

# ТОЧНО РЕШАЕМАЯ СПИНОВАЯ ДИНАМИКА ЭЛЕКТРОНА, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕГО С БОЛЬШИМ ЧИСЛОМ ЯДЕР, И ЭЛЕКТРОННО-ЯДЕРНОЕ СПИНОВОЕ ЭХО В КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ

**Г. Г. Козлов\***

*Институт физики при Санкт-Петербургском государственном университете  
198504, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 12 апреля 2007 г.

Рассматриваемая в статье модель в настоящее время применяется для описания спиновой динамики в квантовых точках после оптического возбуждения. На основе точной диагонализации модельного гамильтониана решаются задачи о распаде электронной спиновой поляризации и о зависимости остаточной поляризации от магнитного поля. Показана важная роль ядерного состояния и предложены методы его расчета для различных режимов оптического возбуждения. В рассматриваемой системе предсказан эффект спинового эха после приложения  $\pi$ -импульса магнитного поля.

PACS: 75.10.Jm, 03.65.Yz, 03.67.Pp

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Система, состоящая из электронного спина, связанного с большим количеством ядерных спинов, давно известна в ЭПР- и ЯМР-спектроскопии. Соответствующая математическая модель, относящаяся к типичным для ЭПР и ЯМР большим внешним магнитным полям, достаточно хорошо изучена. Возникший в последнее время интерес к этой модели в слабых магнитных полях связан с появлением новых физических объектов — квантовых точек, спиновая динамика которых, возможно, с достаточной точностю может быть описана такой моделью. Современные импульсные лазеры позволяют «приготавливать» спин электрона квантовой точки в состоянии с заданной проекцией, а наблюдение временной зависимости степени поляризации люминесценции позволяет регистрировать динамику спина. Общая картина динамики электронного спина в этих экспериментах достаточно полно отражена в соответствующих теоретических работах (см. обзор [1]). При этом используется спиновый гамильтониан, известный в ЭПР-спектроскопии свободных радикалов и подобных систем. Несмотря на достаточно большое число

публикаций по этой тематике [2–10], то обстоятельство, что в случае однородной электронной плотности на ядрах подобный гамильтониан допускает точную диагонализацию, фактически не используется. В работах [11, 12] упомянуто о возможности получения точного решения и показано (путем сличения с численными расчетами, проведенными для системы с двадцатью ядрами), что для расчета спиновой динамики электрона допущение об однородной электронной плотности на ядрах является вполне приемлемым. Отметим также, что описываемая ниже система имеет большое число степеней свободы, и точное решение связанных с ней кинетических задач может представлять самостоятельный интерес.

Опишем рассматриваемую в работе систему и приведем основные результаты. Система представляет собой электрон со спином  $1/2$ , контактно взаимодействующий с четным числом  $2N$  ядер, каждое из которых также имеет спин  $1/2$ . Взаимодействие электрона с каждым ядром не зависит от номера ядра. Гамильтониан задачи имеет вид

$$H = \omega S_z + A_{\parallel} S_z I_z + A_{\perp} (S_+ I_- + S_- I_+), \quad (1)$$

---

\*E-mail: gkozlov@photonics.phys.spbu.ru

$$\mathbf{I} = \sum_{\alpha=1}^{2N} \mathbf{I}_{\alpha}, \quad I_{\alpha}^2 = \frac{3}{4}. \quad (2)$$

Здесь  $S_z$  и  $I_z$  —  $z$ -проекции соответственно электронного спина и полного ядерного момента.  $S_{\pm}(I_{\pm}) = S_x(I_x) \pm iS_y(I_y)$  — стандартные операторы повышения и понижения  $z$ -проекции электронного (полного ядерного) спина,  $\omega$  — внешнее магнитное поле, выраженное в частотных единицах,  $A_{\parallel}$  и  $A_{\perp}$  — компоненты тензора сверхтонкого взаимодействия.

Работа построена следующим образом. В разд. 2 показано, что гамильтониан (1) может быть точно диагонализован. В разд. 3 выводятся формулы для расчета временной динамики первоначально поляризованного электронного спина для заданной начальной ядерной матрицы плотности. Эти результаты частично и не совсем точно представлены в работе [11] без вывода.

Раздел 4 посвящен ядерной динамике. Рассматривается типичный для экспериментов с квантовыми точками случай периодической ориентации электронного спина оптическими импульсами. Получены формулы преобразования ядерной матрицы плотности от импульса к импульсу. Приводятся вычисления стационарных ядерных матриц плотности для режимов знакопостоянной и знакопеременной оптических ориентаций электронного спина. Показано, что в случае знакопостоянной ориентации возникает поляризация ядер, и вычислено ее предельное значение. Показано, что периодические режимы оптической ориентации электронного спина могут сопровождаться появлением регулярности ядерной матрицы плотности по полному ядерному моменту и его проекции. Указанная регулярность проявляется в квазипериодичности динамики электронного спина, отсутствующей в случае, когда ядерное состояние характеризуется бесконечной температурой (в таком состоянии все ядерные состояния равновероятны). Приводятся примеры вычисления динамики электронного спина и зависимости его остаточной поляризации от магнитного поля для различных режимов оптической ориентации. Продемонстрировано существенное отличие этих зависимостей от случая ядерного состояния с бесконечной температурой.

В разд. 5 с использованием развитого в разд. 2 и 3 формализма предсказывается возможность появления эха в динамике электронного спина квантовой точки после  $\pi$ -импульса магнитного поля.

## 2. ДИАГОНАЛИЗАЦИЯ ГАМИЛЬТОНИАНА

Гамильтониан (1) зависит от полного момента всех ядер, поэтому имеет смысл перейти к представлению волновых функций, которые по ядерным переменным были бы собственными функциями операторов квадрата полного ядерного момента и его  $z$ -проекции. Такие функции имеют следующие квантовые числа:  $I$  — квантовое число полного момента, связанное со средним значением квадрата момента как  $\langle I^2 \rangle = I(I+1)$  (в единицах  $\hbar^2$ );  $L$  —  $z$ -проекция полного ядерного момента (в единицах  $\hbar$ ).

Этот набор квантовых чисел, однако, не является полным, поскольку одно и то же значение полного ядерного момента  $I$  можно получить сложением  $2N$  элементарных ядерных моментов  $1/2$  многими способами. Пронумеруем индексом  $\alpha$  набор всех оставшихся квантовых чисел:

$$\Psi_{I,L,\alpha} \equiv |I, L, \alpha\rangle.$$

В этом представлении матрицы операторов квадрата полного момента и его  $z$ -проекции будут диагональны, причем для состояний с заданным квантовым числом квадрата полного момента  $I$  его матрица будет иметь на диагонали числа  $I(I+1)$ , а матрица оператора  $z$ -проекции  $I_z$  — значения проекции

$$L = -I, 1 - I, \dots, I - 1, I.$$

Таким образом, размерность подпространства состояний с заданными числами  $I$  и  $\alpha$  равна  $2I + 1$  — количеству возможных значений  $z$ -проекций  $L$ .

В теории углового момента [13] показывается, что матрицы операторов  $x$ - и  $y$ -проекций полного момента,  $I_x$  и  $I_y$  (и, следовательно,  $I_{\pm}$ ), не имеют матричных элементов между состояниями с различными квантовыми числами полного момента:

$$\langle I, \dots | I_{x,y} | I', \dots \rangle = 0 \quad \text{при } I \neq I'.$$

Это вытекает из коммутативности операторов квадрата полного момента и любой его проекции. Покажем, что набор состояний  $|I, L, \alpha\rangle$  можно выбрать так, что операторы  $I_{\pm}$  будут иметь нулевые матричные элементы также между состояниями, различающимися только квантовым числом  $\alpha$ , даже при одном и том же числе  $I$ . Для этого рассмотрим состояния с заданным полным моментом  $I$  и максимально возможной проекцией  $L = I$  при всевозможных значениях  $\alpha$ :  $|I, I, \alpha\rangle$ . Число таких состояний будет равно числу способов, которым можно получить полный момент  $I$  сложением  $2N$  моментов  $1/2$ . Эти состояния будут линейно независимы, и без потери общности их можно считать нормированными и взаимно ортогональными:

$$\langle I, I, \alpha | I, I, \alpha' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'}.$$

Остальные состояния получим из этих последовательным применением оператора понижения  $z$ -проекции:

$$|I, L, \alpha\rangle = I_-^n |I, I, \alpha\rangle, \quad L = I - n, \quad (3)$$

$$n = 0, 1, \dots, 2I.$$

Покажем, что полученная таким образом система функций ортогональна. В соответствии с теорией углового момента каждая из этих функций является собственной функцией оператора  $z$ -проекции полного момента с собственным числом  $L$ . Поэтому функции, различающиеся квантовым числом  $z$ -проекции полного момента, будут заведомо ортогональны как собственные функции самосопряженного оператора, соответствующие различным собственным числам. Остается показать ортогональность функций, различающихся только квантовым числом  $\alpha$ . Запишем

$$\langle I, I - n, \alpha | I, I - n, \alpha' \rangle = \langle I, I, \alpha | I_+^n I_-^n | I, I, \alpha' \rangle =$$

$$= \langle I, I, \alpha | I_+^{n-1} I_+ I_- I_-^{n-1} | I, I, \alpha' \rangle. \quad (4)$$

В соответствии с теорией углового момента, функция  $I_-^{n-1} |I, I, \alpha'\rangle$  будет обязательно собственной для операторов квадрата полного момента и его проекции, причем собственные числа равны соответственно  $I(I + 1)$  и  $L = I - n + 1$ . Поэтому, принимая во внимание тождество

$$I_+ I_- = \mathbf{I}^2 - I_z^2 + I_z, \quad (5)$$

получаем

$$I_+ I_- I_-^{n-1} |I, I, \alpha' \rangle =$$

$$= \left[ I(I + 1) - L^2 + L \right] I_-^{n-1} |I, I, \alpha' \rangle \Big|_{L=I-n+1} \quad (6)$$

и, следовательно,

$$\langle I, I - n, \alpha | I, I - n, \alpha' \rangle \sim$$

$$\sim \langle I, I, \alpha | I_+^{n-1} I_-^{n-1} | I, I, \alpha' \rangle. \quad (7)$$

Применяя это рассуждение еще  $n - 1$  раз, получаем

$$\langle I, I - n, \alpha | I, I - n, \alpha' \rangle \sim \langle I, I, \alpha | I, I, \alpha' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'}. \quad (8)$$

Таким образом, система функций (3) ортогональна. Из приведенного расчета также следует, что

для этой системы функций операторы  $I_{\pm}$  не имеют матричных элементов между функциями системы (3) с различающимися числами  $\alpha$  — равенство нулю матричного элемента типа  $\langle I, L, \alpha | I_{\pm} | I, L \mp 1, \alpha' \rangle$  при  $\alpha \neq \alpha'$  доказывается выкладкой, аналогичной (4)–(8). При  $\alpha = \alpha'$  эти матричные элементы имеют известные из теории углового момента [13] значения

$$\langle I, L, \alpha | I_+ | I, L - 1, \alpha \rangle = \langle I, L - 1, \alpha | I_- | I, L, \alpha \rangle =$$

$$= \sqrt{I(I + 1) - L(L - 1)}. \quad (9)$$

Изучим теперь матрицу гамильтониана (1) в представлении функций, полученных произведением функций системы (3) (соответствующих ядерным степеням свободы) на волновые функции электронного спина с заданной  $z$ -проекцией  $|S\rangle$ ,  $S = \pm 1/2$ :

$$|S, I, L, \alpha\rangle \equiv |S\rangle |I, L, \alpha\rangle.$$

Во-первых, из изложенного выше вытекает, что эта матрица разбивается на блоки по полному ядерному моменту  $I$ . Размер каждого такого блока равен числу возможных проекций полного ядерного момента, умноженному на число возможных проекций электронного спина, что составляет  $(2I + 1)2$ . Число таких блоков с заданным полным моментом ядер равно числу способов, которым можно получить момент  $I$  сложением  $2N$  элементарных ядерных моментов  $1/2$ , и мы обозначим это число  $\Gamma_N(I)$ . В Приложении показано, что

$$\Gamma_N(I) = C_{2N}^{N-I} - C_{2N}^{N-I-1}, \quad I = 0, 1, \dots, N. \quad (10)$$

Здесь символ « $C$ » означает число сочетаний.

Таким образом, для диагонализации гамильтониана (1) достаточно диагонализовать каждый блок с заданным моментом ядер  $I$ . Расположим базисные функции для этого блока в следующем порядке:

$$|+, I\rangle, |-, I\rangle, |+, I - 1\rangle, \dots, |-, 1 - I\rangle, |+, -I\rangle, |-, -I\rangle.$$

Нетрудно убедиться в том, что для так расположенных базисных функций рассматриваемый блок гамильтониана сам разбивается на блоки — два одномерных, соответствующих крайним состояниям  $|\pm, \pm I\rangle$ , и  $2I$  двумерных. Общий вид двумерного блока, соответствующего состояниям  $|-, L\rangle$   $|+, L - 1\rangle$ , где  $L = I, I - 1, \dots, 1 - I$ , таков:

$$H_{LI} = \begin{pmatrix} -(\omega + A_{\parallel}L)/2 & A_{\perp}\sqrt{I(I+1) - L(L-1)} \\ A_{\perp}\sqrt{I(I+1) - L(L-1)} & (\omega + A_{\parallel}(L-1))/2 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

$L = I, I-1, \dots, 1-I.$

Диагонализация двумерных блоков не вызывает затруднений, возможные значения квантового числа полного момента  $I$  системы  $2N$  ядер с моментом  $1/2$  каждое следующие:  $I = 0, 1, \dots, N$ . Спектр гамильтониана (1) имеет окончательно вид

$$\begin{aligned} E_{LI}^{\pm} = \frac{1}{2} \left\{ -\frac{A_{\parallel}}{2} \pm \left[ \left( \omega + A_{\parallel}L - \frac{A_{\parallel}}{2} \right)^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + 4A_{\perp}^2 [I(I+1) - L(L-1)] \right]^{1/2} \right\}, \quad (12) \\ L = I, \dots, 1-I, \\ E_I^{\pm} = \frac{A_{\parallel}I \pm \omega}{2}, \quad I = 0, 1, \dots, N. \end{aligned}$$

Кратность вырождения каждого значения энергии определяется формулой (10).

### 3. ДИНАМИКА ЭЛЕКТРОННОГО СПИНА

Как уже было сказано во Введении, гамильтониан (1) может описывать спиновую динамику квантовой точки. Предельно упрощая, можно представить себе типичный эксперимент следующим образом. Короткий поляризованный лазерный импульс переводит квантовую точку в возбужденное состояние, которому соответствует возникновение ориентированного по спину возбужденного электрона. Затем динамика спина этого электрона регистрируется по временной зависимости степени поляризации люминесценции. При этом считается, что эта динамика определяется контактным взаимодействием электронного спина с ядрами квантовой точки. Гамильтониан (1) соответствует допущению, что волновая функция возбужденного электрона равномерно «накрывает» все ядра квантовой точки.

Ориентируясь на подобный эксперимент, допустим, что в моменты времени  $t = T_m$ ,  $m = 0, 1, 2, 3, \dots$  на систему действуют короткие мощные оптические импульсы, ориентирующие электронный спин, и сформулируем математическую постановку задачи следующим образом.

1. Будем считать, что сразу после импульса электронная матрица плотности имеет вид

$$\rho^e(T_m + 0) = \text{Sp}_I \rho(T_m + 0) = \begin{pmatrix} \cos^2 \phi & 0 \\ 0 & \sin^2 \phi \end{pmatrix},$$

где символ  $\text{Sp}_I$  обозначает диагональное суммирование полной матрицы плотности после импульса,  $\rho(T_m + 0)$ , по ядерным квантовым числам. Угол  $\phi$  есть мера ориентации электронного спина оптическим импульсом и определяется поляризацией импульса. Случай  $\phi = 0$  или  $\phi = \pi/2$  соответствуют циркулярно поляризованным импульсам, а случай  $\phi = \pi/4$  — линейно поляризованным. Таким образом, наблюдаемые, связанные с электронным спином, при  $t = T_m$ , вообще говоря, испытывают скачок.

2. Будем считать, что все наблюдаемые, относящиеся к ядерной системе, напротив, непрерывны при  $t = T_m$ , т. е. что оптический импульс на них непосредственно не действует. Это соответствует тому, что ядерная матрица плотности

$$\rho^n = \text{Sp}_S \rho \quad (13)$$

непрерывна при  $t = T_m$ , т. е.

$$\rho^n(T_m - 0) = \rho^n(T_m + 0) \equiv \rho^n(T_m).$$

Символ  $\text{Sp}_S$  в (13) соответствует диагональному суммированию полной матрицы плотности по электронным квантовым числам.

3. Знания электронной и ядерной матриц плотности по отдельности при  $t = T_m + 0$ , вообще говоря, не достаточно для однозначного восстановления полной матрицы плотности системы сразу после импульса. Для того чтобы это сделать, необходимо рассмотреть динамику системы в процессе импульса. Это выходит за рамки настоящей работы. Ниже мы принимаем простейшее предположение, совместимое с перечисленными выше требованиями, что полная матрица плотности сразу после импульса может быть представлена как произведение ядерной матрицы плотности до импульса на электронную матрицу плотности, соответствующую ориентации электронного спина:

$$\rho(T_m + 0) = \rho^n(T_m) \begin{pmatrix} \cos^2 \phi & 0 \\ 0 & \sin^2 \phi \end{pmatrix}. \quad (14)$$

4. Допустим, что в самом начале эксперимента ядерная матрица плотности соответствовала бесконечноной температуре ядерной подсистемы. В этом случае все ядерные состояния равновероятны.

5. Требуется найти динамику системы при воздействии последовательности оптических импульсов.

Поставленную таким образом задачу можно последовательно решить. Прежде всего покажем, что при сделанных выше допущениях ядерная матрица плотности в процессе эксперимента будет всегда диагональной в представлении с заданными полным ядерным моментом и его проекцией.

Пусть при  $t = 0$  на систему подействовал самый первый оптический импульс, ориентирующий электронный спин. Тогда при  $t = +0$  электронный спин стал равен  $(\cos^2 \phi - \sin^2 \phi)/2$ , а ядерное состояние по-прежнему соответствует бесконечной температуре ядерной подсистемы. Запишем соответствующую матрицу плотности (14) в представлении  $|S, I, L, \alpha\rangle$ , использованном в предыдущем разделе:

$$\langle S, I, L, \alpha | \rho | S', I', L', \alpha' \rangle = 2^{-2N} \delta_{SS'} \delta_{II'} \delta_{LL'} \delta_{\alpha\alpha'} \times \\ \times \begin{cases} \cos^2 \phi, & S = 1/2, \\ \sin^2 \phi, & S = -1/2. \end{cases} \quad (15)$$

В соответствии с изложенным в предыдущем разделе, гамильтониан (1) разбивается на блоки по полному моменту ядер  $I$  (будем называть их  $I$ -блоки), а внутри каждого такого блока — на два одномерных блока и  $2I$  двумерных блоков. Будем называть последние  $LI$ -блоками, причем  $L$  — проекция полного ядерного момента, соответствующая левому верхнему углу блока (11). Для того чтобы представить себе топографию матриц, фигурирующих в рассматриваемой задаче, на рис. 1 показан блок, соответствующий состояниям с  $I = 1$ . Символами «+» и «-» обозначены ненулевые элементы матрицы плотности (15) в этом блоке, относящиеся к проекциям электронного спина соответственно  $+1/2$  и  $-1/2$ . Ненулевые элементы гамильтониана (1) заштрихованы. Поскольку начальная матрица плотности (15) диагональна, в процессе развития у матрицы плотности могут появиться ненулевые элементы только там, где матричные элементы гамильтониана отличны от нуля, т. е. на заштрихованных местах. Таким образом, полная матрица плотности при начальном условии (15) будет иметь ту же топографию что и гамильтониан, т. е. будет блочно-диагональной.

Теперь допустим, что на рассматриваемую систему подействовал второй оптический импульс, поляризующий электронный спин. В соответствии с описанной выше постановкой задачи матрица плотности системы сразу после второго импульса будет иметь вид (14). Для получения элемента  $\rho_{LL}^n$  фигурирующей в (14) ядерной матрицы плотности

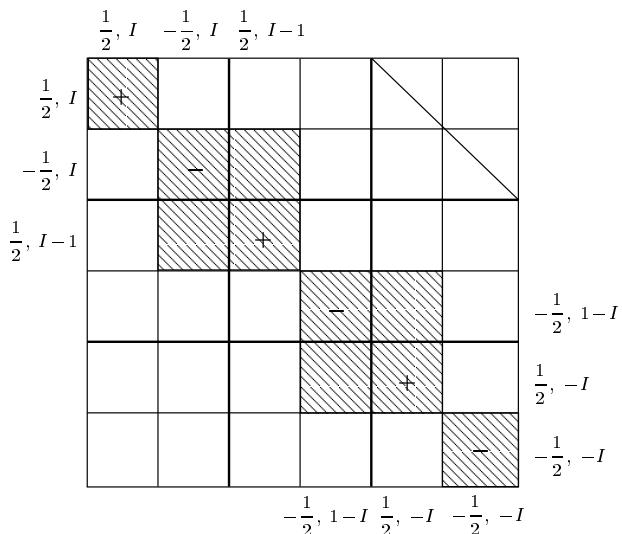


Рис. 1. Распределение матричных элементов (топография) блока с полным моментом  $I = 1$ . Заштрихованы ненулевые матричные элементы гамильтониана, жирными линиями показаны блоки с заданной проекцией ядерного момента

необходимо провести суммирование элементов полной матрицы плотности на диагонали двумерного блока, соответствующего этим ядерным состояниям. Например, для получения элемента  $\rho_{1,-1}^n$  (рис. 1) нужно провести диагональное суммирование верхнего правого блока — соответствующие матричные элементы полной матрицы плотности находятся в перечеркнутых клетках. Все блоки, диагональное суммирование которых необходимо для получения ядерной матрицы плотности, разделены на рис. 1 жирными линиями. Поскольку ненулевые матричные элементы полной матрицы плотности находятся в заштрихованных клетках, из рис. 1 видно, что в нашем случае ядерная матрица плотности после второго импульса будет диагональна в представлении полного ядерного момента и его проекции. Применяя аналогичное рассуждение для третьего, четвертого и т. д. импульсов, получаем по индукции, что для рассматриваемой задачи ядерная матрица плотности всегда диагональна в представлении полного ядерного момента и его проекции.

Поскольку вся задача распадается на блоки по полному моменту ядер  $I$ , обозначим через  $U_{LI}$ ,  $L = -I, 1 - I, \dots, I - 1, I$  диагональные элементы ядерной матрицы плотности блока  $I$ . Для полной идентификации блока следовало бы указать также соответствующее ему квантовое число  $\alpha$  нашего представления, но от него никакие наблюдаемые не

зависят, и мы не будем его выписывать. Внутри блока с заданным  $I$  могут быть выделены двумерные  $LI$ -блоки, соответствующие блокам гамильтониана  $H_{LI}$  (11). Этим блокам соответствуют двумерные  $LI$ -блоки матрицы плотности, которые мы обозначим  $\Theta_{LI}$  и которые удовлетворяют уравнениям

$$i\dot{\Theta}_{LI} = [H_{LI}, \Theta_{LI}]. \quad (16)$$

Квантовомеханические задачи, связанные с двумерными матрицами, хорошо изучены, и ниже мы пользуемся применяемой при решении этих задач терминологией. Удобно выразить матрицу  $H_{LI}$  через матрицы Паули  $\sigma_{x,y,z}$ :

$$H_{LI} = -\frac{A_{\parallel}}{4} + b_{LI}\sigma_z + c_{LI}\sigma_x, \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned} b_{LI} &= A_{\parallel} \left( \frac{1}{2} - L \right) - \omega, \\ c_{LI} &= 2A_{\perp} \sqrt{I(I+1) - L(L-1)}. \end{aligned} \quad (18)$$

Искомая матрица плотности  $\Theta_{LI}$  также может быть выражена через единичную матрицу (коэффициент при ней обозначим  $\theta_0^{LI}$ ) и матрицы Паули:

$$\Theta_{LI} = \theta_0^{LI} + \theta_x^{LI}\sigma_x + \theta_y^{LI}\sigma_y + \theta_z^{LI}\sigma_z. \quad (19)$$

Здесь величины  $\theta_{x,y,z}^{LI}$  представляют собой компоненты так называемого вектора Блоха [14]. Тогда стандартное решение задачи о динамике двухуровневой системы дает для вектора Блоха соотношение

$$\theta^{LI}(t) = \mathbf{M}^{LI}(t)\theta^{LI}(0), \quad (20)$$

где матрица  $\mathbf{M}^{LI}$  определяется следующим образом:

$$\mathbf{M}^{LI}(t) = \begin{pmatrix} 1 + \frac{b^2}{\Omega^2}(\cos \Omega t - 1) & -\frac{b}{\Omega} \sin \Omega t & \frac{bc}{\Omega^2}(1 - \cos \Omega t) \\ \frac{b}{\Omega} \sin \Omega t & \cos \Omega t & -\frac{c}{\Omega} \sin \Omega t \\ \frac{bc}{\Omega^2}(1 - \cos \Omega t) & \frac{c}{\Omega} \sin \Omega t & 1 + \frac{c^2}{\Omega^2}(\cos \Omega t - 1) \end{pmatrix}, \quad (21)$$

$$b = b_{LI}, \quad c = c_{LI}, \quad \Omega = \Omega_{LI} = \sqrt{b^2 + c^2}.$$

Пусть оптический импульс создает электрон в частично поляризованном состоянии с матрицей плотности

$$\begin{pmatrix} \cos^2 \phi & 0 \\ 0 & \sin^2 \phi \end{pmatrix}. \quad (22)$$

При  $\phi = 0$  ( $\pi/2$ ) электронный спин имеет начальное значение  $1/2$  ( $-1/2$ ).

Для начального состояния типа (14), где ядерная матрица плотности имеет только диагональные элементы  $U_{LI}$ , начальное условие для блока  $LI$  полной матрицы плотности будет таким:

$$\Theta_{LI}(0) = \begin{pmatrix} U_{LI} \sin^2 \phi & 0 \\ 0 & U_{L-1,I} \cos^2 \phi \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Для начального вектора Блоха и величины  $\theta_0$  блока  $LI$  это дает

$$\begin{aligned} \theta^{LI}(0) &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ U_{LI} \sin^2 \phi - U_{L-1,I} \cos^2 \phi \end{pmatrix}, \\ \theta_0^{LI} &= \frac{1}{2}(U_{LI} \sin^2 \phi + U_{L-1,I} \cos^2 \phi). \end{aligned} \quad (24)$$

Вклад блока  $LI$  в среднее значение электронного спина есть  $-\text{Sp } \Theta_{LI}(t)\sigma_z$ . Удобно пользоваться удвоенной величиной, которую мы обозначим

$$\Delta_{LI}(t) = -2 \text{Sp } \Theta_{LI}(t)\sigma_z = -\theta_z^{LI}. \quad (25)$$

Из выражений (20), (21) и (24) следует, что

$$\begin{aligned} \Delta_{LI}(t) &= \left( U_{L-1,I} \cos^2 \phi - U_{LI} \sin^2 \phi \right) \times \\ &\times \left[ 1 + \frac{c_{LI}^2}{\Omega_{LI}^2} (\cos \Omega_{LI} t - 1) \right]. \end{aligned} \quad (26)$$

При вычислении вклада блока с заданным полным моментом  $I$  нужно также учесть два крайних одномерных блока, которые дают следующий не зависящий от времени вклад в среднее значение электронного спина:

$$(U_{I,I} \cos^2 \phi - U_{-I,I} \sin^2 \phi)/2.$$

Тогда общая формула для временной динамики  $z$ -проекции электронного спина, приготовленного в состоянии (22) в момент времени  $t = 0$ , при начальной ядерной матрице плотности  $U_{LI}$  имеет вид

$$\langle S(t) \rangle = \frac{1}{2} \sum_{I=0}^N \Gamma_N(I) \times \\ \times \left[ \sum_{L=1-I}^I \Delta_{LI}(t) + U_{I,I} \cos^2 \phi - U_{-I,I} \sin^2 \phi \right], \quad (27)$$

где

$$\Delta_{LI}(t) = \left( U_{L-1,I} \cos^2 \phi - U_{LI} \sin^2 \phi \right) \times \\ \times \left[ 1 + \frac{c_{LI}^2}{\Omega_{LI}^2} (\cos \Omega_{LI} t - 1) \right], \\ b_{LI} = A_{\parallel} (1/2 - L) - \omega, \\ c_{LI} = 2A_{\perp} \sqrt{I(I+1) - L(L-1)}, \\ \Omega_{LI}^2 = b_{LI}^2 + c_{LI}^2, \quad \Gamma_N(I) = C_{2N}^{N-I} - C_{2N}^{N-I-1}.$$

Часто интересуются остаточной поляризацией электрона, т. е. значением проекции электронного спина на столь больших временах, что эта проекция уже перестает меняться. Это значение можно получить из формул (27), удалив зависящую от времени составляющую в каждом из вкладов, т. е. путем замены

$$\Delta_{LI} \rightarrow \Delta_{LI}^{st} = \left( U_{L-1,I} \cos^2 \phi - U_{LI} \sin^2 \phi \right) \times \\ \times \left( 1 - \frac{c_{LI}^2}{\Omega_{LI}^2} \right) = \\ = \left( U_{L-1,I} \cos^2 \phi - U_{LI} \sin^2 \phi \right) \frac{b_{LI}^2}{\Omega_{LI}^2}. \quad (28)$$

Для случая изотропного контактного взаимодействия ( $2A_{\perp} = A_{\parallel} \equiv A$ ), нулевого магнитного поля ( $\omega = 0$ ), полностью поляризованного ориентирующего импульса ( $\phi = 0$ ), бесконечной температуры ядерной подсистемы (при этом ядерная матрица плотности имеет вид  $U_{LI} = 2^{-2N}$ ) и  $2N \gg 1$  возможно получить для динамики электрона простую формулу. Для этого заметим, что

- 1) в этом случае частоты  $\Omega_{LI} = AI$  не зависят от квантового числа проекции момента;
- 2) при  $2N \gg 1$  можно считать, что  $c_{LI}^2 = A^2(I^2 - L^2)$ ;

3) для статистического веса  $\Gamma_N(I)$  (10) можно применить асимптотическое выражение

$$\Gamma_N(I) = -\frac{2^{2N}}{\sqrt{\pi N}} \frac{d}{dI} \exp \left( -\frac{I^2}{N} \right). \quad (29)$$

Тогда, заменяя в выражении (27) суммирования на интегрирования и вычисляя соответствующие интегралы, можно получить, что в этом случае

$$\langle S(t) \rangle = \frac{1}{6} + \frac{1}{3} \left( 1 - \frac{NA^2 t^2}{2} \right) \exp \left( -\frac{NA^2 t^2}{4} \right). \quad (30)$$

Формула сходная с (30) была получена в работе [2] из интуитивных соображений о ядерном поле и его статистике.

Как видно из выражения (27), динамика электронного спина зависит от ядерного состояния, которое, в свою очередь, может изменяться при периодической ориентации электронного спина оптическим импульсом. Поэтому в следующем разделе мы получим законы преобразования ядерных матриц плотности от импульса к импульсу и проведем вычисление стационарных ядерных матриц плотности для различных режимов периодической оптической ориентации электронного спина.

## 4. ЯДЕРНАЯ ДИНАМИКА

### 4.1. Преобразование ядерной матрицы плотности при оптической ориентации

Как было показано в предыдущем разделе, блоки матрицы плотности, соответствующие состояниям с заданным полным моментом  $I$ , ведут себя независимо. Поэтому всюду ниже мы будем иметь в виду только какой-либо один такой блок, для которого поставим следующую задачу.

1. Пусть на нашу систему, состоящую из электронного спина и связанных с ним  $2N$  ядер, периодически с периодом  $T$  действуют ориентирующие электронный спин оптические импульсы, создающие в моменты  $T_m = mT$  состояния типа (14).

2. Пусть блок ядерной матрицы плотности, соответствующий состояниям с полным моментом  $I$ , к приходу  $n$ -го импульса имеет диагональные элементы  $U_{LI}^n$ .

3. Найти элементы этого блока  $U_{LI}^{n+1}$  к приходу  $n+1$ -го импульса.

Как уже было сказано, в нашем случае ядерная матрица плотности всегда диагональна, и для получения ее элементов нужно просуммировать диагональные элементы диагонального двумерного блока

ка полной матрицы плотности с заданным значением проекции полного ядерного момента и различающейся проекцией электронного спина. Заметим, что эти блоки не совпадают с  $LI$ -блоками. На рис. 1 эти блоки ограничены жирными линиями, тогда как  $LI$ -блоки заштрихованы. Имея это в виду, можно получить следующее выражение для диагональных элементов ядерной матрицы плотности через элементы матриц плотности блоков  $LI$  и их параметры (19):

$$\begin{aligned} U_{LI} &= \Theta_{22}^{L+1,I} + \Theta_{11}^{LI} = \\ &= \theta_0^{L+1,I} + \theta_0^{LI} - \frac{1}{2}(\theta_z^{L+1,I} - \theta_z^{LI}). \end{aligned} \quad (31)$$

Для предельных значений  $L = \pm I$  следует положить

$$\Theta_{22}^{I+1,I} \equiv U_{II}, \quad \Theta_{11}^{-I,I} \equiv U_{-II}. \quad (32)$$

Используя результаты предыдущего раздела и вводя зависящие от периода следования ориентирующих оптических импульсов величины

$$\Phi_{LI} \equiv \frac{1}{2} \left( \frac{c_{LI}}{\Omega_{LI}} \right)^2 \left[ \cos(\Omega_{LI}T) - 1 \right], \quad (33)$$

можно получить следующие формулы преобразования ядерной матрицы плотности от импульса к импульсу:

$$\begin{aligned} U_{LI}^{n+1} &= U_{LI}^n [1 + \Phi_{LI} \sin^2 \phi + \Phi_{L+1,I} \cos^2 \phi] - \\ &- U_{L-1,I}^n \Phi_{LI} \cos^2 \phi - U_{L+1,I}^n \Phi_{L+1,I} \sin^2 \phi + \\ &+ \frac{U_0 - U_{LI}^n}{\tau}, \end{aligned} \quad (34)$$

$L = I - 1, \dots, 1 - I.$

Для крайних значений  $L = \pm I$  имеем

$$\begin{aligned} U_{II}^{n+1} &= U_{II}^n + \Phi_{II}(U_{II}^n \sin^2 \phi - U_{I-1,I}^n \cos^2 \phi) + \\ &+ \frac{U_0 - U_{II}^n}{\tau}, \end{aligned} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} U_{-II}^{n+1} &= U_{-II}^n - \Phi_{1-I,I}(U_{1-I,I}^n \sin^2 \phi - U_{-II}^n \cos^2 \phi) + \\ &+ \frac{U_0 - U_{-II}^n}{\tau}. \end{aligned} \quad (36)$$

Последние слагаемые в выражениях (34)–(36) учитывают возможную ядерную релаксацию, причем  $\tau$  — время релаксации в единицах  $T$ , а  $U_0 = 2^{-2N}$  — диагональные элементы ядерной матрицы плотности, соответствующей бесконечной температуре ядерной подсистемы.

#### 4.2. Стационарная ядерная матрица плотности в случае периодической знакопостоянной ориентации электронного спина

Если угол  $\phi$  не меняется от импульса к импульсу, то по прошествии достаточно большого времени ядерная матрица плотности перестанет меняться,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} U_{LI}^n = U_{LI}^{st}.$$

Уравнения для стационарной ядерной матрицы плотности можно получить из условий  $U_{LI}^{n+1} = U_{LI}^n = U_{LI}^{st}$ :

$$\begin{aligned} U_{LI}^{st} [\Phi_{LI} \sin^2 \phi + \Phi_{L+1,I} \cos^2 \phi] - U_{L-1,I}^{st} \Phi_{LI} \cos^2 \phi - \\ - U_{L+1,I}^{st} \Phi_{L+1,I} \sin^2 \phi + \frac{U_0 - U_{LI}^{st}}{\tau} = 0, \end{aligned} \quad (37)$$

$L = I - 1, \dots, 1 - I.$

Для крайних значений  $L = \pm I$  имеем

$$\Phi_{II}(U_{II}^{st} \sin^2 \phi - U_{I-1,I}^{st} \cos^2 \phi) + \frac{U_0 - U_{II}^{st}}{\tau} = 0, \quad (38)$$

$$\begin{aligned} -\Phi_{1-I,I}(U_{1-I,I}^{st} \sin^2 \phi - U_{-II}^{st} \cos^2 \phi) + \\ + \frac{U_0 - U_{-II}^{st}}{\tau} = 0. \end{aligned} \quad (39)$$

Поскольку блоки  $I$  матрицы плотности ведут себя независимо, должно выполняться условие нормировки

$$\sum_{L=-I}^I U_{LI} = (2I+1)U_0, \quad I = 0, 1, 2, \dots, N. \quad (40)$$

Нормировка полной ядерной матрицы плотности имеет вид

$$\sum_{I=0}^N \Gamma_N(I) \sum_{L=-I}^I U_{LI} = 1. \quad (41)$$

Несложно убедиться в том, что при отсутствии релаксации ( $\tau \rightarrow \infty$ ) и  $\phi = 0$  ( $\phi = \pi/2$ ) стационарная ядерная матрица плотности соответствует полной поляризации ядерного момента в блоке  $I$ :

$$U_{LI}^{st} = 0, \quad L \neq I(-I),$$

и

$$U_{II}^{st}(U_{-II}^{st}) = U_0(2I+1).$$

(Заметим, что это не соответствует полной поляризации ядер в целом — такому состоянию соответствовала бы ядерная матрица плотности, у которой все

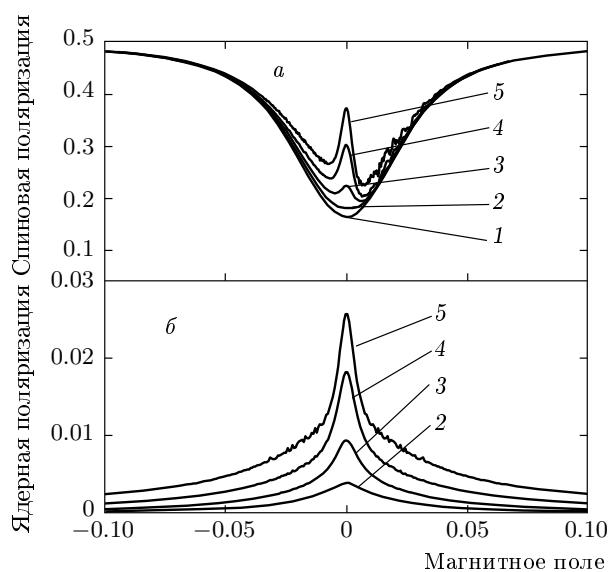
блоки  $I$  были бы пустые, за исключением блока с  $I = N$ , в котором было бы заселено лишь состояние с максимальной по модулю проекцией  $L = \pm N$ .) Когда накачка производится линейно поляризованными оптическими импульсами (т. е.  $\phi = \pi/4$ ), прямая проверка показывает, что в этом случае стационарной является матрица плотности  $U_{LI} = U_0$ , соответствующая случаю бесконечной температуры ядерной подсистемы.

В случае  $\tau \neq \infty$  и полной оптической ориентации, например при  $\phi = 0$ , формулы (37)–(39) дают возможность быстрого рекуррентного вычисления стационарной ядерной матрицы плотности. При этом можно действовать, например, следующим образом:

- 1) с помощью выражения (39) вычисляем  $U_{-II}^{st}$ ;
- 2) с помощью (37) последовательно вычисляем  $U_{LI}^{st}$ ,  $L = 1 - I, \dots, I - 1$ ;
- 3) с помощью (38) получаем  $U_{II}^{st}$ .

Заметим, что для ядерной системы состоящей из 1600 ядер, описанная процедура получения стационарной ядерной матрицы плотности для периодической ориентации электронного спина и вычисление 300 точек полевой зависимости остаточной спиновой поляризации электрона по формулам (27), (28) занимает на современном компьютере несколько секунд. Динамика вычисляется еще быстрее, так как стационарная ядерная матрица плотности для всей временной зависимости одна и та же и вычисляется один раз. При численных расчетах важно иметь в виду следующее. Исследование функции  $\Gamma_N(I)$  (29) (статистического веса момента  $I$ ) показывает, что ее ширина и положение максимума пропорциональны  $\sqrt{N}$ , т. е. функция  $\Gamma_N(I)$  существенно отлична от нуля в области значений  $I \sim \sqrt{N}$ . Поэтому при численных расчетах полезно определить положение  $I_{max}$  максимума функции  $\Gamma_N(I)$  и при вычислении сумм (27) по  $I$  ограничиться областью  $I < (3-4)I_{max}$ . Это существенно укорачивает время вычислений и не приводит к существенной потере точности. Из выражения (29) можно получить, что  $I_{max} = \sqrt{N/2}$ . Таким образом для случая, когда полное число ядер  $2N = 1600$ , имеем  $I_{max} = 20$  и вместо полного суммирования по  $I = 0, 1, 2, \dots, 800$  достаточно просуммировать члены с  $I < 80$ .

Формулы (34)–(36) дают возможность вычисления динамики ядерной матрицы плотности (и всех наблюдаемых, зависящих от ядерных степеней свободы) от импульса к импульсу. Например, проекция ядерного момента  $\langle I_z \rangle$  вычисляется по формуле



**Рис. 2.** Полевые зависимости остаточной спиновой поляризации (*a*) и ядерной поляризации  $\langle I_z \rangle/N$  (*б*) для электрона, находящегося в контакте с 1600 ядрами, при периодической полной ( $\phi = 0$ ) оптической ориентации для различных времен ядерной релаксации  $\tau = 1 \cdot 10^5$  (2),  $3 \cdot 10^5$  (3),  $1 \cdot 10^6$  (4),  $3 \cdot 10^6$  (5). Кривая 1 — расчет для случая бесконечной температуры ядерной подсистемы. Магнитное поле в единицах поля сверхтонкого взаимодействия

$$\langle I_z \rangle = \sum_{I=0}^N \Gamma_N(I) \sum_{-I}^I U_{LI} L. \quad (42)$$

Заметим, что максимальная поляризация ядер (при рассматриваемом воздействии на ядерную систему) получается при полной поляризации внутри блоков состояний с заданным  $I$ , т. е.  $U_{LI} = 0, L \neq I$  и  $U_{II} = U_0(2I + 1)$ . Следовательно, максимальная проекция ядерного момента в нашем случае определяется формулой

$$\langle I_z \rangle_{max} = U_0 \sum_{I=0}^N \Gamma_N(I) (2I + 1) I \approx 2 \sqrt{\frac{N}{\pi}}. \quad (43)$$

Для получения приближенного значения  $\langle I_z \rangle_{max}$  при больших  $N$  мы использовали формулу (29).

#### 4.3. Примеры вычисления спиновой динамики и остаточной спиновой поляризации при знакопостоянной периодической спиновой ориентации

Приведем примеры, показывающие, что остаточная поляризация и динамика электронного спина су-

щественно зависят от способа приготовления ядерной системы и значительно отличаются от рассчитанных с помощью ядерной матрицы плотности, соответствующей бесконечной температуре ядерной подсистемы. На рис. 2 $a$  показаны полевые зависимости остаточной спиновой поляризации электрона, находящегося в контакте с 1600 ядрами, при периодической полной ( $\phi = 0$ ) оптической ориентации для различных времен  $\tau$  ядерной релаксации (кривые 2–5). Там же показан расчет для случая высокотемпературной ядерной матрицы плотности (кривая 1). Контактное взаимодействие в этих расчетах полагалось изотропным, причем  $A_{\perp} = 0.5A_{\parallel} = N/2$ . Время между ориентирующими импульсами  $T = 1000$ . По мере увеличения времени ядерной релаксации, кривые демонстрируют все большее отличие от зависимости, соответствующей бесконечной ядерной температуре — появляются связанные со знаком оптической ориентации асимметрия и провал в области малых магнитных полей. На рис. 2 $b$  показано соответствующее семейство полевых зависимостей ядерной поляризации  $\langle I_z \rangle/N$ .

Если говорить о динамике электронного спина, то отклонение ядерного состояния от состояния с бесконечной температурой, возникающее при периодической оптической ориентации электронного спина, приводит к появлению квазипериодичности во временной зависимости электронного спина с периодом оптической ориентации  $T$ . Для того чтобы качественно пояснить этот эффект, сделаем два замечания.

Во-первых, заметим, что каждой величине  $\Phi_{LI}$  (33) можно сопоставить частоту  $\Omega_{LI}$  и в этом смысле говорить о частотной зависимости  $\Phi(\Omega)$ . В качестве примера на рис. 3 построены зависимости  $\Omega_{LI}$  и  $\Phi_{LI}$  от проекции момента  $L$  для случая  $I = 50$ ,  $A_{\parallel} = 0.02$ ,  $A_{\perp} = 0.01$ ,  $\omega = 2$  и  $T = 30$ . Там же показана соответствующая зависимость  $\Phi(\Omega)$ . Из рис. 3 (а также из формулы (33)) видно, что при достаточно большом интервале времени  $T$  между ориентирующими импульсами, эта зависимость имеет значительную периодическую составляющую с периодом  $2\pi/T$ .

Во-вторых, каждому матричному элементу ядерной матрицы плотности  $U_{LI}$  также можно сопоставить частоту  $\Omega_{LI}$  и говорить о «частотной» зависимости  $U(\Omega)$  в том же смысле, в котором это было сделано выше для величин  $\Phi_{LI}$  (33). Из формулы (27) видно, что вклад  $\Delta_{LI}$  во временную динамику электронного спина представляет собой колебания с частотой  $\Omega_{LI}$ , амплитуда которых пропорциональна  $U_{LI}$ . По этой причине «частотная» зависимость элементов ядерной матрицы плотности соответству-

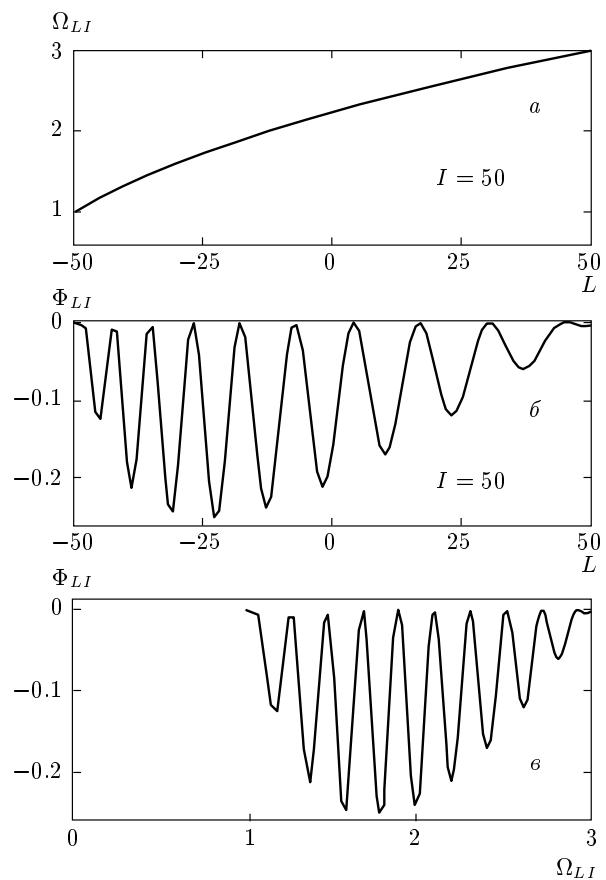
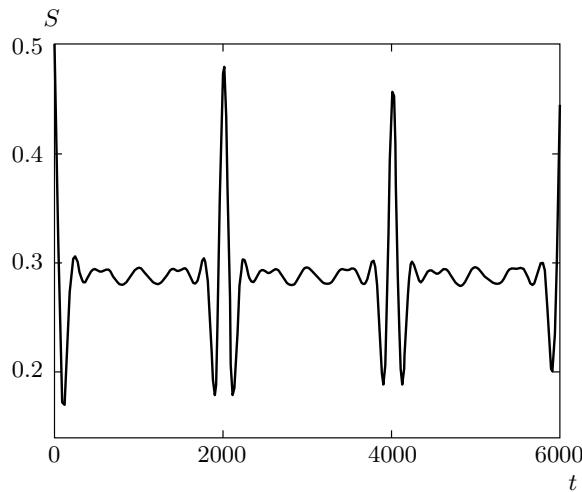


Рис. 3. Пояснения см. в тексте

ет преобразованию Фурье временной динамики электронного спина.

Поскольку величины  $\Phi_{LI}$  входят в уравнения (37)–(39) для стационарной ядерной матрицы плотности, их периодическая зависимость от частоты приводит к появлению такой зависимости у стационарной ядерной матрицы плотности. Точное вычисление ядерной матрицы плотности по формулам (37)–(39) полностью подтверждает это замечание.

Таким образом, мы приходим к выводу, что у стационарной ядерной матрицы плотности возникает частотная (в указанном выше смысле) зависимость, причем эта зависимость имеет значительную периодическую составляющую с периодом  $2\pi/T$ . В соответствии со сделанным выше замечанием, это приводит к тому, что спектр частот движения электронного спина также имеет такую составляющую, а это должно приводить к периодичности во временной динамике  $\langle S(t) \rangle$  с периодом, равным периоду следования импульсов оптической ориентации. В силу приближенного характера приведенных выше рассуждений, в реальной кинетике электронного спина



**Рис. 4.** Динамика электронного спина, взаимодействующего с 1600 ядрами, после продолжительной периодической ориентации электронного спина при наличии ядерной релаксации ( $T = 2000$ ,  $\tau = 1 \cdot 10^6$ ,  $\omega = 0.01$ ,  $A = N/2$ ). Появление повторений с периодом, равным периоду следования ориентирующих оптических импульсов, связано с появлением регулярности в ядерной матрице плотности

следует ожидать квазипериодичности, т. е. затухающих эквидистантных во времени повторений. Сказанное выше иллюстрирует рис. 4, на котором показана динамика электронного спина взаимодействующего с 1600 ядрами после продолжительной периодической ориентации электронного спина при наличии ядерной релаксации. Разумеется, такое поведение соответствует случаю когда после длительного приготовления ядерной системы оптические ориентирующие импульсы выключаются и имеется возможность неограниченно долгого наблюдения спиновой динамики. Если ориентирующие импульсы продолжаются, то описанное поведение соответствует тому, что спиновая поляризация упреждает ориентирующий импульс, что иногда действительно наблюдается в реальных системах.

#### 4.4. Случай периодической знакопеременной ориентации спина

Формулы (34)–(36) представляют собой линейное преобразование вектора-столбца  $\mathbf{U}_I$  ядерной матрицы плотности от  $n$ -го к  $n+1$ -му импульсу накачки. В общем случае поляризация ориентирующего импульса может меняться от импульса к импульсу, т. е. угол  $\phi = \phi_n$ . Тогда указанное линейное пре-

образование можно записать в символическом виде:

$$\mathbf{U}_I^{n+1} = \mathbf{T}_I(\phi_n)\mathbf{U}_I^n, \quad (44)$$

причем вид преобразования  $\mathbf{T}_I$  определяется формулами (34)–(36). Если ядерная релаксация слаба, то в рассмотренном выше случае полной периодической знакопостоянной ориентации следует ожидать сильной поляризации ядер (внутри блоков с заданным полным моментом) и ослабления сигналов динамики электронного спина, при этом электронный спин будет сохраняться. По этой причине в экспериментах иногда применяют знакопеременную по поляризации оптическую ориентацию электронного спина. В простейшем случае это соответствует тому, что для четного импульса  $\phi = 0$ , а для нечетного  $\phi = \pi/2$ . При этом ядерная матрица плотности всегда будет меняться от импульса к импульсу, однако по прошествии длительного времени матрица, возникающая после каждого четного (или после каждого нечетного) импульса, перестанет меняться. Очевидно, что такая матрица удовлетворяет условию

$$\mathbf{U}_I = \mathbf{T}_I(0)\mathbf{T}_I(\pi/2)\mathbf{U}_I \quad (45)$$

и может быть рассчитана так же, как это было сделано выше для случая знакопостоянной ориентации. В отсутствие ядерной релаксации формулы для вычисления стационарной в смысле (45) ядерной матрицы плотности имеют вид (для упрощения записи мы не пишем индекс полного момента)

$$U_{-I} = U_{-I} \frac{1 + \Phi_{1-I}}{1 + \Phi_{2-I}}, \quad (46)$$

$$\begin{aligned} U_{L+1} = & \{ U_L [(1 + \Phi_L)(1 + \Phi_{L+1}) + \Phi_{L+1}^2 - 1] - \\ & - U_{L-1}(1 + \Phi_L)\Phi_L \} \times \\ & \times [(1 + \Phi_{L+2})\Phi_{L+1}]^{-1}, \quad L = 1 - I, \dots, I - 2, \end{aligned} \quad (47)$$

$$U_I = U_{I-1}(1 + \Phi_I). \quad (48)$$

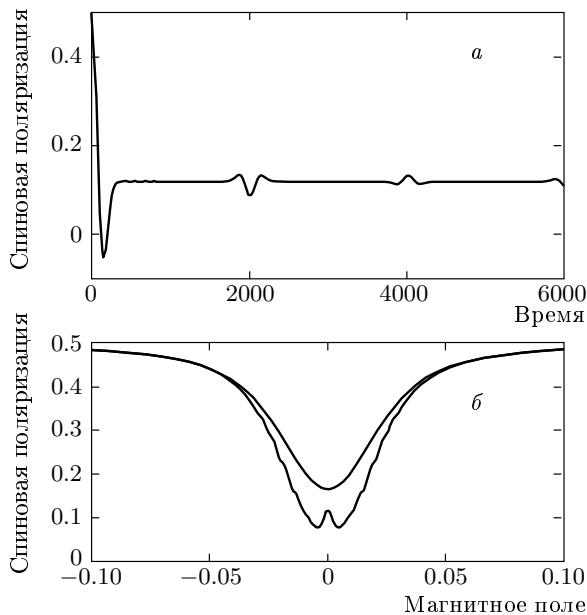
Для конкретных вычислений можно применять следующую рекуррентную процедуру.

1. Полагаем  $U_{-I} = 1$ .

2. Используя формулы (46), (47) и (48), последовательно находим  $U_L$ ,  $L = 1 - I, \dots, I$ .

3. Полученную ненормированную матрицу плотности нормируем при помощи условия (40).

Для такого режима ориентации спиновая динамика также демонстрирует повторения (рис. 5a), а полевая зависимость остаточной поляризации электронного спина симметризуется, но может обнаруживать провал в области малых полей (рис. 5б). Кривая на рис. 5б без провала соответствует бесконечной температуре ядерной подсистемы.



**Рис.5.** Спиновая динамика (а) и полевая зависимость остаточной спиновой поляризации (б) для электрона, находящегося в контакте с 1600 ядрами, в случае знакопеременной оптической накачки и при отсутствии ядерной релаксации. Время между ориентирующими импульсами  $T = 2000$  (а), 2500 (б);  $A = N/2$

## 5. ЭЛЕКТРОННО-ЯДЕРНОЕ СПИНОВОЕ ЭХО

Как видно из изложенного выше, рассматриваемая система, состоящая из электронного спина, взаимодействующего с  $2N$  ядерными спинами, с формальной точки зрения эквивалентна совокупности двухуровневых систем. Каждому двумерному  $LI$ -блоку гамильтониана можно поставить в соответствие двухуровневую систему с расщеплением  $\Omega_{LI}$ . Вклад каждого  $LI$ -блока (25) в проекцию электронного спина аддитивен и определяется формулой (27). С другой стороны, этот вклад связан с  $z$ -компонентой вектора Блоха  $\theta_z^{LI}(t)$  (19). По этим причинам рассматриваемой системе должны быть свойственны все эффекты, присущие ансамблю двухуровневых систем при наличии неоднородного уширения. Например, эффект возникновения повторений в спиновой динамике (см. рис. 4), о котором шла речь выше, имеет много общего с эффектами, описанными в работах [15–17]. Рассмотрим теперь эффект спинового эха [14]. Приведем стандартное описание этого эффекта, ориентированное на возможный эксперимент с квантовой точкой.

Пусть при  $t = 0$  электронный спин оптически поляризован в  $z$ -направлении в нулевом магнитном поле. Рассмотрим движение вектора Блоха, соответствующего какому-либо  $LI$ -блоку. Допустим для простоты, что  $A_{\parallel} = 0$ . Тогда движение вектора Блоха  $\theta^{LI}$  блока  $LI$  (11) представляет собой вращение вокруг оси  $x$  с частотой  $\Omega_{LI}$ . Движение векторов Блоха, относящихся к разным  $LI$ -блокам, происходит с разными частотами, поэтому изначально ориентированные по оси  $z$  векторы  $\theta^{LI}$  через достаточно большой интервал времени более или менее равномерно распределяются в плоскости, перпендикулярной оси  $x$ <sup>1)</sup>. После того как это произойдет, подействуем на систему  $\pi$ -импульсом магнитного поля, направленного по оси  $z$ . У такого импульса величина  $\omega$  и длительность  $\Delta T$  удовлетворяют условию  $\omega\Delta T = \pi$ . Обозначим через  $T_1$  время начала  $\pi$ -импульса. Для простоты предположим, что поле настолько большое, что

$$\omega \gg 2A_{\perp}\sqrt{I(I+1)-L(L-1)}$$

и во время действия импульса динамика векторов Блоха всех  $LI$ -блоков определяется главным образом магнитным полем и поэтому представляет собой вращение вокруг оси  $z$ . Таким образом, за интервал  $\Delta T$  все векторы Блоха развернутся на  $\pi$  вокруг оси  $z$  и вектор, имеющий самую большую частоту  $\Omega_{LI}$  и на момент начала  $\pi$ -импульса оказавшийся «впереди» остальных, после  $\pi$ -импульса окажется «позади» всех остальных. Вектор же, имеющий минимальную частоту  $\Omega_{LI}$  и потому до включения поля «отставший» от остальных, после  $\pi$ -импульса поля окажется, наоборот, «впереди» остальных. После окончания  $\pi$ -импульса оказавшийся позади «быстрый» вектор начнет догонять оказавшийся впереди «медленный», и через время  $T_1$  после импульса они встретятся, причем в момент встречи оба будут ориентированы по оси  $z$ , как и при  $t = 0$ . Векторы Блоха, относящиеся к остальным блокам, «зажаты» между самым быстрым и самым медленным векторами и поэтому тоже сойдутся через время  $T_1$  после окончания импульса поля. Таким образом, при  $t = 2T_1 + \Delta T$  проекция электронного спина будет такой же, как и при  $t = 0$ . Это и есть сигнал эха. Принятые упрощения не изменяют картину качественно. Ясно также, что вместо  $\pi$ -импульса может быть

<sup>1)</sup> В рассматриваемом упрощенном случае ( $A_{\parallel} = 0$ ) это соответствует уменьшению  $z$ -проекции спина до нуля. При  $A_{\parallel} \neq 0$  это будет не так и динамика векторов Блоха  $\theta^{LI}$  будет несколько сложнее, однако для качественного объяснения эффекта эха это не важно.

использован импульс, соответствующий нечетному числу полуоборотов электронного спина.

С формальной точки зрения, сигнал эха рассчитывается по формулам (25) и (27), причем необходимые векторы Блоха блоков  $LI$  рассчитываются следующим образом:

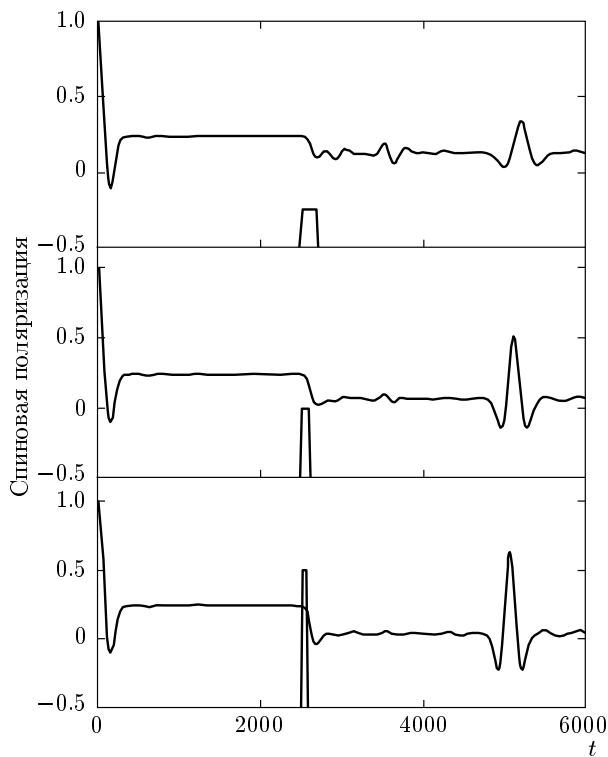
$$\theta^{LI}(t) = \begin{cases} \mathbf{M}^{LI}(0, t)\theta^{LI}(0), & t < T_1, \\ \mathbf{M}^{LI}(\omega, t - T_1)\mathbf{M}^{LI}(0, T_1)\theta^{LI}(0), & T_1 + \Delta T > t > T_1, \\ \mathbf{M}^{LI}(0, t - T_1 - \Delta T)\mathbf{M}^{LI}(\omega, \Delta T) \times \\ \times \mathbf{M}^{LI}(0, T_1)\theta^{LI}(0), & t > T_1 + \Delta T. \end{cases} \quad (49)$$

Здесь начальный вектор Блоха  $LI$ -блока  $\theta^{LI}(0)$  определяется формулой (24) и зависит от ядерной матрицы плотности, сформированной к моменту наблюдения эха. Первый аргумент матриц показывает их зависимость от магнитного поля, второй — от времени. На рис. 6 приведены рассчитанные временные зависимости проекции спина при подаче  $\pi$ -импульса для разных значений его амплитуды. Видно, что качество сигнала эха улучшается при увеличении амплитуды поля, поскольку динамика системы приближается к изложенной выше.

Из приведенного рассмотрения видно, что в данном случае наблюдение эха не требует наличия какого-либо неоднородного уширения и оно может наблюдаться на одной квантовой точке. Отличие от стандартной методики наблюдения эха состоит в том, что вместо импульса  $\pi/2$  используется оптический импульс, а также в том, что описанное выше движение векторов Блоха происходит не во вращающейся, а в покоящейся системе координат и  $\pi$ -импульс имеет нулевую несущую частоту.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье приводится точное решение модельной задачи об электронном спине  $1/2$ , контактно взаимодействующим с большим числом ядерных спинов. В настоящее время рассматриваемая модель применяется для описания спиновой динамики в квантовых точках, поэтому в работе рассматриваются типичные для экспериментов с квантовыми точками



**Рис. 6.** Эхо в динамике электронного спина, взаимодействующего с 1600 ядерных спинов, при различных амплитудах  $\pi$ -импульса. Ступенчатые графики показывают временную зависимость магнитного поля

режимы спиновой ориентации, приводятся примеры расчета спиновой динамики и остаточной спиновой поляризации. Показана существенная зависимость наблюдаемых в экспериментах величин от ядерного состояния, для которого указаны методы расчета, пригодные для интерпретации широкого класса экспериментов. Все расчеты проведены для случая ядерного спина  $1/2$ , что не является существенным ограничением. Все приводимые формулы остаются в силе в случае произвольного ядерного спина, за исключением выражения (10) для статистического веса полного момента.

Рассмотренная в статье задача была предложена автору И. Я. Герловым, И. В. Игнатьевым и Р. В. Чербунином, которым автор выражает благодарность за многочисленные обсуждения. Работа выполнена при поддержке Международного научно-технического центра (грант № 2679).

## ПРИЛОЖЕНИЕ

Вычислим число способов  $\Gamma_N(n)$ , которым можно получить момент  $n$  сложением  $2N$  моментов  $1/2$ . По правилу сложения моментов для заданного  $N$  (числа пар моментов  $1/2$ ) аргумент функции  $\Gamma_N(n)$  может принимать значения  $n = 0, 1, 2, \dots, N$ . Доподелим функцию  $\Gamma_N(n)$  при  $n > N$ , полагая  $\Gamma_N(n) = 0$  при  $n > N$ , и допустим, что при некотором  $N$  функция  $\Gamma_N(n)$  нам известна. Добавим еще одну пару моментов. Тогда прямой расчет по правилам сложения моментов дает следующие рекуррентные соотношения:

$$\Gamma_{N+1}(n) = \Gamma_N(n-1) + 2\Gamma_N(n) + \Gamma_N(n+1), \quad (50)$$

$$n = 1, \dots, N+1,$$

$$\Gamma_{N+1}(0) = \Gamma_N(0) + \Gamma_N(1), \quad (51)$$

которые при начальных условиях

$$\Gamma_1(0) = \Gamma_1(1) = 1, \quad \Gamma_1(n > 1) = 0 \quad (52)$$

полностью определяют исковую функцию  $\Gamma_N(n)$ .

Будем искать частное решение уравнения (50) в виде

$$g_N(n) = G_N e^{i\phi n}. \quad (53)$$

Подстановка в (50) позволяет определить вид функции  $G_N$ . Окончательно получаем

$$g_N(n) = (e^{-i\phi} + e^{i\phi} + 2)^N e^{i\phi n}. \quad (54)$$

Эта функция удовлетворяет соотношению (50) при любом  $\phi$ . В силу линейности уравнения (50) произвольная линейная комбинация решений также является решением. Поэтому исковую функцию  $\Gamma_N(n)$  можно представить в виде

$$\Gamma_N(n) = \int_{-\pi}^{\pi} (e^{-i\phi} + e^{i\phi} + 2)^N e^{i\phi n} F(\phi) d\phi. \quad (55)$$

Условия (52) приводят к следующим соотношениям:

$$\int_{-\pi}^{\pi} (e^{-i\phi} + e^{i\phi} + 2) F(\phi) d\phi = 1, \quad (56)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} (e^{-i\phi} + e^{i\phi} + 2) e^{i\phi n} F(\phi) d\phi = 1, \quad (56)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} (e^{-i\phi} + e^{i\phi} + 2) e^{i\phi n} F(\phi) d\phi = 0, \quad n > 1.$$

Представляя  $F(\phi)$  в виде

$$F(\phi) = \sum_{k=0}^{\infty} F_k e^{ik\phi} \quad (57)$$

и используя соотношения (51) и (56) для определения коэффициентов этого ряда, получаем

$$F_0 = -F_1 = \frac{1}{2\pi}, \quad F_{k>1} = 0. \quad (58)$$

Таким образом,

$$\Gamma_N(n) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (e^{-i\phi} + e^{i\phi} + 2)^N e^{i\phi n} (1 - e^{i\phi}) d\phi. \quad (59)$$

Прямое вычисление интегралов приводит к формуле (10).

## ЛИТЕРАТУРА

1. J. Schliemann, A. Khaetskii, and D. Loss, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, R1809 (2003).
2. I. A. Merkulov, Al. L. Efros, and M. Rosen, *Phys. Rev. B* **65**, 205309 (2002).
3. Y. G. Semenov and K. W. Kim, *Phys. Rev. B* **67**, 073301 (2003).
4. W. A. Coish and D. Loss, *Phys. Rev. B* **70**, 195340 (2004).
5. Changhue Deng and Xuedong Hu, *Phys. Rev. B* **72**, 165333 (2005).
6. Changhue Deng and Xuedong Hu, *Phys. Rev. B* **73**, 241303 (2006).
7. S. I. Erlingsson and Yu. V. Nazarov, *Phys. Rev. B* **70**, 205327 (2004).
8. A. Khaetskii, D. Loss, and L. Glazman, *Phys. Rev. B* **67**, 195329 (2003).
9. A. Khaetskii, D. Loss, and L. Glazman, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 186802 (2002).
10. D. Stepanenko, G. Burkard, G. Giedke, and A. Imamoglu, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 136401 (2006).
11. W. Zhang, V. V. Dobrovitski, K. A. Al-Hassanieh, E. Dagotto, and B. N. Harmon, *Phys. Rev. B* **74**, 205313 (2006).
12. С. М. Рябченко, Ю. Г. Семенов, *ЖЭТФ* **57**, 1301 (1983).
13. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1974).
14. А. Абрагам, *Ядерный магнетизм*, Изд-во иностр. лит., Москва (1963).
15. W. H. Hessellink and D. A. Wiersma, *Chem. Phys. Lett.* **50**, 51 (1977).
16. J. B. Morsink, T. J. Aartsma, and D. A. Wiersma, *Chem. Phys. Lett.* **49**, 34 (1977).
17. Y. C. Chen, K. P. Chiang, and S. R. Hartmann, *Opt. Comm.* **29**, 181 (1979).