\Psi'_l(M, M_{z'})$ и подчеркнем, что направление оси z'зависит как от конкретной реализации ядерных полей, так и от параметров M, l, характеризующих реализацию состояния с данным полным спином кластера электронов.

Спектр спинового шума ансамбля электронов в модели кластеров представляет собой сумму вкладов от различных кластеров и может быть записан в виде

$$(s_{\alpha}s_{\beta})_{\omega} = \sum_{N=1}^{\infty} \mathscr{P}(N) \sum_{M} \sum_{l=1}^{\mathscr{N}(M)} \mathscr{S}_{\alpha\beta}(N, M, l; \omega), \qquad (14)$$

где $S_{\alpha\beta}(N, M, l; \omega)$ — вклад в спиновый шум *l*-й реализации полного спина *M* в кластере из *N* электронов (ср. с (5)),

$$\begin{split} \mathcal{S}_{\alpha\beta}(N,M,l;\omega) &= \frac{2^{1-N}\pi}{N} \\ &\times \sum_{M_{z'},M'_{z'}} \langle \Psi'_l(M,M_{z'}) | \hat{M}_{l,\alpha} | \Psi'_l(M,M'_{z'}) \rangle \\ &\times \langle \Psi'_l(M,M'_{z'}) | \hat{M}_{l,\beta} | \Psi'_l(M,M_{z'}) \rangle \\ &\times \Delta \bigg(\omega - \frac{E_l(M,M_{z'}) - E_l(M,M'_{z'})}{\hbar} \bigg). \end{split}$$
(15)

В выражении (15) операторы $\hat{M}_{l,\alpha}$, $\hat{M}_{l,\beta}$ изменяют проекцию спина не больше чем на единицу, поэтому $M'_{z'} = M_{z'}, M_{z'} \pm 1$, при этом аргументом уширенной δ -функции может выступать ω или $\omega \pm \Omega_{\text{eff}}^{(M,l)}$. Здесь

также подразумевается усреднение по всевозможным реализациям ядерных полей, действующих на локализованные электроны, после которого недиагональные по декартовым индексам компоненты $S_{\alpha\beta}$ обращаются в нуль, а диагональные оказываются равными: $S_{xx} = S_{yy} = S_{zz} = S$ [15]. Окончательно получаем

$$\mathcal{S}(N, M, l; \omega) = \frac{2^{1-N}\pi}{9N} M(M+1)(2M+1) \\ \times \Big\{ \Delta(\omega) + \int d\Omega_{\text{eff}} \mathscr{F}_{\delta_{M,l}}(\Omega_{\text{eff}}) [\Delta(\omega - \Omega_{\text{eff}}) + \Delta(\omega + \Omega_{\text{eff}})] \Big\}.$$
(16)

При выводе (16) мы учли, что для гауссовых независимых распределений частот спиновой прецессии Ω_i их взвешенная сумма (13) также распределена по закону Гаусса (3), но с заменой $\delta_e \to \delta_{M,l}$, где параметр $\delta_{M,l}$ определяется конкретной реализацией коэффициентов $c_i^{(M,l)}$ [33]

$$\delta_{M,l} = \delta_e \sqrt{\sum_i (c_i^{(M,l)})^2}.$$
(17)

При полном спине M = 0 спектральная функция (16) тождественно равна нулю, так как на синглетное состояние ядерное поле не действует, и среднеквадратичная флуктуация спина в синглетном состоянии — нуль.

Формулу (16) для вклада *l*-й реализации полного спина *M* в спектр спиновых флуктуаций кластера можно получить без непосредственного вычисления матричных элементов операторов момента $\hat{M}_{l,\alpha}$, $\hat{M}_{l,\beta}$, применив метод случайных сил Ланжевена, развитый в [15], для флуктуации δ **M** полного спина ансамбля. Согласно (12), флуктуация δ **M** удовлетворяет уравнению Блоха

$$\frac{d\delta \mathbf{M}}{dt} + \delta \mathbf{M} \times \mathbf{\Omega}_{\text{eff}}^{M,l} + \frac{\delta \mathbf{M}}{\tau_s} = \Xi(t), \qquad (18)$$

в правой части которого присутствует фиктивная случайная сила $\Xi(t)$ с коррелятором

$$\langle \Xi_{\alpha}(t)\Xi_{\beta}(t')\rangle = \frac{2}{3\tau_s}M(M+1)\delta_{\alpha\beta}\delta(t-t').$$
 (19)

Решая уравнение (18) и вычисляя корреляционные функции $\langle \delta M_{\alpha}(t) \delta M_{\beta}(t') \rangle$, усредненные по распределению полей $\Omega^{(M,l)}$, приходим к (16).

Приближение ансамбля пар доноров и одиночных доноров

Влияние сверхтонкого и обменного взаимодействий на спектр спиновых флуктуаций локализованных электронов наиболее просто проследить, рассмотрев пару близко расположенных доноров 1 и 2, так что обменным взаимодействием с другими донорами можно пренебречь: $J \equiv J_{12} \gg J_{1i}$, J_{2i} ($i \neq 1, 2$). В этом разделе анализируется именно такой случай.

В пределе слабого обменного взаимодействия $(J \ll \hbar \delta_e)$ электроны можно считать невзаимодействующими, при этом спектр флуктуаций спина имеет вид [15] (ср. с (16))

$$\begin{split} &(\delta s_z^2)_{\omega} = \mathcal{S}(1, 1/2, 1; \omega) \\ &= \frac{\pi}{6} \left\{ \Delta(\omega) + \int d\Omega \mathscr{F}_{\delta_e}(\Omega) [\Delta(\omega - \Omega) + \Delta(\omega + \Omega)] \right\}. \end{split}$$

Спектр, вычисленный по данной формуле, показан сплошной кривой на рис. 1. При $\omega \ge 0$ он состоит из двух пиков, первый из которых центрирован на $\omega = 0$ и связан с флуктуациями компонент спина, параллельных ядерному полю, а второй пик, центрированный на $\omega = \delta_e$, обусловлен прецессией спина в ядерном поле. Его форма описывается функцией распределения абсолютных величин ядерных полей $F_{\delta_e}(\Omega) = 4\pi \Omega^2 \mathcal{F}_{\delta_e}(\Omega)$. Здесь и далее рассматривается реалистичный случай $\delta_e \tau_s \gg 1$. Заметим, что спектр (20) совпадает с первой спектральной функцией $S_{\alpha\beta}(1, 1/2, 1; \omega)$ в формуле (14), так как одиночному (изолированному) донору отвечают число N = 1, электронный спин 1/2 и единственная реализация l = 1.

Перейдем теперь к рассмотрению предельного случая сильного обменного взаимодействия пары локализованных электронов: $J \gg \hbar \delta_e$. В пренебрежении сверхтонким взаимодействием состояния пары электронов характеризуются полным спином пары S = 0 (синглет) или S = 1 (триплет) и проекцией спина S_z на заданную ось z. Если расщепление между синглетом и триплетом велико, можно пренебречь смешиванием этих состояний за счет сверхтонкого взаимодействия и достаточно рассматривать динамику триплетного состояния с полным спином S = 1. Флуктуации триплетного спина δS описываются уравнением (18), в котором эффективное ядерное поле

$$\Omega_{\rm eff} = \frac{\Omega_1 + \Omega_2}{2}. \tag{21}$$

Согласно (17), дисперсия Ω_{eff} в $\sqrt{2}$ раз меньше, чем дисперсия полей Ω_1 , Ω_2 , действующих на каждый электрон. При этом спектр спинового шума, нормированный на один электрон, определяется выражением (20) с заменой $\mathscr{F}_{\delta_e}(\Omega)$ на $\mathscr{F}_{\delta_e/\sqrt{2}}(\Omega)$. Спектр спинового шума в этом предельном случае показан штрихпунктирной линией на рис. 1. Видно, что пик, центрированный на $\omega = 0$, такой же, как и в пренебрежении обменным взаимодействием, максимум пика, обусловленного спиновой прецессией, сдвинут к частоте $\delta_e/\sqrt{2}$, высота пика в $\sqrt{2}$ раз больше, а его ширина соответственно меньше в $\sqrt{2}$ раз. Это обусловлено эффективным усреднением ядерных полей, вызванным обменным взаимодействием. Штрихпунктирная кривая на рис. 1 представляет спектральную функцию $S_{\alpha\beta}(2, 1, 1; \omega)$ в разложении (14) в модели кластеров.

В рамках развитой выше кластерной модели в кластере из двух доноров обменная константа J превышает сверхтонкое расщепление $\hbar \delta_e$. Для двух доноров



Рис. 1. Спектр спиновых флуктуаций пары электронов, рассчитанный для различных значений параметра $\lambda \equiv J/(\hbar \delta_e)$ и в пределе $\lambda \to \infty$ (штрихпунктирная). Стрелки показывают положение пика спинового шума в пределах слабого ($\omega = \delta_e$) и сильного ($\omega = \delta_e/\sqrt{2}$) обменного взаимодействия.

можно воспользоваться общей формулой (5) и проследить эволюцию спектра спиновых флуктуаций пары при непрерывном изменении от нуля до бесконечности параметра $\lambda = J/(\hbar \delta_e)$, характеризующего соотношение обменного и сверхтонкого взаимодействия. Кроме уже упоминавшихся предельных кривых, рассчитанных при $\lambda = 0$ и $\lambda \to \infty$, на рис. 1 приведены спектры, отвечающие $\lambda = 1/4$ и 1/2. Качественно вид спектра одинаков для разных значений λ. Однако с ростом λ пик, обусловленный спиновой прецессией, сдвигается в сторону меньших частот. При малых значениях λ пик спиновой прецессии центрирован на $\omega = \delta_e$, а в предельном случае сильного обменного взаимодействия пик сдвигается к $\omega = \delta_e / \sqrt{2}$. Переключение между этими двумя режимами с изменением параметра λ происходит в области $\lambda \approx 0.33$. Переход довольно резкий, так что при $\lambda = 1/4$ и 1/2 пик занимает соответствующие предельные положения. Резкость перехода подтверждает применимость модели кластеров, а найденное переходное значение λ показывает, что в неравенстве (6) оптимальным можно считать значение A = 1/3.

Проанализируем теперь спиновые флуктуации на низких частотах $\omega \lesssim \tau_s^{-1}$, спектр которых определяется процессами спиновой релаксации. Из расчетов, представленных на рис. 1, видно, что обменное взаимодействие не приводит к исчезновению пика на нулевой частоте. Это вызвано тем, что проекция суммарного спина на направление среднего ядерного поля Ω_{eff} не меняется со временем. На рис. 2 показана зависимость амплитуды пика, центрированного на $\omega = 0$, от отношения $\lambda = J/\hbar \delta_e$. Амплитуда пика на нулевой частоте в предельных случаях $J \ll \hbar \delta_e$ и $J \gg \hbar \delta_e$ одинакова (см. (20)). При $\lambda \approx 0.5$ амплитуда спинового шума на нулевой частоте достигает минимума, составляющего примерно 3/4 от предельных значений.

Аналитические выражения для зависимости $(\delta s_z^2)_{\omega=0}$ от параметра λ в предельных случаях слабого и сильного

~



Рис. 2. Амплитуда спиновых флуктуаций на нулевой частоте. Сплошная кривая — результат численного расчета по формуле (5), пунктирной, штрихпунктирной и штриховой (на вставке) кривыми показаны асимптотики, найденные по формулам (24), (25) и (23) соответственно. Расчеты выполнялись для $\delta_e \tau_s = 50$.

обменного взаимодействия можно получить, проанализировав временну́ю динамику двухчастичной матрицы плотности системы $\rho(t)$ при $t \gg 1/\delta_e$, \hbar/J , подчиненной стандартному уравнению движения

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = i[\rho(t), \mathcal{H}] - \mathcal{L}\{\rho(t)\}, \qquad (22)$$

где \mathscr{L} — линейный оператор, описывающий спиновую релаксацию с постоянной времени τ_s . В случае предельно малого обменного взаимодействия $J \ll \hbar/\tau_s \ll \hbar \delta_e$ получаем

$$(s_z^2)_0 \approx \frac{\tau_s}{6} \left(1 + \frac{4}{(\delta_e \tau_s)^2} - \sqrt{\frac{\pi}{8}} \tau_s \delta_e \lambda^2 \right),$$
 (23)

где мы наряду с поправками по малым параметрам λ и $J\tau_s/\hbar$ учли не зависящий от обменного взаимодействия малый член $\propto (\delta_e \tau_s)^{-2}$, обусловленный вкладом ядерных полей (в дальнейших формулах он опущен). Квадратичное уменьшение амплитуды флуктуаций с ростом константы обменного взаимодействия показано на вставке к рис. 2. В промежуточном пределе, когда $\hbar/\tau_s \ll J \ll \hbar \delta_e$, можно ограничиться только слагаемым первого порядка по константе обменного взаимодействия

$$(s_z^2)_0 \approx \frac{\tau_s}{6} \left(1 - \frac{\sqrt{\pi}}{2} \lambda \right), \tag{24}$$

и амплитуда пика на нулевой частоте линейно убывает с ростом обменного взаимодействия между локализованными электронами (пунктирная кривая на рис. 2). В противоположном пределе $J \gg \hbar \delta_e$ имеем обратную квадратичную зависимость амплитуды спиновых флуктуаций от λ

$$(s_z^2)_0 \approx \frac{\tau_s}{6} \left[1 - \left(\frac{3}{4\lambda}\right)^2 \right]$$
(25)

в согласии с численным расчетом (штрихпунктирная кривая на рис. 2).

В заключение раздела кратко проанализируем роль спин-орбитального взаимодействия. Его учет приводит к тому, что обменное взаимодействие пары локализованных электронов становится анизотропным и описывается тензором обменных констант в виде

$$J_{ij}^{\alpha\beta}\hat{s}_{i,\alpha}\hat{s}_{j,\beta}.$$
 (26)

Конкретный вид тензора $J_{ij}^{\alpha\beta}$ определяется симметрией системы и механизмом спин-орбитального взаимодействия. Учет кубических по волновому вектору членов в эффективном гамильтониане свободного электрона (эффект Дрессельхауза) [20] приводит к такой связи между компонентами тензора $J_{ij}^{\alpha\beta}$, которая позволяет переписать выражение (26) как $J_{ij}\hat{s}_i'\hat{s}_j'$, где операторы \hat{s}_i' и $\hat{\mathbf{s}}'_i$ связаны с $\hat{\mathbf{s}}_i$ и $\hat{\mathbf{s}}_i$ некоторым унитарным преобразованием, а константы J_{ii} по-прежнему описываются формулой (2). Синглет-триплетная структура состояний пары электронов сохраняется, как и без спин-орбитального взаимодействия. Пренебрегая смешиванием состояний зоны проводимости и валентной зоны, для описания спектра спинового шума пары электронов, усредненного по ядерным полям, можно вообще не учитывать спинорбитальную связь, поскольку унитарное преобразование членов $\Omega_i \hat{\mathbf{s}}_i$ приводит лишь к изменению направления псевдовектора Ω_i . Однако учет спин-зависимого подмешивания состояний валентной зоны в рамках модели Кейна приводит к полному снятию спинового вырождения состояний пары электронов [34].

5. Выход за пределы приближения пар

Перейдем к учету кластеров с числом доноров *N* > 2. Достаточно резкий переход при $\lambda \approx 0.33$ между предельными случаями слабого и сильного обменного взаимодействия, показанный на рис. 1, позволяет положить в уравнении (6) A = 1/3. Для расчета спектра шума требуется определить полуширины $\delta_{M,l}$, введенные в (17) и характеризующие дисперсию ядерных полей, действующих на *l*-ю реализацию полного спина *M* в кластере из N доноров. Для тройки доноров обменное взаимодействие между электронами приводит к расщеплению восьмикратно вырожденного состояния на два подуровня l = 1, 2 с M = 1/2 и один подуровень с M = 3/2. При этом значения $\delta_{1/2,l}$ для l = 1 и 2 совпадают, и три полуширины $\delta_{M,l}$ определяются величиной полного спина электронов $\delta_{M,l} = \delta_e / \sqrt{2M}$ независимо от соотношения между обменными константами J₁₂, J₂₃ и Ј₃₁. Более того, моделирование по общей формуле (5) для трех электронов показывает, что даже при J_{12} , $J_{23}, J_{31} \approx \hbar \delta_e$ спектр флуктуаций близок к результату, получаемому по формулам (14), (16) модели кластеров: различие вблизи пика, обусловленного спиновой прецессией, составляет не более 30%. Парциальные вклады в спектр спинового шума от одиночных доноров, пар и троек доноров, вычисленные по формуле (16), показаны на рис. 3, а сплошной, штрихпунктирной и пунктирной кривыми соответственно.



Рис. 3. *а*) Нормированный на один электрон спектр спинового шума в кластере из *N* доноров. Кривые, обозначенные N = 4и 4', различаются соотношением констант обменного взаимодействия (см. пояснения в тексте). *b*) Нормированный на один электрон спектр спинового шума, рассчитанный в модели кластеров для массива доноров, распределенных случайным образом. Пунктирная кривая получена в пренебрежении обменным взаимодействием и соответствует системе изолированных доноров. Расчеты выполнялись для $\delta_e \tau_s = 100$.

Для кластеров с $N \ge 4$ ситуация сложнее, и параметры $\delta_{M,l}$ зависят от соотношений между обменными константами. Например, для четырех доноров в кластере имеются три различные реализации l = 1, 2, 3 полного спина M = 1, одна реализация с M = 2, а также две реализации с M = 0 (не вносящие вклада в спиновый шум). Если обменное взаимодействие в двух парах четверки доминирует над взаимодействие в двух парах четверки доминирует над взаимодействием между парами, так что $J_{12}, J_{34} \gg J_{13}, J_{14}, J_{23}, J_{24}$, то выполняются соотношения $\delta_{1,1} = \delta_{1,2} = \delta_e/\sqrt{2}$ и $\delta_{1,3} = \delta_e/2$. Если же $J_{12} \gg J_{13}, J_{23} \gg J_{14}, J_{24}, J_{34}$, то $\delta_{1,1}$ и $\delta_{1,2}$ не меняются, а $\delta_{1,3} = \delta_e \sqrt{7/12}$. Для этих двух частных случаев соответствующие спектры спинового шума показаны линиями из коротких и длинных штрихов на рис. 3, *a*. Различие между ними не превышает 10%.

На рис. 3, *b* приведены спектры спинового шума в массиве случайно расположенных доноров, рассчитанные в модели кластеров. Значения $\mathcal{P}(N)$ при N > 2 рассчитывались методом Монте-Карло. Для упрощения расчета мы полагали, что всем реализациям одного и

того же полного спина M соответствует характерное ядерное поле $\delta_{M,l} = \delta_e / \sqrt{2M}$. При низких концентрациях доноров, когда $\eta = 0.01$ (сплошная кривая), большинство кластеров состоит из одиночных доноров и спектр спинового шума практически совпадает со спектром, найденным по формуле (20) для изолированных центров (пунктирная кривая). С ростом концентрации доноров спектр спиновых флуктуаций определяется кластерами все бо́льших размеров. Поэтому пик, обусловленный спиновой прецессией в ядерном поле, сдвигается в сторону меньших частот и несколько сужается.

Как отмечалось выше, при достаточно большой концентрации доноров, когда безразмерный параметр η достигает значения 0.34, возникает бесконечный кластер из электронов, связанных сильным обменным взаимодействием. Изложенная выше модель в этом случае неприменима, а спиновая динамика и спиновые флуктуации могут определяться интерференцией спин-орбитального и обменного взаимодействий [20]. Более того, если площадь пятна зондирующего луча S на поверхности образца достаточно мала ($S \leq 10 \,\mu m$), то вид спектра спинового шума может флуктуировать при изменении положения пятна на образце в зависимости от того, захватывает ли пятно засветки кластеры с большим числом доноров или нет. Помимо этого обменное взаимодействие между электронами в кластере может приводить к достаточно эффективной диффузии спинов из пятна засветки и ограничению на время $\tau_s \lesssim S/D$. Здесь $D \sim n_d^{-2/3} \langle J \rangle / \hbar$ — коэффициент спиновой диффузии, $\langle J \rangle$ — "средняя" по кластеру обменная константа. Например, при $n_d = 10^{16} \,\mathrm{cm}^{-3}$ и $S = 10 \,\mu\mathrm{m}^2$ коэффициент спиновой диффузии $D \approx 1.5 \, {\rm cm}^2/{
m s}$ и $S/D \sim 7 \cdot 10^{-8} \, {
m s}$, что сопоставимо со временем спиновой релаксации, обусловленной спин-орбитальным взаимодействием [20].

Выше обсуждались флуктуации полного спина **S** ансамбля локализованных электронов. Обменное взаимодействие между электронами в отсутствие ядерных полей ($\Omega_i = 0$) не приводит к потере полного спина ансамбля, но приводит к особенностям динамики спина отдельного электрона, которая определяет, например, медленную динамику спинов ядер [35]. В частности, для пары электронов при $\Omega_1 = \Omega_2 = 0$ асимптотическое поведение корреляторов $\langle s_{i,\alpha}(t+\tau)s_{j,\beta}(t) \rangle$ в пределе $\tau \to \infty$ оказывается схожим в предельных случаях отсутствия обменного взаимодействия ($J_{12} = 0$)

$$\langle s_{i,\alpha}(t+\tau)s_{j,\beta}(t)\rangle = \frac{1}{4}\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}e^{-\tau/\tau_s}(\tau \gg \tau_s) \qquad (27a)$$

и наличия обменного взаимодействия $(J_{12} \gg \hbar/\tau_s)$

$$\langle s_{i,\alpha}(t+\tau)s_{j,\beta}(t)\rangle = \frac{1}{8}\,\delta_{\alpha\beta}e^{-\tau/\tau_s}(\tau\gg\tau_s). \tag{27b}$$

Различия между (27а) и (27b) объясняются тем, что обменное взаимодействие подавляет спиновые корреляции данного электрона и приводит к возникновению корреляций между спинами различных носителей. Аналогичное поведение имеет место и для кластеров с бо́льшим числом электронов N: за счет обменного взаимодействия спин перераспределяется между всеми электронами, при этом в отсутствие ядерных полей $\langle s_{i,\alpha}(t+\tau)s_{i,\beta}(t)\rangle$ $\approx \delta_{lphaeta} \exp(-\tau/\tau_s)/(4N)$. Этот эффект подобен влиянию межэлектронного взаимодействия на функцию распределения газа свободных носителей тока: электронэлектронные столкновения сохраняют полный импульс газа, однако приводят к потере импульса данного электрона, а также к корреляциям импульсов электронов после столкновения [25]. Особенности временной динамики корреляторов спина электрона, локализованного на выделенном центре, с учетом как сверхтонкого взаимодействия, так и обменного взаимодействия с другими электронами могут быть проанализированы методами, развитыми в [36,37], и требуют отдельного рассмотрения. Тем не менее можно утверждать, что в кластерах с $J_{ij} \gg \hbar \delta_e$ характерное время корреляции спина одиночного электрона по порядку величины есть $\hbar/\langle J \rangle$.

6. Заключение

В работе развита теория спиновых флуктуаций локализованных электронов с учетом как сверхтонкого взаимодействия с ядрами решетки, так и обменного взаимодействия между локализованными носителями заряда. Рассмотрен конкретный случай электронов, локализованных на донорах в полупроводнике *n*-типа при низких температурах. В системе имеются три независимых источника случайности: 1) случайный характер переворота спина при спиновой релаксации, описываемой временем τ_s ; 2) случайный разброс трехмерного вектора ядерного поля, действующего на электрон, локализованный на *i*-м доноре; 3) случайное распределение донорных центров в образце, приводящее к разбросу обменных констант. Показано, что спектр спинового шума ансамбля локализованных электронов содержит два пика: пик при $\omega = 0$ обусловлен флуктуациями компоненты полного спина кластера из доноров вдоль суммарного ядерного поля, а пик при $\omega > 0$ обусловлен прецессией электронных спинов в ядерных полях. Конкретная форма и положение этого пика зависят от величины ядерных флуктуаций и силы обменного взаимодействия. С ростом плотности центров локализации пик, обусловленный спиновой прецессией, сужается и смещается в сторону меньших частот.

Изменение спектра флуктуаций спина при приложении внешнего магнитного поля **B** может быть рассмотрено аналогично тому, как это было сделано в работе [15] для изолированных друг от друга спинов 1/2. Внешнее поле добавляется к ядерному полю и меняет статистику флуктуаций суммарного поля, действующего на спин локализованного электрона. Если эти поля имеют один порядок величины и, по определению кластера, малы по сравнению с обменным взаимодействием в кластере, то можно пренебречь их влиянием на расщепление между состояниями с различными значениями M и l и попрежнему рассматривать вклад каждого мультиплета в спиновый шум независимо, учитывая его расщепление на компоненты в первом порядке теории возмущений.

Авторы благодарны М.В. Фейгельману за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] Е.Б. Александров, В.С. Запасский. ЖЭТФ 81, 132 (1981).
- [2] S.A. Crooker, D.G. Rickel, A.V. Balatsky, D.L. Smith. Nature 431, 49 (2004).
- [3] M. Oestreich, M. Römer, R.J. Haug, D. Hägele. Phys. Rev. Lett. 95, 216 603 (2005).
- [4] G.M. Müller, M. Römer, D. Schuh, W. Wegscheider, J. Hubner, M. Oestreich. Phys. Rev. Lett. 101, 206 601 (2008).
- [5] S.A. Crooker, L. Cheng, D.L. Smith. Phys. Rev. B 79, 035 208 (2009).
- [6] S.A. Crooker, J. Brandt, C. Sandfort, A. Greilich, D.R. Yakovlev, D. Reuter, A.D. Wieck, M. Bayer. Phys. Rev. Lett. 104, 036 601 (2010).
- [7] Y. Li, N. Sinitsyn, D.L. Smith, D. Reuter, A.D. Wieck, D.R. Yakovlev, M. Bayer, S.A. Crooker. Phys. Rev. Lett., 108, 186 603 (2012).
- [8] R. Dahbashi, J. Hübner, F. Berski, J. Wiegand, X. Marie, K. Pierz, H.W. Schumacher, M. Oestreich. Appl. Phys. Lett. 100, 031 906 (2012).
- [9] V.S. Zapasskii, A. Greilich, S.A. Crooker, Y. Li, G.G. Kozlov, D.R. Yakovlev, D. Reuter, A.D. Wieck, M. Bayer. Phys. Rev. Lett. 110, 176 601 (2013).
- [10] G.M. Mueller, M. Oestreich, M. Roemer, J. Huebner. Physica E 43, 569 (2010).
- [11] E.B. Aleksandrov, V.S. Zapasskii. J. Phys.: Conf. Ser. 324, 012 002 (2011).
- [12] D.J. Reilly, J.M. Taylor, E.A. Laird, J.R. Petta, C.M. Marcus, M.P. Hanson, A.C. Gossard. Phys. Rev. Lett. **101**, 236 803 (2008).
- [13] C.P. Moca, I. Weymann, G. Zaránd. Phys. Rev. B 81, 241 305 (2010).
- [14] C.P. Moca, I. Weymann, G. Zarand. Phys. Rev. B 84, 235 441 (2011).
- [15] M.M. Glazov, E.L. Ivchenko. Phys. Rev. B 86, 115 308 (2012).
- [16] M. Römer, H. Bernien, G. Muller, D. Schuh, J. Hübner, M. Oestreich. Phys. Rev. B 81, 075 216 (2010).
- [17] Р.И. Джиоев, Б.П. Захарченя, В.Л. Коренев, М.Н. Степанова. ФТТ 39, 1975 (1997).
- [18] J.M. Kikkawa, D.D. Awschalom. Phys. Rev. Lett. 80, 4313 (1998).
- [19] R.I. Dzhioev, K. Kavokin, V. Korenev, M. Lazarev, B.Y. Meltser, M.N. Stepanova, B.P. Zakharchenya, D. Gammon, D.S. Katzer. Phys. Rev. B 66, 245 204 (2002).
- [20] K.V. Kavokin. Semicond. Sci. Technol. 23, 114009 (2008).
- [21] Л.П. Горьков, Л.П. Питаевский. ДАН СССР **151**, 822 (1963).
- [22] C. Herring, M. Flicker. Phys. Rev. 134, A362 (1964).
- [23] R.I. Dzhioev, V.L. Korenev, I.A. Merkulov, B.P. Zakharchenya, D. Gammon, A.L. Efros, D.S. Katzer. Phys. Rev. Lett. 88, 256 801 (2002).
- [24] Е.Л. Ивченко. ФТП 7, 1489 (1973).
- [25] S. Gantsevich, V. Gurevich, R. Katilius. Riv. Nuovo Cimento 2, 1 (1979).

- [26] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Ч. 1. Наука, М. (1976). 584 с.
- [27] B. Mihaila, S.A. Crooker, D.G. Rickel, K.B. Blagoev, P.B. Littlewood, D.L. Smith. Phys. Rev. A 74, 043 819 (2006).
- [28] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. Электронные свойства легированных полупроводников. Наука, М. (1979). 416 с.
- [29] I. Zvyagin. In: Charge transport in disordered solids with applications in electronics / Ed. S. Baranovski. John Wiley and Sons (2006). Ch. 9; H. Bottger, V.V. Bryksin, G.Yu. Yashin. J. Phys. C 12, 2797 (1979); H. Bottger, V.V. Bryksin, G.Yu. Yashin. J. Phys. C 12, 3951 (1979).
- [30] U.F. Edgal, J.D. Wiley. Phys. Rev. B 27, 4997 (1983).
- [31] C.D. Lorenz, R.M. Ziff. J. Chem. Phys. 114, 3659 (2001).
- [32] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика: нерелятивистская теория. Наука, М. (1974). 752 с.
- [33] В. Феллер. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. В 2-х т. Мир, М. (1964).
- [34] M.M. Glazov, V.D. Kulakovskii. Phys. Rev. B 79, 195305 (2009).
- [35] I.A. Merkulov, G. Alvarez, D.R. Yakovlev, T.C. Schulthess. Phys. Rev. B 81, 115 107 (2010).
- [36] M.V. Feigel'man, L.B. Ioffe, M. Mézard. Phys. Rev. B 82, 184 534 (2010).
- [37] E. Cuevas, M. Feigel'man, L. Ioffe, M. Mezard. Nature Commun. 3, 1128 (2012).