

05

Ядерная спиновая динамика и флуктуации в анизотропной модели большого ящика

© А.В. Шумилин, Д.С. Смирнов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: smirnov@mail.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 20 октября 2021 г.

В окончательной редакции 20 октября 2021 г.

Принята к публикации 21 октября 2021 г.

Рассмотрена центральная спиновая модель в приближении ящика с учетом внешнего магнитного поля и анизотропии сверхтонкого взаимодействия. При помощи точной диагонализации гамильтониана получены аналитические выражения для ядерной спиновой динамики в пределе большого числа ядерных спинов. Предсказана ядерная спиновая прецессия в нулевом магнитном поле для случая анизотропного взаимодействия спинов электронов и ядер. Рассчитаны и описаны спектры ядерных спиновых флуктуаций в термодинамическом равновесии. Полученные результаты могут использоваться для анализа флуктуаций тока в органических полупроводниках, индуцированных ядерным спиновым шумом.

Ключевые слова: центральная спиновая модель, модель ящика, ядерная спиновая динамика.

DOI: 10.21883/FTT.2022.02.51930.223

1. Введение

Носители заряда в полупроводниках могут быть локализованы множеством способов: на примесях, на дефектах, в квантовых точках, на шероховатостях интерфейсов квантовых ям, на органических полупроводниковых молекулах [1]. Наиболее интересной является локализация в квантовых точках, при которой локализуемый потенциал может управляемо изменяться в широких пределах.

Первые квантовые точки (нанокристаллы) были синтезированы Екимовым и Онущенко в 1981 году методом коллоидного синтеза [2]. Теоретически оптические межзонные переходы в них были описаны Эфросом [3]. Десятилетием позже в пионерской работе [4] методом Странского–Крыстанова были получены квантовые точки на основе GaAs, обладающие узкими линиями люминесценции.

Интерес к изучению квантовых точек в XXI веке связан в первую очередь со спиновыми эффектами [5,6]. Спиновая динамика электронов в квантовых точках в малых магнитных полях, как было показано Меркуловым, Эфросом и Розеном, определяется в основном сверхтонким взаимодействием с большим количеством спинов ядер кристаллической решетки [7]. Это взаимодействие приводит к ряду ярких спиновых явлений таких как эффекты Ханле [8], восстановление поляризации [9], резонансное спиновое усиление [10], синхронизация мод спиновой прецессии [11], спиновая инерция [12,13], низкочастотные спиновые флуктуации [14,15], динамическая поляризация электронных спинов [16,17] и др.

В последние годы интерес в исследовании спинов в квантовых точках сместился от электронов и дырок к

ядрам кристаллической решетки [18–21]. Это связано с более длинными временами их спиновой релаксации и дефазировки, что позволяет говорить об использовании спинов ядер в качестве платформы для хранения и обработки квантовой информации [22].

Простейшей точно решаемой моделью для описания спиновой динамики ядер является модель ящика [23]. В рамках этой модели нами были получены прозрачные аналитические выражения для спиновой динамики ядер и аналитически рассчитаны спектры их спинового шума [24], в согласии с выполненными ранее численными расчетами [25].

В этой работе наши предыдущие результаты воспроизведены новым методом, а также обобщены на случай анизотропного сверхтонкого взаимодействия. Важным результатом является предсказание ядерной спиновой динамики при анизотропном сверхтонком взаимодействии в нулевом магнитном поле. В частности, это предсказание открывает путь для эффективного детектирования шумов тока, вызванных спиновым шумом ядер, в органических полупроводниках.

2. Точное решение модели ящика

Общий гамильтониан центральной спиновой модели во внешнем магнитном поле имеет вид

$$\mathcal{H} = \sum_{k=1}^N \mathbf{S} \hat{\mathbf{A}}_k \mathbf{I}_k + \hbar \Omega_B \mathbf{S} + \sum_{k=1}^N \hbar \omega_B^{(k)} \mathbf{I}_k. \quad (1)$$

Здесь \mathbf{S} — центральный спин электрона или дырки, k нумерует N ядерных спинов \mathbf{I}_k , $\hat{\mathbf{A}}_k$ — соответствующие

тензоры сверхтонкого взаимодействия, Ω_B и $\omega_B^{(k)}$ — ларморовские частоты прецессии электронного и ядерных спинов во внешнем магнитном поле, соответственно. Мы будем считать, как это принято, для простоты все спины ядер и электрона равными $1/2$.

В этой работе мы рассмотрим модель ящика, в которой все тензоры сверхтонкого взаимодействия и все частоты ядерной спиновой прецессии равны: $\hat{\mathbf{A}}_k = \hat{\mathbf{A}}$ и $\omega_B^{(k)} = \omega_B$. В этом случае гамильтониан может быть записан в терминах полного ядерного спина

$$\mathbf{I} = \sum_{k=1}^N \mathbf{I}_k : \quad (2)$$

$$\mathcal{H} = \hat{\mathbf{S}}\mathbf{A}\mathbf{I} + \hbar\Omega_B\mathbf{S} + \hbar\omega_B\mathbf{I}. \quad (3)$$

Мы будем рассматривать случай, когда тензор сверхтонкого взаимодействия имеет ненулевые компоненты $A_{zz} \equiv A_{\parallel}$ и $A_{xx} = A_{yy} = A_{\perp}$, и внешнее поле приложено по оси z , так что Ω_B и ω_B параллельны этой оси. Спектр этого гамильтониана был найден Козловым [23], и ниже мы воспроизведем его результат.

Гамильтониан модели ящика сохраняет абсолютную величину полного углового момента ядер, так что собственные состояния могут параметризоваться величиной I принимающей значения от $(N \bmod 2)/2$ до $N/2$ с шагом 1. Для заданного значения I система имеет $2(2I+1)P$ собственных состояний, где множитель 2 описывает число состояний электронного спина, $2I+1$ — число проекций полного ядерного спина, а

$$P = C_N^{N/2+I} - C_N^{N/2+I-1} \quad (4)$$

— число реализаций данного полного ядерного спина I выраженное как разность чисел сочетаний [26].

В системе сохраняется компонента полного углового момента $F_z = S_z + I_z$. Она принимает значения от $-I - 1/2$ до $I + 1/2$ с шагом 1. Для каждого значения кроме крайних есть два собственных состояния, являющиеся линейными комбинациями функций $|F_z - 1/2, \uparrow\rangle$ и $|F_z + 1/2, \downarrow\rangle$, где $|I_z, \uparrow / \downarrow\rangle$ — волновые функции с проекцией ядерного спина I_z на ось z и электронным спином по/против оси z . В базисе этой пары состояний гамильтониан может быть записан как

$$\mathcal{H}(F_z) = \hbar\omega_B F_z - \frac{A_{\parallel}}{4} + \hbar\Omega_e \mathbf{S}, \quad (5)$$

где

$$\Omega_{e,x} = \frac{A_{\perp}}{\hbar} \sqrt{I(I+1) - F_z^2 + 1/4}, \quad (6a)$$

$$\Omega_{e,y} = 0, \quad \Omega_{e,z} = \Omega_B - \omega_B + \frac{A_{\parallel}}{\hbar} F_z. \quad (6b)$$

Величина Ω_e зависит от F_z , но здесь и далее мы для краткости будем опускать этот аргумент. Собственные энергии имеют вид

$$E_{\pm}(F_z) = \hbar\omega_B F_z - \frac{A_{\parallel}}{4} \pm \hbar\Omega_e/2, \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} \Omega_e &= |\Omega_e| \\ &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{A_{\perp}^2 I(I+1) + \hbar^2 (\Omega_B - \omega_B)^2 + \\ &\quad + 2A_{\parallel} F_z \hbar (\Omega_B - \omega_B) + (A_{\parallel}^2 - A_{\perp}^2) F_z^2 + A_{\perp}^2 / 4}, \end{aligned}$$

а соответствующие волновые функции

$$\Psi_{\pm}(F_z) = \mathcal{A}_{\pm}(F_z) |F_z + 1/2, \downarrow\rangle + \mathcal{B}_{\pm}(F_z) |F_z - 1/2, \uparrow\rangle, \quad (8)$$

причем

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{+}(F_z) &= -\mathcal{B}_{-}(F_z) = \frac{\Omega_{e,x}}{\sqrt{2\Omega_e(\Omega_e + \Omega_{e,z})}}, \\ \mathcal{B}_{+}(F_z) &= \mathcal{A}_{-}(F_z) = \sqrt{\frac{\Omega_e + \Omega_{e,z}}{2\Omega_e}}. \end{aligned} \quad (9)$$

Кроме того, имеются крайние собственные состояния $|N/2, \uparrow\rangle$ и $| -N/2, \downarrow\rangle$ с энергиями $A_{\parallel}N/4 \pm \hbar(\Omega_B + \omega_B N)/2$, соответственно.

Для описания ядерной спиновой динамики рассмотрим линейные комбинации собственных волновых функций

$$\Psi_{\pm}(t) = \alpha_{\pm}(t)\Psi_{\pm}(I_z + 1/2) + \beta_{\pm}(t)\Psi_{\pm}(I_z - 1/2) \quad (10)$$

при заданном значении I_z . Временная эволюция этой комбинации описывается

$$\begin{aligned} \alpha_{\pm}(t) &= \alpha_{\pm}(0) \exp[-iE_{\pm}(I_z + 1/2)t/\hbar], \\ \beta_{\pm}(t) &= \beta_{\pm}(0) \exp[-iE_{\pm}(I_z - 1/2)t/\hbar]. \end{aligned} \quad (11)$$

При этом средние поперечные компоненты ядерного спина даются выражением $\langle I_{x,y}(t) \rangle = \langle \Psi_{\pm}(t) | I_{x,y} | \Psi_{\pm}(t) \rangle$. В явном виде они равны

$$\begin{aligned} \langle I_x(t) + iI_y(t) \rangle &= \alpha_{\pm}^*(t)\beta_{\pm}(t) \\ &\times \left[\mathcal{A}(I_z + 1/2)\mathcal{A}(I_z - 1/2)\sqrt{(I - I_z)(I + I_z + 1)} \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{B}(I_z + 1/2)\mathcal{B}(I_z - 1/2)\sqrt{(I - I_z + 1)(I + I_z)} \right]. \end{aligned} \quad (12)$$

Из (11) получим, что

$$\langle I_x(t) + iI_y(t) \rangle = \langle I_x(0) + iI_y(0) \rangle e^{i\omega_{\pm}t}, \quad (13)$$

где

$$\omega_{\pm} = \frac{E_{\pm}(I_z + 1/2) - E_{\pm}(I_z - 1/2)}{\hbar}. \quad (14)$$

Таким образом, среднее значение ядерного спина в плоскости (xy) для рассматриваемых комбинаций волновых функций прецессирует вокруг оси z с частотой ω_{\pm} .

3. Предел большого ящика

В пределе большого ядерного спина, $I \gg 1$, из (14) получим

$$\omega_{\pm} = \omega_B \pm \frac{A_{\parallel} \hbar \Omega_B + (A_{\parallel}^2 - A_{\perp}^2) I_z}{2 \hbar^2 \Omega_e}, \quad (15)$$

где мы пренебрегли ω_B по сравнению с Ω_B в силу большой разницы электронного и ядерного g факторов. Кроме того, в этом пределе из (6) получим

$$\Omega_e = \Omega_B + \frac{\hat{\mathbf{A}}}{\hbar} \cdot \mathbf{I}. \quad (16)$$

Эти же выражения могут быть получены из следующих качественных соображений. Будем рассматривать \mathbf{I} и \mathbf{S} как классические трехмерные векторы. Тогда, как видно из гамильтониана (3), Ω_e из уравнения (16) действительно представляет собой частоту прецессии электронного спина при заданном значении \mathbf{I} . Далее, как видно из (7), собственные состояния с индексами \pm соответствуют направлению электронного спина по и против Ω_e . В этих состояниях

$$\mathbf{S} = \pm \frac{\Omega_e}{2\Omega_e}. \quad (17)$$

Частота же прецессии ядерного спина, как это опять же следует из гамильтониана (3), равна

$$\omega_n = \omega_B + \frac{\hat{\mathbf{A}}}{\hbar} \cdot \mathbf{S}. \quad (18)$$

Для состояний с индексами \pm из (17) получим

$$\omega_n = \omega_B \pm \frac{\hat{\mathbf{A}} \cdot \Omega_e}{2 \hbar \Omega_e}. \quad (19)$$

Теперь подставим сюда (16) и воспользуемся тем, что из частоты прецессии \mathbf{I} можно вычесть вектор $A_{\perp}^2 \mathbf{I} / (2 \hbar^2 \Omega_e)$, параллельный \mathbf{I} . В результате получим

$$\frac{d\mathbf{I}}{dt} = \omega_{\pm} \mathbf{e}_z \times \mathbf{I}, \quad (20)$$

где ω_{\pm} дается выражением (15). В этом выражении частота прецессии ω_{\pm} не зависит от времени.

Рис. 1 показывает точный численный расчет осцилляций $\langle I_x(t) \rangle$ в нулевом магнитном поле, $\Omega_B = \omega_B = 0$, для случаев предельно анизотропного сверхтонкого взаимодействия $A_{\perp} = 0$ и $A_{\parallel} = 0$. В качестве начального условия выбрана ориентация полного ядерного спина $I = 50$ в плоскости (xz) под углом $\pi/4$ к осям и неполяризованный электронный спин. Видно, что ядерный спин действительно прецессирует с частотой (15). Для случая $A_{\parallel} = 0$ видно также затухание осцилляций которое исчезает в пределе большого I .

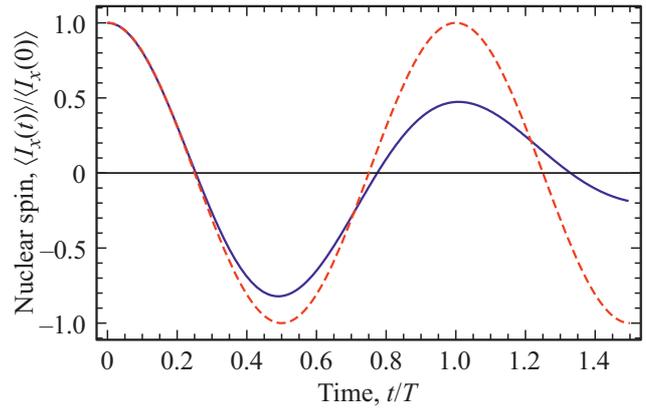


Рис. 1. Численный расчет $\langle I_x(t) \rangle$ для случаев $A_{\parallel} = 0$ (сплошная синяя кривая) и $A_{\perp} = 0$ (пунктирная красная кривая) и для параметров, указанных в тексте. Период осцилляций определяется из уравнения (15) как $T = 2\pi/|\omega_{\pm}|$.

4. Шум ядерных спинов

Одним из наиболее эффективных методов исследования ядерной спиновой динамики является спектроскопия спинового шума [14,27–30]. Спектр спинового шума ядер определяется как

$$(I_{\alpha}^2)_{\omega} = \int_{-\infty}^{\infty} \langle I_{\alpha}(0) I_{\alpha}(\tau) \rangle e^{i\omega\tau} d\tau, \quad (21)$$

где $\alpha = x, y, z$, а угловые скобки обозначают квантостатистическое усреднение. Мы будем рассматривать экспериментально характерный случай высоких температур, когда поляризация ядер пренебрежимо мала, так что функция распределения полного спина имеет вид [14]

$$\mathcal{F}(\mathbf{I}) = \left(\frac{2}{\pi N} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{2I^2}{N} \right). \quad (22)$$

Динамика z компоненты ядерного спина в данной модели отсутствует, а для оставшихся двух компонент в силу цилиндрической симметрии верно

$$(I_x^2)_{\omega} = (I_y^2)_{\omega}. \quad (23)$$

Поэтому в дальнейшем мы будем рассматривать спектр $(I_x^2)_{\omega}$. Кроме того, мы будем пренебрегать зеемановским расщеплением ядерных спиновых подуровней ω_B , так как оно приводит лишь к расщеплению спектра на две одинаковые компоненты [24].

В таком случае, как это следует из уравнения движения (13),

$$\langle I_x(0) I_x(\tau) \rangle = \langle I_x^2(0) \cos(\omega_n \tau) \rangle, \quad (24)$$

где

$$\omega_n = \left| \frac{A_{\parallel} \hbar \Omega_B + (A_{\parallel}^2 - A_{\perp}^2) I_z}{2 \hbar \sqrt{(\hbar \Omega_B + A_{\parallel} I_z)^2 + A_{\perp}^2 (I_x^2 + I_y^2)}} \right| \quad (25)$$

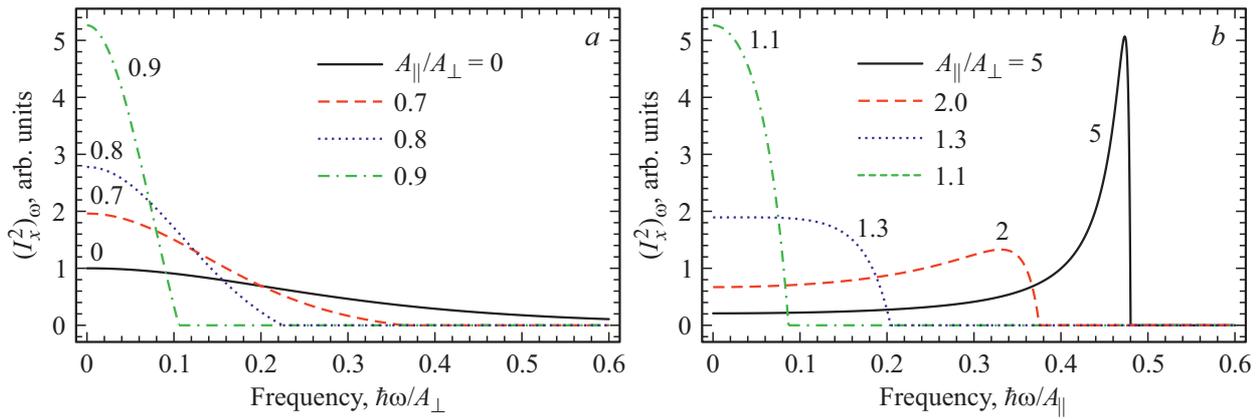


Рис. 2. Спектры спинового шума ядер в нулевом магнитном поле, $\Omega_B = 0$, для различной анизотропии сверхтонкого взаимодействия, указанной в легендах, рассчитанные по формуле (28).

получено из уравнения (15). Далее из определения (21) получаем общее выражение для спектра на положительных частотах

$$(I_x^2)_\omega = \pi \langle I_x^2 \delta(\omega - \omega_n) \rangle, \quad (26)$$

где усреднение должно проводиться по функции распределения (22).

Нам не удалось получить аналитическое выражение для спектра спинового шума в общем случае. Поэтому ниже мы рассмотрим ряд частных случаев.

Наиболее интересным является случай нулевого магнитного поля, $\Omega_B = 0$. В этом случае частота спиновой прецессии ядер (25) не зависит от абсолютной величины ядерного спина:

$$\omega_n = \frac{|(A_{\parallel}^2 - A_{\perp}^2)I_z|}{2\hbar\sqrt{A_{\parallel}^2 I_z^2 + A_{\perp}^2 (I_x^2 + I_y^2)}}. \quad (27)$$

Усреднение по направлениям \mathbf{I} дает

$$(I_x^2)_\omega = \frac{3}{4} \pi N \hbar A_{\perp} \frac{A_{\perp}^4 + A_{\parallel}^4 - 2A_{\parallel}^2 [A_{\perp}^2 + 2(\hbar\omega)^2]}{\sqrt{|A_{\parallel}^2 - A_{\perp}^2| |A_{\parallel}^2 - A_{\perp}^2 - (2\hbar\omega)^2|}^{5/2}}. \quad (28)$$

При этом спектр ограничен по частоте величиной $|A_{\parallel}^2 - A_{\perp}^2|/(2\hbar A_{\parallel})$.

Если продольная компонента тензора сверхтонкого взаимодействия равна нулю, $A_{\parallel} = 0$, то это выражение упрощается до

$$(I_x^2)_\omega = \frac{3\pi\hbar N}{4A_{\perp} [(2\hbar\omega/A_{\perp})^2 + 1]^{5/2}}. \quad (29)$$

При этом спектр простирается на все частоты.

На рис. 2 показаны спектры спинового шума для различной степени анизотропии. Для удобства сравнения частота нормирована на A_{\perp}/\hbar в случае $A_{\perp} > A_{\parallel}$ [панель (a)] и на A_{\parallel}/\hbar в случае $A_{\perp} < A_{\parallel}$ [панель (b)].

В случае сверхтонкого взаимодействия в плоскости (xy) , $A_{\parallel} = 0$, спектр центрирован на нулевой частоте и имеет ширину порядка A_{\perp}/\hbar в согласии с (29). При уменьшении анизотропии спектр сужается, оставаясь центрированным на нулевой частоте вплоть до $A_{\parallel} = A_{\perp}$, когда спектр становится сингулярным.

Далее при увеличении отношения A_{\parallel}/A_{\perp} в спектре развивается максимум на конечной частоте, который сдвигается к $\omega = A_{\parallel}/(2\hbar)$ в пределе $A_{\parallel} \gg A_{\perp}$. При этом ширина спектра сначала увеличивается, а затем уменьшается и стремится к нулю. Это связано с тем, что в этом пределе частота ядерной спиновой прецессии равна $A_{\parallel}/(2\hbar)$, как это следует из (25), и не зависит от направления ядерного спина \mathbf{I} .

Перейдем теперь к анализу роли магнитного поля.

Во-первых, если сверхтонкое взаимодействие доминирует вдоль оси z , $A_{\parallel} \gg A_{\perp}$, то частота спиновой прецессии остается равной $A_{\parallel}/(2\hbar)$ и спектр спинового шума не модифицируется.

Во-вторых, в случае изотропного сверхтонкого взаимодействия, $A_{\parallel} = A_{\perp}$, нами было показано ранее, что спектр смещается с нулевой частоты к $A/(2\hbar)$ с ростом магнитного поля [24]. При этом его ширина меняется немонотонно и стремится к нулю в пределе $\Omega_B \rightarrow \infty$.

Наконец, в пределе сверхтонкого взаимодействия доминирующего в плоскости (xy) , $A_{\parallel} = 0$, можно аналитически провести усреднение общего выражения (26) сперва по I_z при помощи δ -функции, а затем по компонентам I_x и I_y . Ответ для спектра спинового шума в этом случае имеет вид

$$(I_x^2)_\omega = \frac{\sqrt{\pi}\hbar N}{4A_{\perp}(1+v^2)^{5/2}} \left[6b\sqrt{1+v^2}e^{-v^2} + \sqrt{\pi}(3-2b^2-2b^2v^2)\text{Erfc}(b\sqrt{1+v^2})e^{b^2} \right], \quad (30)$$

где для краткости введены безразмерная частота $v = 2\hbar\omega/A_{\perp}$ и безразмерное магнитное поле

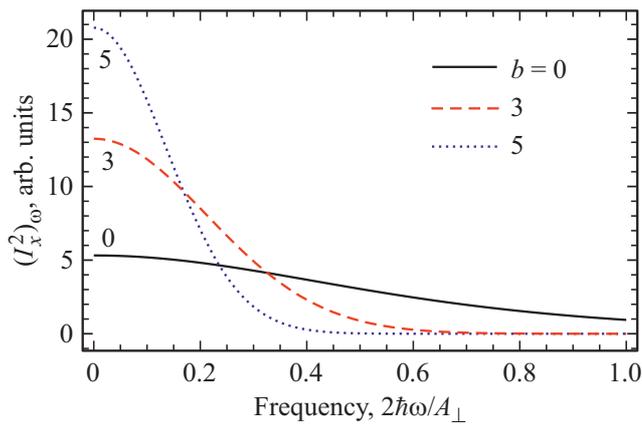


Рис. 3. Спектры спинового шума ядер для сверхтонкого взаимодействия в плоскости (xy) , $A_{\parallel} = 0$, для различных магнитных полей, указанных в легенде, рассчитанные по формуле (30).

$b = (\hbar\Omega_B/A_{\perp})\sqrt{2/N}$, а $\text{Erfc}(x) = 1 - \text{Erf}(x)$ — дополнительная функция ошибок. В пределе нулевого магнитного поля, $\Omega_B \rightarrow 0$, это выражение переходит в ранее полученный ответ (29).

Зависимость спектров спинового шума от магнитного поля для этого случая проиллюстрирована на рис. 3.

С ростом магнитного поля спектр сужается, но остается центрированным на нулевой частоте.

В общем случае спектры спинового шума могут быть рассчитаны численно по формуле (26). На рис. 4 показаны результаты численного расчета с усреднением по 10^7 случайным начальным значениям ядерного спина. Представлены три значения магнитного поля: $\hbar\Omega_B = 0.2A_{\parallel}\sqrt{N/2}$, когда зеемановская энергия меньше энергии сверхтонкого взаимодействия; $\hbar\Omega_B = A_{\parallel}\sqrt{N/2}$ когда они сопоставимы и $\hbar\Omega_B = 10A_{\parallel}\sqrt{N/2}$, когда первая доминирует над второй. Для каждого значения поля сравниваются три степени анизотропии сверхтонкого взаимодействия: $A_{\parallel}/A_{\perp} = 2, 1$ и $1/2$.

В частности, рис. 4, *a* подтверждает наличие ядерной спиновой прецессии в малых магнитных полях. При этом в согласии с описанными выше предельными случаями для изотропного сверхтонкого взаимодействия пик в спектре узкий и расположен на низкой частоте, а для случаев $A_{\parallel}/A_{\perp} = 2$ и $1/2$ пик широкий и расположен на конечной и нулевой частотах, соответственно.

Из рис. 4, *c* следует, что в больших магнитных полях спектр, в согласии с предыдущим анализом, центрирован на частоте $A_{\parallel}/(2\hbar)$, а его ширина контролируется величиной A_{\perp} . Панель (*b*) на рис. 4 показывает переход между двумя предельными случаями.

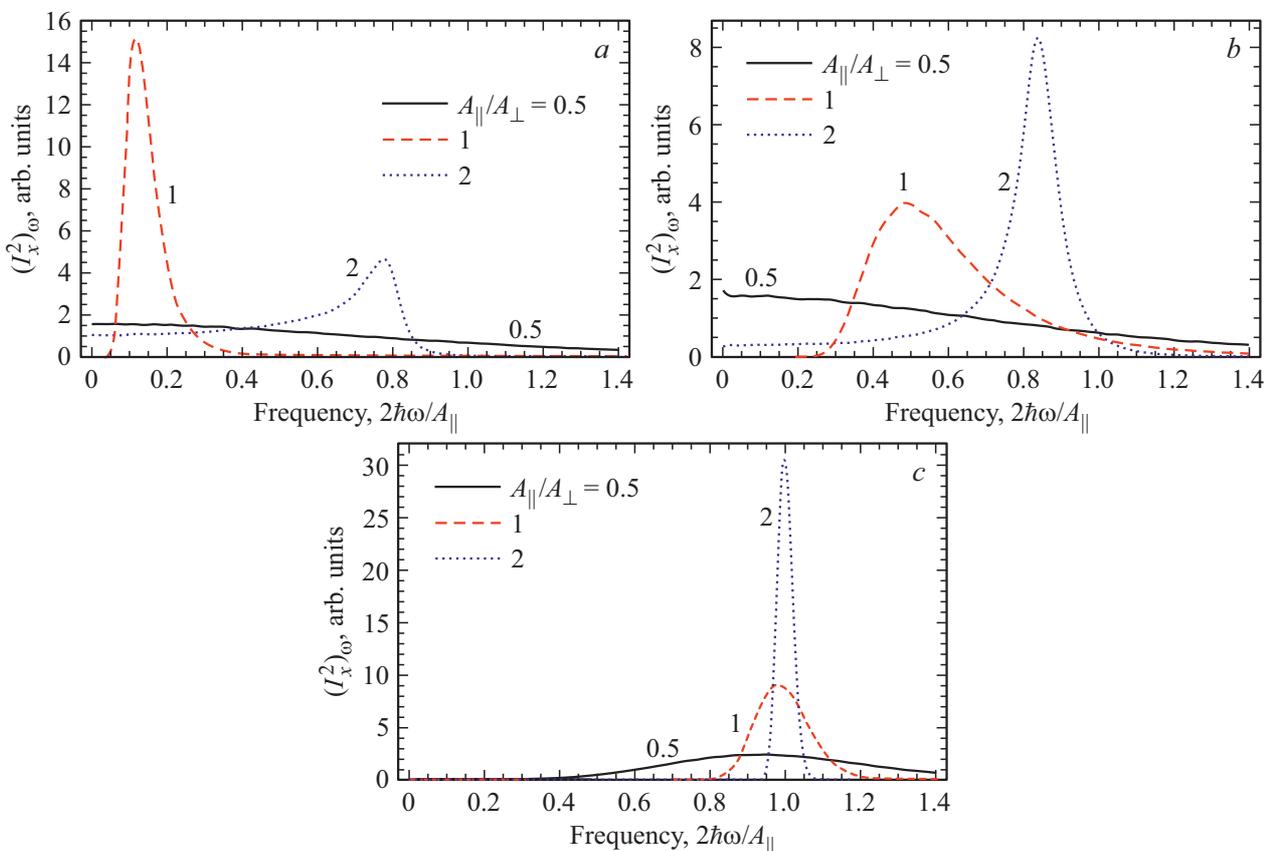


Рис. 4. Спектры спинового шума, рассчитанные численно по формуле (26), для различных магнитных полей $(\hbar\Omega_B/A_{\parallel})\sqrt{2/N} = 0.2$ (*a*), 1 (*b*) и 10 (*c*) для анизотропий сверхтонкого взаимодействия, указанных в легендах.

5. Обсуждение и выводы

Описание ядерной спиновой динамики на основе точной диагонализации гамильтониана было выполнено в данной работе для состояний, представляющих собой суперпозицию двух собственных волновых функций. В реальности ядерное спиновое состояние с заданным средним значением I , как правило, является когерентным коллективным ядерным спиновым состоянием, то есть суперпозицией $\sim \sqrt{I}$ собственных волновых функций. Однако, для большого I величина \sqrt{I} относительно мала, так что полученные нами результаты остаются в силе.

Более того, в рамках данной модели можно также рассматривать когерентные суперпозиции состояний с различным направлением электронного спина. Однако, так как спиновая динамика ядер является медленной, то электронная спиновая когерентность в реальных системах на соответствующих временах скорее всего не будет сохраняться. Это, тем не менее, не препятствует применению развитой теории для описания ядерной спиновой динамики, ядерного спинового шума, а также для генерации запутанных и сжатых ядерных спиновых состояний [24] на временах вплоть до времени продольной электронной спиновой релаксации. В квантовых точках типа A_3B_5 эти времена типично составляют единицы микросекунд.

Существенным недостатком рассмотренной модели является приближение однородного сверхтонкого взаимодействия, которое обычно не выполняется. Тем не менее, предыдущие исследования указывают на качественную применимость модели ящика [25,31–34], в частности, для подансамбля ядер вблизи центра электронной волновой функции константы сверхтонкого взаимодействия близки друг к другу. Также интересным обобщением модели могло бы быть рассмотрение различных направлений главной оси сверхтонкого взаимодействия и внешнего магнитного поля.

Одним из интересных применений развитой теории является описание электрических свойств органических полупроводников. Оказывается что во многих из них сверхтонкое взаимодействие между спинами электронов и ядер молекул существенно влияет на проводимость даже при комнатной температуре [35]. Ранее нами было показано, что спиновый шум ядер приводит в этих материалах к шумам тока [36]. Их измерение могло бы дать важную информацию о деталях сверхтонкого взаимодействия в органических полупроводниках.

Такое измерение, однако, затрудняется другими источниками низкочастотного шума, например, широким разбросом вероятностей прыжков электронов между молекулами [37]. Представляется, что вклад, связанный с ядерными спиновыми флуктуациями, легче выделить в том случае, когда он представляет собой пик на конечной частоте, превышающей ширину пика. Ранее мы показали, что такая ситуация реализуется при изотропном сверхтонком взаимодействии в достаточно сильном

магнитном поле, $\hbar\Omega_B \gtrsim A\sqrt{N}$. В этом случае, однако, влияние спинов ядер на проводимость подавлено и амплитуда флуктуаций тока, вызванных, спиновым шумом ядер, мала.

Результат же этой работы говорит о том, что спектр спинового шума имеет пик на конечной частоте даже в нулевом магнитном поле, если сверхтонкое взаимодействие более эффективно вдоль оси z , $A_{\parallel} > A_{\perp}$. Этот режим, по нашему мнению, является наиболее перспективным для экспериментального обнаружения шума тока, вызванного спиновым шумом ядер. В то же время, именно его можно ожидать в виду преимущественного p -типа электронных состояний в органических молекулах. Для таких состояний вклад анизотропного диполь-дипольного сверхтонкого взаимодействия оказывается сопоставим со вкладом изотропного контактного взаимодействия [38]. Конкретный вид тензора взаимодействия, также как и возможность использования модели ящика, определяются конфигурацией молекул и должны выясняться отдельно для каждого органического полупроводника.

В заключение, в данной работе при помощи точной диагонализации гамильтониана модели ящика были получены аналитические выражения для спиновой динамики ядер для большого количества ядерных спинов с учетом анизотропии сверхтонкого взаимодействия. Эти выражения позволили рассчитать спектры спинового шума и получить для них аналитические выражения в ряде предельных случаев. Ключевым результатом является предсказание ядерной спиновой прецессии в нулевом магнитном поле, что может быть использовано для детектирования индуцированных ядрами шумов тока в органических полупроводниках.

Благодарности

Мы благодарим Л. Ланку за полезные обсуждения, орг. комитет Совещания по теории твердого тела за мотивацию к написанию работы, а также за частичную финансовую поддержку фонд развития теоретической физики и математики „БАЗИС“, грант президента РФ № МК-5158.2021.1.2, и грант РФФИ № 19-02-00184. Аналитический расчет спектров спинового шума был выполнен Д.С.С. при поддержке гранта РНФ 21-72-10035.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] E.L. Ivchenko, G.E. Pikus. Superlattices and other heterostructures. Springer (1997).
- [2] А.И. Екимов, А.А. Онущенко. Письма в ЖЭТФ **34**, 363 (1981).

- [3] A.I. Ekimov, A.L. Efros, A.A. Onushchenko. *Solid State Commun.* **56**, 921 (1985).
- [4] M. Grundmann, J. Christen, N.N. Ledentsov, J. Böhrer, D. Bimberg, S.S. Ruvimov, P. Werner, U. Richter, U. Gösele, J. Heydenreich, V.M. Ustinov, A.Yu. Egorov, A.E. Zhukov, P.S. Kop'ev, Zh.I. Alferov. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4043 (1995).
- [5] M.M. Glazov. *Electron and Nuclear Spin Dynamics in Semiconductor Nanostructures*. Oxford University Press, Oxford (2018).
- [6] D.S. Smirnov, M.M. Glazov, E.L. Ivchenko, L. Lanco. *Phys. Rev. B* **92**, 115305 (2015).
- [7] I.A. Merkulov, A.L. Efros, M. Rosen. *Phys. Rev. B* **65**, 205309 (2002).
- [8] *Spin physics in semiconductors* / Ed. M.I. Dyakonov. Springer International Publishing AG, Berlin (2017).
- [9] D.S. Smirnov, E.A. Zhukov, D.R. Yakovlev, E. Kirstein, M. Bayer, A. Greilich. *Phys. Rev. B* **102**, 235413 (2020).
- [10] J.M. Kikkawa, D.D. Awschalom. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4313 (1998).
- [11] A. Greilich, D.R. Yakovlev, A. Shabaev, A.L. Efros, I.A. Yugova, R. Oulton, V. Stavarache, D. Reuter, A. Wieck, M. Bayer. *Science* **313**, 341 (2006).
- [12] D.S. Smirnov, E.A. Zhukov, E. Kirstein, D.R. Yakovlev, D. Reuter, A.D. Wieck, M. Bayer, A. Greilich, M.M. Glazov. *Phys. Rev. B* **98**, 125306 (2018).
- [13] E.A. Zhukov, E. Kirstein, D.S. Smirnov, D.R. Yakovlev, M.M. Glazov, D. Reuter, A.D. Wieck, M. Bayer, A. Greilich. *Phys. Rev. B* **98**, 121304(R) (2018).
- [14] Д.С. Смирнов, В.Н. Манцевич, М.М. Глазов. *УФН* **191**, 973 (2021).
- [15] J. Wiegand, D.S. Smirnov, J.H. Hübner, M.M. Glazov, M. Oestreich. *Phys. Rev. B* **97**, 081403(R) (2018).
- [16] D.S. Smirnov, T.S. Shamirzaev, D.R. Yakovlev, M. Bayer. *Phys. Rev. Lett.* **125**, 156801 (2020).
- [17] T.S. Shamirzaev, A.V. Shumilin, D.S. Smirnov, J. Rautert, D.R. Yakovlev, M. Bayer. *Phys. Rev. B* **104**, 115405 (2021).
- [18] A.M. Waeber, G. Gillard, G. Ragunathan, M. Hopkinson, P. Spencer, D.A. Ritchie, M.S. Skolnick, E.A. Chekhovich. *Nature Commun.* **10**, 1 (2019).
- [19] D.A. Gangloff, G. Éthier-Majcher, C. Lang, E.V. Denning, J.H. Bodey, D.M. Jackson, E. Clarke, M. Hugues, C. Le Gall, M. Atatüre. *Science* **364**, 62 (2019).
- [20] E.A. Chekhovich, S.F.C. da Silva, A. Rastelli. *Nat. Nanotech.* **15**, 999 (2020).
- [21] D.M. Jackson, D.A. Gangloff, J.H. Bodey, L. Zaporski, C. Bachorz, E. Clarke, M. Hugues, C. Le Gall, M. Atatüre. *Nature Phys.* **17**, 585 (2021).
- [22] J.M. Taylor, C.M. Marcus, M.D. Lukin. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 206803 (2003).
- [23] Г.Г. Козлов. *ЖЭТФ* **132**, 918 (2007).
- [24] A.V. Shumilin, D.S. Smirnov. *Phys. Rev. Lett.* **126**, 216804 (2021).
- [25] N. Fröhling, F.B. Anders, M. Glazov. *Phys. Rev. B* **97**, 195311 (2018).
- [26] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика: нерелятивистская теория*. Наука, М. (1974).
- [27] D.S. Smirnov, K.V. Kavokin. *Phys. Rev. B* **101**, 235416 (2020).
- [28] F. Berski, J. Hübner, M. Oestreich, A. Ludwig, A.D. Wieck, M.M. Glazov. *Phys. Rev. Lett.* **115**, 176601 (2015).
- [29] I.I. Ryzhov, G.G. Kozlov, D.S. Smirnov, M.M. Glazov, Y.P. Efimov, S.A. Eliseev, V.A. Lovtcius, V.V. Petrov, K.V. Kavokin, A.V. Kavokin, V.S. Zapasskii. *Sci. Rep.* **6**, 21062 (2016).
- [30] D.S. Smirnov. *Phys. Rev. B* **91**, 205301 (2015).
- [31] A. Imamoglu, E. Knill, L. Tian, P. Zoller. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 017402 (2003).
- [32] E.M. Kessler, S. Yelin, M.D. Lukin, J.I. Cirac, G. Giedke. *Phys. Rev. Lett.* **104**, 143601 (2010).
- [33] T. Nutz, E. Barnes, S.E. Economou. *Phys. Rev. B* **99**, 035439 (2019).
- [34] A. Ricottone, Y.N. Fang, W.A. Coish. *Phys. Rev. B* **102**, 085413 (2020).
- [35] W. Wagemans, B. Koopmans. *Phys. Status Solidi B* **248**, 1029 (2011).
- [36] D.S. Smirnov, A.V. Shumilin. *Phys. Rev. B* **103**, 195440 (2021).
- [37] A. Massé, P. Friederich, F. Symalla, F. Liu, V. Meded, R. Coehoorn, W. Wenzel, P.A. Bobbert. *Phys. Rev. B* **95**, 115204 (2017).
- [38] Z.G. Yu, F. Ding, H. Wang. *Phys. Rev. B* **87**, 205446 (2013).

Редактор Т.Н. Василевская