

Arbeit zur Erlangung des akademischen Grades  
Master of Science

**Getriebene Spindynamik in  
Quantenpunkten mit mehreren  
Isotopen**

Philipp Scherer  
geboren in Simmern/Hunsrück

2019

Lehrstuhl für Theoretische Physik I  
Fakultät Physik  
Technische Universität Dortmund

Erstgutachter: Prof. Dr. Götz S. Uhrig  
Zweitgutachter: PD Dr. Ute Löw  
Abgabedatum: 4. Dezember 2019

## Kurzfassung

Das Anwenden periodischer Laserpulse auf einfach geladene Quantenpunkte unterdrückt die Dephasierung der Elektronenspinkomponente senkrecht zu einem extern angelegten Magnetfeld. Der Hauptgrund hierfür ist, dass nach hinreichend langem Pulsen die Systemdynamik der Laserdynamik folgt. In dieser Arbeit wird das klassische Zentralspinmodell zur Beschreibung der Systemdynamik verwendet, welches sich dadurch auszeichnet, dass der Elektronenspin an die Kernspins in seiner Umgebung koppelt. Weiterhin wird ein Pulsmodell eingeführt, welches den quantenmechanischen Charakter des Systems simuliert. Numerisch herausfordernd ist es, die Langzeitdynamik des Systems zu berechnen, weshalb die Kopplungskonstantenverteilung pro Isotop als homogen angenommen wird.

Es stellt sich heraus, dass die Badgröße, die Dephasierungszeit und das externe Magnetfeld einen Einfluss auf den Wert der nicht unterdrückten Spinkomponente sowie die Systemdynamik haben. Skalierungsgesetze für diese Größen werden verifiziert beziehungsweise hergeleitet, sodass die Pulszahl abgeschätzt werden kann, bis die Dephasierung maximal unterdrückt ist. Bei bestimmten Werten für das externe Magnetfeld wird außerdem die Dephasierung kaum unterdrückt. Dies kann auf den nuklearen Zeemann-Effekt sowie das Pulsmodell zurückgeführt werden. Festgestellt wird auch, dass der nicht dephasierte Anteil bei der Hinzunahme mehrerer, verschiedener Isotope geringer ausfällt. Außerdem wird gezeigt, dass eine Extrapolation von realistischen Badgrößen bemerkenswert genau möglich ist. Eine weitere Zeitskala kann bei der Betrachtung der Overhauserfeldverteilung beobachtet werden, mit der eine Verschiebung des Verteilungsmittelwerts in Magnetfeldrichtung einhergeht. Auch hier ist der nukleare Zeemann-Effekt für verantwortlich.

## Abstract

The application of periodic laser pulses on singly charged quantum dots leads to a suppressed dephasing of the electron spin component perpendicular to an external magnetic field. The main reason for this phenomenon is that the dynamics of the system follows the dynamics of the laser after several pulses. In this thesis the classical Central Spin Model is applied to describe the dynamics in the quantum dot. It expresses the coupling between the electron spin with the surrounding bath spins. Moreover, a pulse model which mimics the quantum mechanical behaviour is introduced. It is numerically challenging to simulate the long time dynamics so that the coupling distribution is assumed homogeneously for each isotope.

It can be noted that the bath size, the dephasing time and the external magnetic field influence both, the value of the non-suppressed spin component and the dynamics

---

of the system. Scaling laws for these sizes get verified or established so that the pulse number can be estimated to reach a maximum level of suppression. However, at certain values for the external magnetic field the dephasing is barely suppressed due to the nuclear Zeemann effect and the pulse model. Another observation is that the non-dephased spin component gets lower by taking more isotopes into account. Furthermore it is shown that an extrapolation for realistic bath sizes is remarkably precise. By analysing the Overhauser field distribution another time scale is detected. Here, the mean value of the distribution gets slightly shifted in the direction of the external magnetic field as a consequence of the nuclear Zeemann effect.

# Inhaltsverzeichnis

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung</b>                                     | <b>1</b>  |
| <b>2</b> | <b>Zusammensetzung von Quantenpunkten</b>             | <b>5</b>  |
| <b>3</b> | <b>Modellierung von Quantenpunkten</b>                | <b>7</b>  |
| 3.1      | Hamiltonfunktion . . . . .                            | 7         |
| 3.1.1    | Dynamik und Overhauser-Feld . . . . .                 | 8         |
| 3.1.2    | Dephasierung und Dephasierungszeit . . . . .          | 10        |
| 3.2      | Kopplungskonstanten . . . . .                         | 12        |
| 3.2.1    | Box-Modell . . . . .                                  | 13        |
| 3.2.2    | Erweiterung auf Bäder verschiedener Isotope . . . . . | 13        |
| 3.2.3    | Weitere Parametrisierungsmöglichkeiten . . . . .      | 15        |
| 3.3      | Nicht berücksichtigte Effekte . . . . .               | 16        |
| 3.3.1    | Dipol-Dipol-Wechselwirkung . . . . .                  | 16        |
| 3.3.2    | Quadrupolare Wechselwirkung . . . . .                 | 17        |
| 3.3.3    | Quantenpunktensembles . . . . .                       | 18        |
| <b>4</b> | <b>Theoretische Grundlagen - Pulsmodell</b>           | <b>19</b> |
| 4.1      | Modellbildung . . . . .                               | 19        |
| 4.1.1    | Einzelner Puls . . . . .                              | 19        |
| 4.1.2    | Wiederholung von Pulsen . . . . .                     | 20        |
| 4.2      | Erweiterungsmöglichkeiten . . . . .                   | 23        |
| 4.2.1    | Trion-Zerfall . . . . .                               | 23        |
| 4.2.2    | Pulslänge . . . . .                                   | 24        |
| <b>5</b> | <b>Numerische Grundlagen und Fehlerabschätzung</b>    | <b>25</b> |
| 5.1      | Verwendeter Algorithmus . . . . .                     | 25        |
| 5.2      | Grundlage zur Fehlerabschätzung . . . . .             | 26        |
| 5.3      | Rotationsansatz . . . . .                             | 28        |
| 5.4      | Skalierungsverhalten . . . . .                        | 30        |
| <b>6</b> | <b>Analyse der Pre-Puls-Amplituden</b>                | <b>35</b> |
| 6.1      | Bestimmung der Sättigungswerte und Fehler . . . . .   | 35        |
| 6.1.1    | Definition . . . . .                                  | 35        |

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| 6.1.2    | Einfluss physikalischer Parameter . . . . .    | 37        |
| 6.2      | System mit einem Isotop . . . . .              | 41        |
| 6.2.1    | Untersuchung der Pre-Puls-Amplituden . . . . . | 41        |
| 6.2.2    | Resonanzen . . . . .                           | 42        |
| 6.3      | System mit mehreren Isotopen . . . . .         | 43        |
| 6.4      | Skalierung für große Bäder . . . . .           | 49        |
| <b>7</b> | <b>Analyse der Overhauserfelder</b>            | <b>55</b> |
| 7.1      | Verschiebung des Verteilungsmaximums . . . . . | 55        |
| 7.2      | Berücksichtigung mehrerer Isotope . . . . .    | 59        |
| <b>8</b> | <b>Diskussion und Fazit</b>                    | <b>63</b> |
| 8.1      | Vergleich von Theorie und Experiment . . . . . | 63        |
| 8.2      | Zusammenfassung . . . . .                      | 65        |
| 8.3      | Ausblick . . . . .                             | 67        |
| <b>A</b> | <b>Anhang</b>                                  | <b>69</b> |
| A.1      | Zeitentwicklung im Box-Modell . . . . .        | 69        |
| A.2      | Rechnungen zum Rotationsansatz . . . . .       | 69        |
| A.3      | Quantitative Analyse der Skalierung . . . . .  | 70        |
|          | <b>Literatur</b>                               | <b>73</b> |

# 1 Einleitung

In der klassischen Informatik werden als Informationsträger Bits verwendet, die per Definition binäre Wertigkeit aufweisen, also die Werte  $n \in \{0, 1\}$  annehmen können. Aus physikalischer Perspektive stellt somit zunächst jedes Zwei-Niveau-System eine mögliche Realisierung eines Bits dar.

Dieses grundlegende System kann auch quantenmechanisch betrachtet werden, so dass gewisse physikalische Effekte, wie Überlagerung und Verschränkung, ausgenutzt werden können. Bits, die diese Eigenschaften erfüllen, werden auch als Qubits (Quantenbits) bezeichnet. Das Verwenden von Qubits führt dazu, dass eine Vielzahl an Problemstellungen deutlich effizienter gelöst werden können, da eine größere Anzahl an Algorithmen zur Auswahl steht als bei der rein klassischen Realisierung von Bits. Beispiele stellen der Shor-Algorithmus [1, 2] sowie der Grover-Algorithmus dar [3]. Mittels supraleitender, programmierbarer Quantenbits ist es gelungen, Quantenzustände zu erzeugen, deren Rechenzeit etwa  $t \approx 200$  s beträgt. Bei der Verwendung eines klassischen Supercomputers hätte es zur Erzeugung eines äquivalenten Zustandes circa  $t \approx 10^4$  a bedurft. Dies stellt eine erste Stufe zur Realisierung des Quantum Supremacys<sup>1</sup> dar. Allerdings ist diese Technik noch nicht ausgereift genug, um flächendeckend technologisch angewendet werden zu können [4].

Damit ein quantenmechanisches System als Qubit in einem Quantencomputer eingesetzt werden kann, müssen die Kriterien nach DiVincenzo erfüllt sein [5]. Für ein Qubit muss dann gelten:

1. Es existiert ein skalierbares System aus wohldefinierten Quantenbits. Das heißt, das System ist beliebig erweiterbar.
2. Alle Quantenbits können in einen zuvor definierten Anfangszustand gebracht werden.
3. Das System weist eine geringe Dekohärenz auf; die Dekohärenzzeit ist also wesentlich größer als die Zeit, die benötigt wird, um einzelne Operationen durchzuführen.

---

<sup>1</sup>Quantum Supremacy beschreibt den Punkt, an dem es gelingt, dass Quantencomputer Laufzeitvorteile gegenüber klassischen Computern aufweisen.

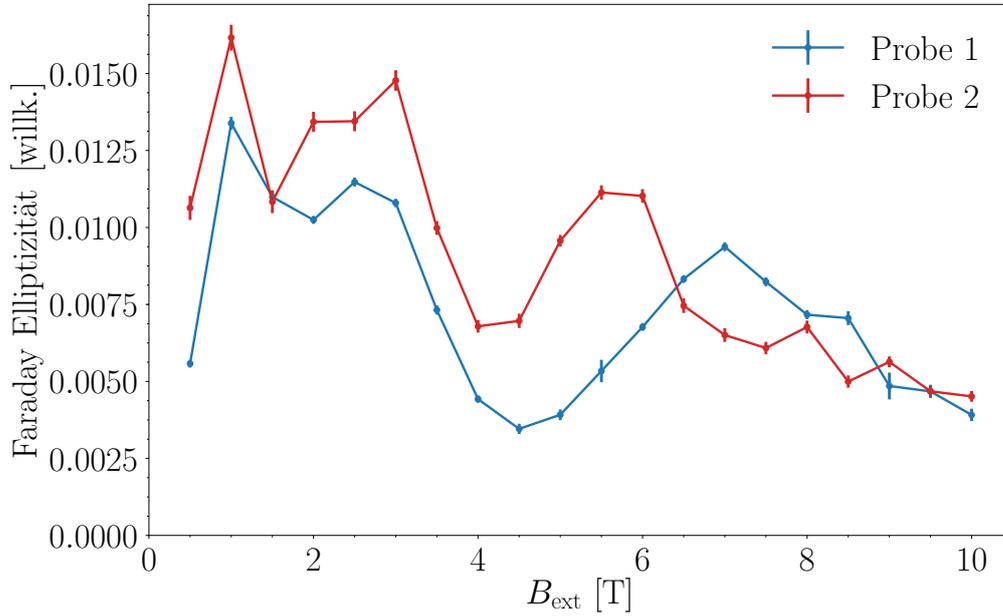
4. Eine zuvor festgelegte, universelle Anzahl an Operationen, auch Quantengatter genannt, kann durchgeführt werden. Das heißt, jede beliebige Operation kann auf diese Quantengatter zurückgeführt werden.
5. Es ist möglich, eine Messung am System so durchzuführen, dass jeder einzelne Qubit ausgelesen werden kann.

Es existieren mehrere Ansätze, Qubits zu realisieren, allerdings werden bei diesen nicht alle oben genannten Kriterien erfüllt. In Ionenfallen [6, 7] und quantenoptischen Kavitäten [8] wurden Operationen in Form von Zwei-Qubit-Gattern nachgewiesen; die Qubits konnten also in Wechselwirkung zueinander gebracht werden. Entsprechend scheint eine Realisierung diverser (Qubit-)Algorithmen möglich zu sein. In der aktuellen Forschung finden Quantenpunkte, die auf Supraleitern basieren, häufig Anwendung, wie auch schon in Artikel [4] erwähnt wird.

Eine weitere Möglichkeit zur technischen Realisierung von Qubits stellen einfach geladene Quantenpunkte dar. Hier wird ein Elektron durch das Zusammenwachsen von Materialien unterschiedlicher Bandenergien in einem Potentialtopf lokalisiert. Häufig verwendet werden  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  Quantenpunkte auf einem Substrat aus GaAs. Der Spin des Elektrons kann als physikalisches Zwei-Niveau-System aufgefasst werden, da er lediglich die Zustände  $|\uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\rangle$  annehmen kann. Weiterhin können die quantenmechanischen Eigenschaften ausgenutzt werden [9].

Die Hyperfeinwechselwirkung zwischen dem Elektronenspin und den im Quantenpunkt vorhandenen Kernspins ist die dominante Kopplung, die die Dynamik des Systems beeinflusst und dazu führt, dass der Elektronenspin eine Präzessionsbewegung ausführt [10]. Das Anlegen eines externen Magnetfeldes  $B \simeq 1\text{--}10\text{ T}$  orthogonal zur ausgezeichneten Spinkomponente führt dazu, dass der Elektronenspin um dieses präzediert, da die Hyperfeinwechselwirkung als klein betrachtet werden kann [11]. Dieser dephasiert jedoch mit zunehmender Zeit aufgrund von Dekohärenzphänomenen, sodass die Anfangspolarisation nach kurzer Zeit nicht mehr zurückverfolgt werden kann [11–13]. Das Ausführen von möglichst vielen Gatteroperationen nach DiVincenzo 3 wird somit erschwert.

Dementsprechend ist es notwendig, den Zerfall des Anfangszustands zu verstehen, um Methoden zu entwickeln, die die Dekohärenz abschwächen, damit dieses Kriterium als erfüllt betrachtet werden kann. In der aktuellen Forschung liegt hier unter anderem der Fokus auf dem optischen Anregen des Elektronenspins durch zirkular polarisiertes Licht. Experimentell wurde nachgewiesen, dass durch das periodische Anregen des Quantenpunkts mit der Repititionsrate  $T_R$  ein Teil der Spinpolarisation periodisch wiederkehrt und nicht zerfällt. Die Dynamik ist auch noch einige Minuten nach dem Ausschalten der Laserpulse zu beobachten [14–16]. Weiterhin zeigt sich, dass der Anteil der Spinkomponente, der wiederkehrt, stark vom externen Magnetfeld  $B_{\text{ext}}$  abhängig ist. Dieser Anteil wird im Folgenden als Sättigungswert der Pre-Puls-Amplitude bezeichnet. In Artikel [17] werden dazu für zwei verschiedene



**Abbildung 1.1:** Gemessene Sättigungswerte der Pre-Puls-Amplituden zweier Proben aus  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  in Abhängigkeit eines extern angelegten Magnetfeldes  $B_{\text{ext}}$ .

Proben von  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  Quantenpunkten auf einem Substrat aus GaAs die Pre-Puls-Amplituden in Abhängigkeit vom externen Magnetfeldes gemessen, die auch in Abbildung 1.1 gezeigt werden. Dabei wird mittels eines Pump-Probe-Experiments bei einer Temperatur von  $T = 4,7\text{ K}$  die Faraday-Elliptizität in Abhängigkeit von der Pump-Probe-Verzögerung gemessen und aus diesen Werten die Pre-Puls-Amplitude und ihr Sättigungswert extrahiert<sup>2</sup>. Bei Betrachtung der Kurven wird der Einfluss der Zusammensetzung des Quantenpunkts sichtbar: Obwohl beide Proben aus den gleichen Isotopen bestehen, die lediglich in unterschiedlicher Zusammensetzung im Quantenpunkt vertreten sind, so unterscheidet sich der Verlauf der Kurven deutlich voneinander. Entsprechend scheint eine Analyse der Quantenpunkte auf ihre genaue Zusammensetzung sinnvoll zu sein.

Diese Arbeit weist folgende Struktur auf: In Kapitel 2 wird eine Methodik vorgestellt, mit der die genaue Zusammensetzung des Quantenpunkts bestimmt werden kann. Kapitel 3 behandelt die theoretische Modellierung von Quantenpunkten, während Kapitel 4 die theoretische Umsetzung von Laserpulsen und die damit einhergehenden

<sup>2</sup>Anzumerken ist, dass die Werte der Pre-Puls-Amplituden quantitativ nicht miteinander vergleichbar sind, da nur korrelierte Größen der Pre-Puls-Amplitude gemessen werden und entsprechend keine Einheitenbetrachtung durchgeführt wird.

Konsequenzen diskutiert. Eine Einführung in die Numerik und die Fehlerabschätzung wird in Kapitel 5 gegeben. Anschließend wird in Kapitel 6 der Einfluss der in Kapitel 3 eingeführten physikalischen Parameter auf die Pre-Puls-Amplitude untersucht. Weiterhin werden Daten erzeugt, die mit zuvor veröffentlichten Ergebnissen verglichen werden und eine Überprüfung der Modellbildung darstellen. Die Sättigungswerte der Pre-Puls-Amplituden werden anschließend für unterschiedliche Quantenpunktzusammensetzungen theoretisch bestimmt und ein Skalierungsgesetz für die Badgröße hergeleitet. In Kapitel 7 wird schließlich der Einfluss der Laserpulse auf das Spinbad analysiert.

## 2 Zusammensetzung von Quantenpunkten

Die Zusammensetzung von Quantenpunkten ist im Hinblick auf die verschiedenen Kurven in Abbildung 1.1 von besonderem Interesse, da diese einen wesentlichen Einfluss auf die physikalischen Prozesse im Quantenpunktsystem hat. Dazu wird in Artikel [18] eine numerische Methode für  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -Quantenpunkte auf GaAs vorgestellt, die den Prozess des thermischen Erhitzens genauer beschreiben soll. Es wird untersucht, welchen Einfluss die Heiztemperatur  $T_a$  und Heizzeit  $t_a$  auf die räumliche Ausdehnung  $L$  des Quantenpunkts und die Konzentration von Indium in diesem haben. Die Konzentration ist dabei über den Parameter  $x = x(\vec{r}, t)$  bestimmt. Letztere Größe kann numerisch über das Diffusionsgesetz nach Fick

$$\frac{\partial x(\vec{r}, t)}{\partial t} = D(T_a) \Delta x(\vec{r}, t) \quad (2.1)$$

bestimmt werden, wobei  $D(T_a)$  die Diffusionskonstante beschreibt, die eine Abhängigkeit von der Heiztemperatur aufweist. Da bei der Diffusion eines Festkörpermaterials in ein anderes eine Aktivierungsenergie  $E_A$  überschritten werden muss, gehen mit höheren Heiztemperaturen auch höhere Diffusionskonstanten einher. Über die Arrhenius-Gleichung kann für ein beliebiges  $T_a$  die Diffusionskonstante

$$D(T_a) = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{k_B T_a}\right) \quad (2.2)$$

berechnet werden, da  $D_0$  und  $E_A$  für exemplarische Messungen von Photolumineszenzspektren über Ausgleichsrechnungen ermittelbar sind. Aus diesen Rechnungen geht hervor, dass die maximale Indiumkonzentration  $x$  im Zentrum des Quantenpunkts für Probe 1 auf  $x \approx 0.3$  und Probe 2 auf  $x \approx 0.5$  interpoliert werden kann. Die Heiztemperaturen hier sind durch  $T_1 = 945^\circ\text{C}$  und  $T_2 = 880^\circ\text{C}$  gegeben.

Eine alternative Methode zur Bestimmung der Indiumkonzentration  $x$  in Quantenpunkten ist eine direkte Messung. Diese kann beispielsweise mittels hochauflösender Transmissionselektronenmikroskopie realisiert werden. Die gemessenen Ergebnisse von  $x = 0,30 \pm 0,05$  sind verträglich mit denen aus Messungen, in denen andere Methoden zum Einsatz kommen ( $x = 0,35 \pm 0,05$ ) [19]. Ebenfalls sind diese in Einklang mit den Interpolationsergebnissen der numerischen Rechnungen zu bringen. Für die theoretische Modellbildung sind entsprechend Werte  $x \leq 0,5$  von besonderem Interesse.



## 3 Modellierung von Quantenpunkten

### 3.1 Hamiltonfunktion

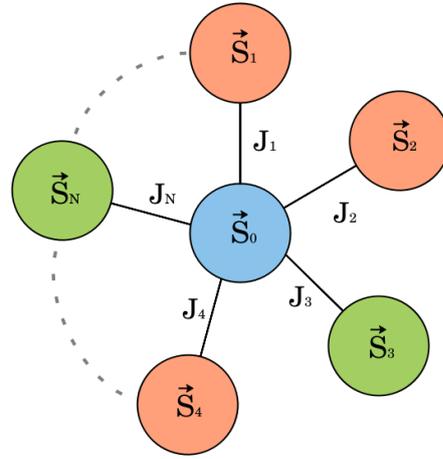
Zur theoretischen Beschreibung eines Quantenpunktes wird häufig das Zentralspinmodell (CSM) verwendet [20]. Der Hamiltonoperator dieses Modells ist durch

$$\hat{H}_J = \hat{S}_0 \cdot \sum_{k=1}^N J_k \cdot \hat{S}_k \quad (3.1)$$

gegeben, wobei  $\hat{S}_0$  den Operator des elektronischen Spins und  $\hat{S}_k$  den Operator des  $k$ -ten Badspins darstellt. Aufgrund der Hyperfeinwechselwirkung koppelt der Elektronenspin an jeden Badspin mit der jeweiligen Kopplungskonstante  $J_k$ . Graphisch ist dies in Abbildung 3.1 dargestellt. Die Spinquantenzahl des Elektronenspins ist durch  $S_0 = 1/2$  beschrieben, während hingegen die Spinquantenzahl des  $k$ -ten Badspins  $S_k$  vom jeweiligen Isotop abhängig ist. Mathematisch stellt das Zentralspinmodell einen Spezialfall des Gaudin-Modells dar. Theoretisch lässt sich dieses Modell über den Bethe-Ansatz exakt lösen, allerdings ist dies aufgrund der Rechenintensität nur für eine geringe Anzahl von  $N \approx 20 - 48$  Spins möglich, je nach Startbedingung des Systems [10, 20].

Mittels der Chebychev Polynomentwicklung (CET) lässt sich für lange Zeiten eine hinreichend genaue Lösung des Zentralspinmodells für kleine Bäder bestimmen. Die quantenmechanischen Zustände werden dabei als Linearkombination der Chebychev-Polynome ausgedrückt [21–24].

Im Gegensatz dazu können über die Dichtematrix Renormierungsgruppe (DMRG) Lösungen für Bäder mit  $N \approx 1000$  Spins bestimmt werden, indem die Dimension des betrachteten Hilbertraums reduziert wird. Hier liegt jedoch eine Limitierung in



**Abbildung 3.1:** Graphische Darstellung der Hyperfeinwechselwirkung zwischen dem Zentralspin und den Badspins.

der Simulationszeit vor [25–28].

Da sowohl bei der quantenmechanischen als auch bei der klassischen Behandlung der Spins die gleichen Erhaltungssätze gelten und typischerweise  $N \simeq 10^4 - 10^6$  Badspins effektiv an den zentralen Elektronenspin koppeln, können die Spinoperatoren durch klassische Vektoren ausgedrückt werden, was numerisch eine Simulation von großen Bädern und langen Zeiten zulässt [11, 29]. Die Dimension des zu lösenden Gleichungssystems reduziert sich dabei von  $d = 2^N$  auf  $d = 3(N + 1)$ . Entsprechend wird das physikalische Problem durch die Hamiltonfunktion

$$\begin{aligned} H &= H_J + H_{EZ} + H_{NZ} \\ &= \vec{S}_0 \cdot \sum_{k=1}^N J_k \vec{S}_k - h S_0^x - z h \cdot \sum_{k=1}^N S_k^x \end{aligned} \quad (3.2)$$

beschrieben, wobei  $H_J$  hier die klassische Schreibweise für den Operator (3.1) ist. Durch das Anlegen eines externen Magnetfeldes o.B.d.A in  $x$ -Richtung  $\vec{B}_{\text{ext}} = B_{\text{ext}} \vec{e}_x$  ergeben sich weitere Terme in der Hamiltonfunktion, wobei die Quantisierungsachse des Zentralspins durch  $S^z$  gegeben ist. Das heißt, dass  $\vec{B}_{\text{ext}}$  in Voigt-Geometrie angelegt wird und somit senkrecht zur ausgezeichneten Spinkomponente steht.

So wird durch  $H_{EZ}$  der Zeemann-Effekt beschrieben, also das Koppeln des elektronischen Spins an das externe Magnetfeld. Dabei entspricht  $h = g_e \mu_B B_{\text{ext}} / \hbar$  dem Magnetfeld in natürlichen Einheiten, wobei  $\hbar$  das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum,  $\mu_B$  das Bohrsche Magneton und  $g_e$  den Landéfaktor des Elektrons dargestellt. Weiterhin koppelt das externe Magnetfeld ebenfalls an die Kernspins, was in der Hamiltonfunktion durch  $H_{NZ}$  ausgedrückt und als nuklearer Zeemann-Effekt beschrieben wird. Hier ist zu beachten, dass mit dem nuklearen magnetischen Moment  $\mu_N$  und dem nuklearen Landéfaktor  $g_N$  gerechnet werden muss, das über das Verhältnis  $z := \mu_N g_N / (\mu_B g_e)$  mit dem  $h$ -Feld verknüpft werden kann.

### 3.1.1 Dynamik und Overhauser-Feld

Die für die betrachteten Spins  $\vec{S}_0$  und  $\vec{S}_k$  aus (3.2) resultierenden Bewegungsgleichungen sind gegeben durch

$$\frac{d}{dt} \vec{S}_0 = (\vec{B}_{\text{ov}} + \vec{h}) \times \vec{S}_0, \quad (3.3a)$$

$$\frac{d}{dt} \vec{S}_k = (J_k \vec{S}_0 + z \vec{h}) \times \vec{S}_k. \quad (3.3b)$$

und stellen Präzessionsgleichungen der Spins dar. Dabei ist

$$\vec{B}_{\text{ov}} := \vec{B}_1 = \sum_{k=1}^N J_k \vec{S}_k \quad (3.4)$$

das Overhauser-Feld, welches auf den zentralen Spin  $\vec{S}_0$  einwirkt und aus allen Kopplungen der Badspins  $\vec{S}_k$  an diesen resultiert. Höhere Momente des Overhauser-Feldes werden im Hierarchie-Ansatz als

$$\vec{B}_n := \sum_{k=1}^N J_k^n \vec{S}_k \quad (3.5)$$

definiert, sodass eine Zeitentwicklung des Overhauser-Feldes analog zu Gleichung (3.3b) durch

$$\frac{d}{dt} \vec{B}_n = \vec{S}_0 \times \vec{B}_{n+1} \quad (3.6)$$

gegeben ist [30].

Bei Simulationen in denen die Badspins komplett ungeordnet sind, was bei dem im Experiment vorliegenden Temperaturen von  $T \approx 4$  K der Fall ist [14, 17], können die Komponenten des Overhauserfeldes als normalverteilt angenommen werden. Motivieren lässt sich dies mit einer Energieabschätzung der Hyperfeinwechselwirkung: Diese bewegt sich für Quantenpunkte in der Größenordnung von

$$J_Q := \sqrt{\sum_{k=1}^N J_k^2} \simeq 10^{-5} - 10^{-4} \text{ eV}, \quad (3.7)$$

was umgerechnet Temperaturen von  $T = J_Q/k_B \simeq 0,1 - 1$  K entspricht. Diese Temperaturen sind deutlich niedriger als die im Experiment vorliegenden, entsprechend haben die Fluktuationen durch die Temperatur einen größeren Einfluss auf das System als die Kopplung zwischen den Spins.

Mathematisch lässt sich dies über den Dichteoperator  $\hat{\rho}$  ausdrücken, der die Form

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\dim(\mathcal{H})} \cdot \hat{\mathbf{1}} \quad (3.8)$$

hat, wobei  $\mathcal{H}$  der Hilbertraum des Systems ist. Dies ist dadurch begründet, dass das Bad komplett ungeordnet und somit jeder Badzustand als gleich wahrscheinlich anzusehen ist.

Der Erwartungswert der jeweiligen Komponenten  $B_{O_v}^\alpha$  mit  $\alpha \in \{x, y, z\}$  ist dabei

$\mu_{\text{Ov}}^\alpha = 0$ ; die Varianz berechnet sich über

$$\text{Var}[B_{\text{Ov}}^\alpha] = \text{Var}\left[\sum_{k=1}^N J_k \hat{S}_k^\alpha\right] \quad (3.9a)$$

$$= \text{Tr}\left[\hat{\rho} \cdot \sum_{k=1}^N J_k^2 (\hat{S}_k^\alpha)^2\right] - \underbrace{\left(\text{Tr}\left[\hat{\rho} \cdot \sum_{k=1}^N J_k \hat{S}_k^\alpha\right]\right)^2}_{=0} \quad (3.9b)$$

$$= \sum_{k=1}^N J_k^2 \text{Tr}\left[\hat{\rho} \cdot (\hat{S}_k^\alpha)^2\right] \quad (3.9c)$$

$$= \sum_{k=1}^N J_k^2 \frac{S_k(S_k + 1)}{3} \quad (3.9d)$$

mit der Spinlänge des  $k$ -ten Badspins  $S_k$  und der Komponente  $\hat{S}_k^\alpha$  des Spinoperators.

### 3.1.2 Dephasierung und Dephasierungszeit

Die in (3.3a) und (3.3b) aufgeführten Präzessionsgleichungen resultieren darin, dass der Zentralspin mit der Larmorfrequenz  $\omega_L = |\vec{B}_{\text{Ov}} + \vec{h}|$  um die Achse des resultierenden Magnetfeldes präzediert. Weiterhin treten mit zunehmender Zeit Dekohärenzphänomene in Erscheinung, die durch eine charakteristische Dephasierungszeit  $T_2^*$  beschrieben werden können. Diese treten auf, da der Elektronenspin mit den Badspins über die Hyperfeinwechselwirkung interagiert [11]. Aufgrund der Voigt-Geometrie und der Gegebenheit, dass  $|\vec{h}| \gg |\vec{B}_{\text{Ov}}|$  ist, findet die Larmor-Präzession bei hinreichend großen externen Magnetfeldern hauptsächlich in der  $yz$ -Ebene statt. Bei der Betrachtung bloß einer Koordinatenachse ist diese Präzession von einer Einhüllendenfunktion umgeben. Mathematisch lässt sich dies über die Erwartungswerte  $\overline{S^\alpha(t)}$  der einzelnen Komponenten  $\alpha \in \{x, y, z\}$  ausdrücken, wobei die Überstriche die Mittelung über die verschiedenen Konfigurationen  $N_C$  kennzeichnen [31]. Die Larmorpräzession um die  $x$ -Achse kann über  $\overline{S^z(t)}$  beschrieben werden, während hingegen die Einhüllendenfunktion durch

$$S(t) := \sqrt{(\overline{S^y(t)})^2 + (\overline{S^z(t)})^2} \quad (3.10)$$

definiert ist.

Es fällt sofort auf, dass durch die Einhüllende die Dekohärenzphänomene beschrieben werden. Da diese mit der typischen Zerfallszeit  $T_2^*$  verknüpft werden sollen, wird ein

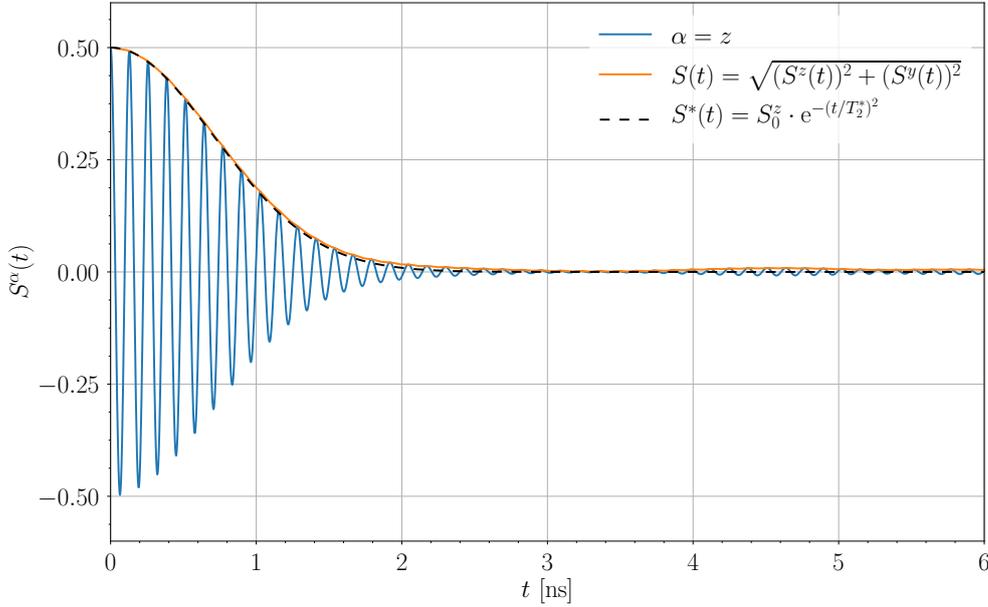
Zerfallsterm

$$S^*(t) = (S_0^z)^2 \exp\left(-\left(\frac{t}{T_2^*}\right)^2\right) \quad (3.11)$$

eingeführt, der diesen Prozess beschreiben soll. Dabei stellt sich heraus, dass die Kurven der Gleichungen (3.10) und (3.11) gerade dann das gleiche Ergebnis liefern, wenn die Dephasierungszeit über

$$T_2^* := \hbar^2 \left( \sum_{k=1}^N J_k^2 S_k^2 \right)^{-1/2} \quad (3.12)$$

berechnet wird.



**Abbildung 3.2:** Zeitliche Abhängigkeit des Erwartungswerts der  $z$ -Komponente des Zentralspins (blaue Kurve) bei einem externen Magnetfeld  $B_{\text{ext}} = 1,0 \text{ T}$  und einer Badgröße von  $N = 100$ . Die schnellen Oszillationen beschreiben die Larmorpräzession des zentralen Elektronenspins. Die orangene Kurve entspricht der Einhüllenden nach Definition (3.10). Die schwarz gestrichelte Kurve zeigt die Dekohärenz gemäß (3.11). Die Zerfallszeit wurde in der Simulation auf  $T_2^* = 1 \text{ ns}$  gesetzt und es wurde über  $N_C = 10^4$  Konfigurationen gemittelt.

In Abbildung 3.2 wird dies einmal graphisch gezeigt. Es ist zu sehen, dass die

Schwingungen in der blauen Kurve die Larmorpräzession sichtbar macht, während die schwarze Kurve die Dephasierung nach Gleichung (3.11) darstellt. Diese ist für Zeiten  $t \lesssim T_2^*$  deckungsgleich mit der orangenen Kurve, die über Gleichung (3.10) berechnet wird. Die Abweichungen für längere Zeiten und das periodische Wiederkehren der Larmorpräzession beziehungsweise der Einhüllenden kann auf numerische Ursachen zurückgeführt werden: Da über endlich viele Konfigurationen  $N_C$  gemittelt wird und somit nur endlich viele Zufallszahlen gemäß (3.9d) für die jeweiligen Overhauserfelder gezogen werden, ergibt sich hier kein monotoner Verlauf im Vergleich zu (3.11) für große Zeiten. Dabei skaliert die Amplitude der Einhüllenden für große Zeiten mit  $1/\sqrt{N_C}$ .

## 3.2 Kopplungskonstanten

Um ein Verständnis für die physikalischen Prozesse zu erlangen, die im Quantenpunktsystem ablaufen, müssen die Hyperfeinkopplungen zwischen dem Zentralspin  $\vec{S}_0$  und den Kernspins  $\vec{S}_k$  und damit verbunden die Kopplungskonstanten  $J_k$  näher betrachtet werden. Dies liefert letztlich auch eine Einsicht über die relevanten Skalen, auf der diese Prozesse ablaufen.

Im Allgemeinen kann die Kopplungskonstante über die Gleichung

$$J_k = \frac{16\pi}{3} \mu_B \mu_N \gamma_k \cdot \left| \psi(\vec{R}_k) \right|^2 \quad (3.13)$$

berechnet werden, wobei  $\mu_N$  das Kernmagneton und  $\gamma_k$  das gyromagnetische Verhältnis des  $k$ -ten Badspins darstellt. Der Vorfaktor  $16\pi/3$  resultiert daher, dass es sich um einen Quantenpunkt handelt, dessen Zentralspin durch ein Elektron bestimmt ist. Bei Löchern muss er entsprechend abgeändert werden [21, 32].

Durch  $\psi(\vec{R}_k)$  wird die Wellenfunktion des Zentralspins am Ort des  $k$ -ten Badspins  $\vec{R}_k$  ausgedrückt; die Kopplungskonstante  $J_k$  ist entsprechend proportional zur Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons am Ort des jeweiligen Kerns. Die Wellenfunktion nimmt dabei die Form

$$\psi(\vec{R}_k) \propto L_0^{3/2} \cdot \exp \left[ - \left( \frac{R_k}{L_0} \right)^m \right], \quad (3.14)$$

an, mit einer charakteristischen Länge  $L_0 \simeq 1 - 10$  nm des Quantenpunkts. Für den Fall  $m = 0$  liegt eine konstante Wellenfunktion vor, für den Fall  $m = 1$  eine exponentielle und für den Fall  $m = 2$  eine gaußförmige.

Um numerische Simulationen durchführen zu können, muss ein Cutoff  $R_{Tr}$  eingeführt werden, sodass nur eine endliche Anzahl an Spins  $N$  an den Elektronenspin koppelt [33]. Insgesamt muss dann für die Lösung der Gleichungen (3.3a) und (3.3b) ein

$3(N + 1)$ -dimensionales Gleichungssystem gelöst werden. Für realistische Quantenpunktsimulationen mit  $N \simeq 10^4 - 10^6$  Badspins ist jedoch eine hinreichend lange Zeitentwicklung numerisch nicht möglich, weshalb entweder weniger Spins in Betracht gezogen werden oder aber Vereinfachungen für die Kopplungskonstanten getroffen werden müssen.

### 3.2.1 Box-Modell

Eine der einfachsten Annahmen, die für die Kopplungen getroffen werden kann, ist, dass insgesamt  $N$  Kernspins  $\vec{S}_k$  mit der gleichen Kopplungskonstante  $J_k = J = \text{const}$  an den Elektronenspin  $\vec{S}_0$  koppeln. Dies entspricht dem Fall  $m = 0$  in Gleichung (3.14). Aufgrund der Gleichheit der Kopplungskonstante bis zu einem Cutoffradius  $R_{\text{Tr}}$  wird dieses Modell auch *Box-Modell* genannt. Mit Hilfe von Gleichung (3.6) kann die Zeitentwicklung für das Overhauserfeld, welches aus der gewählten Kopplungskonstantenverteilung resultiert, zu

$$\frac{d}{dt} \vec{B}_{\text{ov}} = \left( J \vec{S}_0 - z \vec{h} \right) \times \vec{B}_{\text{ov}}. \quad (3.15)$$

bestimmt werden<sup>1</sup>. Der Vorteil dieser Rechnung ist, dass sich die Dimension des zu lösenden Gleichungssystems von  $d = 3(N + 1)$  auf  $d = 6$  reduziert, was numerische Simulationen deutlich beschleunigt. Zu beachten ist, dass die Bewegungsgleichungen zunächst nur für Bäder gelten, die aus einem Isotop bestehen.

### 3.2.2 Erweiterung auf Bäder verschiedener Isotope

Bei der Betrachtung von Quantenpunkten, die im Experiment häufig aus  $\text{In}_x \text{Ga}_{1-x} \text{As}$  bestehen (vergleiche z.B. [14, 17, 18]), muss das in Kapitel 3.2.1 eingeführte Modell jedoch so angepasst werden, dass Teilchen mit verschiedenen Kopplungskonstanten und Spinlängen in Betracht gezogen werden können. Ausgehend davon wird angenommen, dass die relative Häufigkeit der Isotope  $i$  im Quantenpunkt durch  $n_i$  gegeben ist, sodass im Quantenpunkt  $N_i = N \cdot n_i$  Kernspins der Sorte  $i$  an den Zentralspin koppeln. Diese Kopplung ist über die Hyperfeinwechselwirkung bestimmt und ist gemäß des Boxmodells durch  $J_i = \text{const}$  gegeben; die Spinquantenzahlen der jeweiligen Kerne durch  $S_i$ .

Da insbesondere die Dephasierungszeit  $T_2^*$  experimentell gut zugänglich ist, wird

<sup>1</sup>Hergeleitet wird dies in Anhang A.1 ohne Berücksichtigung des nuklearen Zeemann-Effekts. Da dieser Term additiv in der Hamiltonfunktion (3.2) auftritt, kann dieser auch in der Bewegungsgleichung additiv hinzugenommen werden.

die Gleichung (3.12) so umgeschrieben, dass sie von den im vorhergehenden Absatz eingeführten Größen abhängig ist. Entsprechend ergibt sich

$$T_2^* = \hbar^2 \left( \sum_{k=1}^N J_k^2 S_k^2 \right)^{-1/2} \quad (3.16a)$$

$$= \hbar^2 \left( N \sum_{\{i\}} n_i J_i^2 \langle S_i^2 \rangle \right)^{-1/2} \quad (3.16b)$$

$$= \frac{\hbar^2}{J \sqrt{N}} \left( \sum_{\{i\}} n_i \alpha_i^2 \langle S_i^2 \rangle \right)^{-1/2}, \quad (3.16c)$$

wobei die Kopplungskonstanten  $J_i := \alpha_i \cdot J$  mit  $\alpha_i = J_i/J$  und  $J = J_1$  von (3.16b) nach (3.16c) undefiniert werden. Dies ist von Vorteil, da der genaue Wert der Kopplungskonstanten  $J_i$  nicht a priori bestimmt werden muss, sondern nur das Verhältnis zwischen den Kopplungskonstanten der Isotope, welche beispielsweise in Artikel [34] tabelliert sind<sup>2</sup>. Durch eine Umformung ergibt sich schließlich

$$J = \frac{\hbar^2}{T_2^* \sqrt{N}} \left( \sum_{\{i\}} n_i \alpha_i^2 \langle S_i^2 \rangle \right)^{-1/2}, \quad (3.17)$$

sodass sich die Kopplungskonstanten direkt aus  $T_2^*$  berechnen lassen.

Um das Overhauserfeld berechnen zu können, wird dieses zunächst in Teilfelder  $\vec{B}_i$  aufgeteilt, welche aus der Kopplung einer Kernsorte  $i$  an den Zentralspin resultieren. Entsprechend kann das Gesamtverhauserfeld über

$$\vec{B}_{\text{Ov}} = \sum_i \vec{B}_i. \quad (3.18)$$

bestimmt werden. Da die Hamiltonfunktion (3.2) keine Wechselwirkung der Badspins untereinander beinhaltet, können die Gleichungen zur Zeitentwicklung der Teilfelder analog zu (3.15) aufgestellt werden. Hier muss allerdings berücksichtigt werden, dass jedes Isotop einen anderen Landéfaktor  $g_i = z_i \cdot g_e$  aufweist, sodass sich schließlich

$$\frac{d}{dt} \vec{B}_i = \left( J_i \vec{S}_0 - z_i \vec{h} \right) \times \vec{B}_i. \quad (3.19)$$

ergibt.

Analog zu Kapitel 3.1.1 müssen die Komponenten des Overhauserfeldes für  $N_C$

---

<sup>2</sup>Es werden zunächst auch Kopplungskonstanten  $A^i$  tabelliert. Diese entsprechen allerdings nicht den hier verwendeten Kopplungskonstanten. Diese müssten zunächst aus  $A^i$  und weiteren, durch das System bestimmten Parametern berechnet werden, weshalb die Bildung eines Verhältnisses als sinnvoller erachtet werden kann.

Konfigurationen zufällig gezogen werden. Der Erwartungswert der jeweiligen Komponente ist dabei wieder durch  $\mu_i^\alpha = 0$  gegeben, während für die Varianz Gleichung (3.9d) als Ausgangspunkt verwendet wird. Zu beachten ist, dass hier lediglich über eine Teilchenart  $i$  summiert wird, da erst in Gleichung (3.18) die Zusammenführung aller Teilfelder erfolgt. Entsprechend ergibt sich

$$\text{Var}[B_i^\alpha] = \sum_{k \in i} J_k^2 \cdot \frac{S_k (S_k + 1)}{3} \quad (3.20a)$$

$$= n_i N \cdot \alpha_i^2 J^2 \cdot \frac{S_i (S_i + 1)}{3} \quad (3.20b)$$

$$= \frac{\hbar^4 \cdot n_i \alpha_i^2 \cdot S_i (S_i + 1)}{(T_2^*)^2 \cdot \sum_{\{j\}} (n_j \alpha_j^2 \cdot S_j (S_j + 1))} \quad (3.20c)$$

durch Einsetzen von Gleichung (3.17) in (3.20b) und durch das Ausnutzen des Mischungsverhältnisses  $n_i$ . Dieses kann über die natürliche Isotopenverteilung sowie gegebenenfalls einen Mischungsparameter  $x$ , wie zum Beispiel in  $\text{In}_x \text{Ga}_{1-x} \text{As}$ , bestimmt werden. Es zeigt sich also, dass mit kleineren Dephasierungszeiten eine größere Fluktuation des Overhauserfelds einhergehen und umgekehrt.

### 3.2.3 Weitere Parametrisierungsmöglichkeiten

Das Box-Modell stellt jedoch nur eine erste Realisierungsform der Kopplung dar, welches die Beschaffenheit des Systems bis auf die Größe des Quantenpunkts durch den Cutoff  $R_{\text{Tr}}$  nicht berücksichtigt. Nach Gleichung (3.13) scheint es jedoch sinnvoll zu sein, eine nichtkonstante Kopplung für die verschiedenen Badspins anzunehmen, da die Wellenfunktion des Elektrons nach Gleichung (3.14) im Allgemeinen vom Abstand  $R_k$  des Elektrons zum Badspin abhängt.

Ein erster Ansatz, dies zu berücksichtigen, ist zum Beispiel in Artikel [30] gegeben. Hier wird angenommen, dass die Kopplung die Form  $J_k = J_0 \cdot \exp(-\gamma k)$  hat, was im Wesentlichen dem Fall  $m = 1$  entspricht. Durch die Betrachtung des Quadrats des Verhältnisses aus dem ersten Moment  $J_S$  und zweiten Moment  $J_Q$  der Kopplungsverteilung ergibt sich für den Fall konstanter Kopplungsverteilungen die Badgröße  $N$ , weshalb für den Fall der exponentiellen Kopplungsverteilung angenommen wird, dass das Verhältnis aus beiden Momenten der effektiv an den Zentralspin koppelnden Badspins  $N_{\text{eff}}$  entspricht. Dies ist durch

$$N_{\text{eff}} = \frac{J_S^2}{J_Q^2} = \frac{2}{\gamma} + \mathcal{O}(\gamma^0) \quad (3.21)$$

gegeben, wobei das letzte Gleichheitszeichen für kleine Werte von  $\gamma$  Gültigkeit hat. Mit  $N_{\text{eff}} \simeq 10^4 - 10^6$  effektiv an den Zentralspin koppelnden Badspins lässt sich

der Parameter  $\gamma \simeq 10^{-6} - 10^{-4}$  abschätzen, über den die Kopplungskonstanten letztlich bestimmt sind. Zur Simulation dieser Kopplungskonstantenverteilung kann der Spektraldichteansatz herangezogen werden, was zu einer Reduktion des zu lösenden Differentialgleichungssystems von  $d = 3 \cdot (N_{\text{eff}} + 1)$  auf  $d_{\text{neu}} \simeq 150 - 200$  führt. Eine genaue Herleitung der zu lösenden Differentialgleichungen ist in Artikel [30] gegeben. Für andere Kopplungskonstantenverteilungen, die monotonen Verhalten zeigen, kann diese Methodik ebenfalls ausgenutzt werden.

Im Hinblick auf die Beschaffenheit der Quantenpunkte scheint eine andere Parametrisierung der Kopplungskonstanten als die des Box-Modells physikalisch sinnvoll zu sein. Neben der Ortsabhängigkeit der Wellenfunktion  $\psi(\vec{R}_k)$  spielt hier auch die Indiumkonzentration  $x(\vec{r})$  eine Rolle, die aufgrund des Diffusionsprozesses ortsabhängig ist und von der Mitte des Quantenpunkts hin zu den Rändern abnimmt [18]. Die in diesem Kapitel vorgestellte Parametrisierung scheint diese Gegebenheit näherungsweise widerzuspiegeln.

Allerdings ist dabei zu beachten, dass trotz einer Verringerung der Dimension des zu lösenden Gleichungssystems das Erfassen der verschiedenen Isotope  $i \in \{\text{Ga-69}, \text{Ga-71}, \overline{\text{In}}, \text{As-75}\}$  zu einer Gleichungssystemdimension von  $\bar{d} \approx 4 \cdot d_{\text{neu}}$  führt, während das Box-Modell hier eine Dimension von  $d = 15$  liefert.

### 3.3 Nicht berücksichtigte Effekte

#### 3.3.1 Dipol-Dipol-Wechselwirkung

Bei Betrachtung der Hamiltonfunktion (3.2) fällt auf, dass lediglich die Kopplungen der Badspins mit dem Zentralspin, nicht aber die Kopplungen der Badspins untereinander berücksichtigt werden. Begründen lässt sich dies damit, dass die Kopplungen der Dipol-Dipol-Wechselwirkung  $\tilde{J}_{ij}$  wesentlich schwächer sind und sich entsprechend erst auf wesentlich größeren Zeitskalen Effekte bemerkbar machen.

Als Ausgangspunkt für eine Abschätzung kann Gleichung (3.13) herangezogen werden. Unter Vernachlässigung von Vorfaktoren, bei denen angenommen wird, dass sie keinen wesentlichen Einfluss auf die Größenordnung der Kopplungskonstanten haben, ist die Proportionalität der Elektron-Spin-Wechselwirkung durch

$$J_k \propto \mu_B \cdot \mu_N \quad (3.22a)$$

$$\propto \frac{Z e^2}{m_e m_k} \quad (3.22b)$$

gegeben, wobei  $Z$  der Kernladungszahl,  $e$  der Elementarladung,  $m_e$  der Elektronenmasse und  $m_k$  der Masse des  $k$ -ten Nukleus entsprechen. Um eine entsprechende

Abschätzung für die Dipol-Dipol-Wechselwirkung  $\tilde{J}_{ij}$  zweier Kernspins zu bekommen, muss  $\mu_B \rightarrow \mu_N$  durch ein Kernmagneton ersetzt werden. Im Allgemeinen sind die wechselwirkenden Kerne voneinander verschieden, weshalb sich somit für die Proportionalität der Kopplungskonstante zweier miteinander wechselwirkender Kerne  $i$  und  $j$

$$\tilde{J}_{ij} \propto \mu_N^i \cdot \mu_N^j \quad (3.23a)$$

$$\propto \frac{Z_i Z_j e^2}{m_i m_j} \quad (3.23b)$$

ergibt, mit den jeweiligen Massen  $m_i$  und  $m_j$  der Kerne. Um einen Größenordnungsvergleich zwischen (3.22b) und (3.23b) zu ermöglichen, werden im Folgenden die Massen der Kerne  $m_i \approx m_j \approx m_k =: M$  gleichgesetzt. Dies ist zu rechtfertigen, da die Kernmassen in einem  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  Quantenpunkt in etwa die gleiche Größenordnung aufweisen. Werden diese mit der Elektronenmasse verglichen, so kann festgestellt werden, dass in etwa die Relation  $M \approx 10^5 m_e$  gilt. Eine ähnliche Argumentation gilt für die Kernladungszahl, deren Größenordnung für die Isotope in einem  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -Quantenpunkt durch  $Z_i \approx Z_j =: Z \approx 10^2$  abgeschätzt werden kann. Daraus folgt durch Einsetzen der jeweiligen Zahlenwerte

$$J_k \propto 10^{-3} \cdot \frac{e^2}{m_e^2} \quad (3.24a)$$

$$\tilde{J}_{ij} \propto 10^{-6} \cdot \frac{e^2}{m_e^2}, \quad (3.24b)$$

sodass der Vergleich  $J_k \approx 10^3 \cdot \tilde{J}_{ij}$  liefert und entsprechend approximativ gezeigt ist, dass die Hyperfeinwechselwirkung zwischen dem Elektronenspin und den Badspins wesentlich stärker ist als die zwischen zwei Kernspins<sup>3</sup>.

### 3.3.2 Quadrupolare Wechselwirkung

Neben der Dipol-Dipol-Wechselwirkung kann die Hamiltonfunktion (3.2) auch noch um einen Term erweitert werden, der die quadrupolare Wechselwirkung mit in Betracht zieht. Diese tritt dann auf, wenn die Badspins Spinquantenzahlen von  $S \geq 3/2$  aufweisen. Dies ist bei allen Isotopen, aus denen ein  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  Quantenpunkt

<sup>3</sup>Zu beachten ist, dass beim Einsetzen der Zahlenwerte nichts mehr in Vorfaktoren absorbiert wurde, wie es das Proportionalitätszeichen suggerieren könnte. Entsprechend werden die Zahlenwerte im letzten Schritt mit aufgenommen. Allerdings handelt es sich hier nur um eine sehr grobe qualitative Abschätzung, die lediglich eine Idee liefern soll, warum dieser Effekt in (3.2) nicht mit berücksichtigt wird.

besteht, der Fall. Insbesondere auf die Langzeitdynamik des Zentralspins hat diese Wechselwirkung einen Einfluss [35].

Analog zur Argumentation in Kapitel 3.3.1 wird dies jedoch nicht in Betracht gezogen, da die Energieskala der Effekte eine wesentlich geringere ist als die der Hyperfeinwechselwirkung und entsprechende Effekte erst in der Langzeitdynamik des Zentralspins bemerkbar werden.

#### 3.3.3 Quantenpunktensembles

Die im Experiment untersuchten Proben bestehen im Gegensatz zu der in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen nicht aus homogenen Quantenpunktensembles, sondern stellen inhomogene Quantenpunktensembles dar. Entsprechend ist der betrachtete elektronische Landéfaktor  $g_e$  im Experiment nicht auf eine Größe festzulegen, sondern weist eine gewisse Schwankungsbreite  $\Delta g_e$  auf, die für die in dieser Arbeit betrachteten Fälle größenordnungsmäßig auf  $\Delta g_e/g_e \approx 0,005$  festzusetzen ist [15]. Die Konsequenz daraus ist, dass die Präzessionsfrequenzen der Elektronenspins ebenfalls eine Breite  $\Delta\omega$  aufweisen, welche neben der Proportionalität zu  $\Delta g_e$  auch eine zum externen Magnetfeld  $B_{\text{ext}}$  aufweist und mit zunehmendem Feld entsprechend größer wird. Dies führt dazu, dass die Präzession des Elektrons um das Magnetfeld eine stärkere Dämpfung aufweist als in theoretischen Berechnungen ohne  $\Delta g_e$ .

Zu beachten ist, dass bei der Verwendung anderer Proben die Differenz der Landéfaktoren wesentlich größer ausfallen kann als bei der für diese Arbeit verwendeten experimentellen Daten. So gibt es Ensembles, die eine Differenz von  $\Delta g_e/g_e \approx 0,07$  aufweisen, was noch einmal einer Größenordnung mehr entspricht [36–38]. In solchen Fällen ist zu berücksichtigen, dass sich die Dephasierungszeit  $T_2^*$  stark von der gemessenen Abfallszeit  $T_{\text{mess}}$  unterscheidet, sodass diese zunächst über

$$T_2^* = T_{\text{mess}} \cdot \left( 1 + 2 \left[ \frac{\Delta g_e}{g_e} \frac{B}{\Delta B} \right]^2 \right)^{-1/2} \quad (3.25)$$

aus den experimentellen Daten extrahiert werden muss, wobei  $\Delta B = \hbar/(g_e \mu_B T_{\text{mess}})$  entspricht. Bei der Betrachtung von FIG. 5 in Artikel [36] zeigt sich, dass durch die Einführung des Differenzfaktors  $\Delta g_e/g_e$  die daraus resultierenden theoretischen Daten viel besser mit den experimentellen Daten übereinstimmen als die bloße Verwendung von  $T_2^*$ .

## 4 Theoretische Grundlagen - Pulsmodell

### 4.1 Modellbildung

#### 4.1.1 Einzelner Puls

Die im Experiment durch Laserpulse erzeugte Wiederausrichtung des Zentralspins nach der Dephasierung muss mathematisch durch ein Pulsmodell ausgedrückt werden, das in dieser Arbeit durch

$$\vec{S}_0 \rightarrow \begin{pmatrix} X \\ Y \\ 1/2 \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

gegeben ist. Die Ausrichtung des Zentralspins  $\vec{S}_0$  durch den Laserpuls erfolgt dabei instantan, was in erster Näherung durch die kurze Pulslänge von  $t_p \simeq 1 - 10$  ps begründet ist. Dabei nimmt die  $z$ -Komponente des Zentralspins nach jedem Puls den Wert  $S_0^z = 1/2$  an, was einer scharfen Ausrichtung in Quantisierungsrichtung entspricht. Die Komponenten  $S_0^x = X$  und  $S_0^y = Y$  können nun aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelation nicht mehr exakt bestimmt werden, da der Kommutator

$$[\hat{S}_0^\alpha, \hat{S}_0^\beta] \neq 0 \quad (4.2)$$

ist. Da die Gesamtlänge des Spins  $S_1 := \sqrt{\langle S_0^2 \rangle}$  jedoch aufgrund der Relation

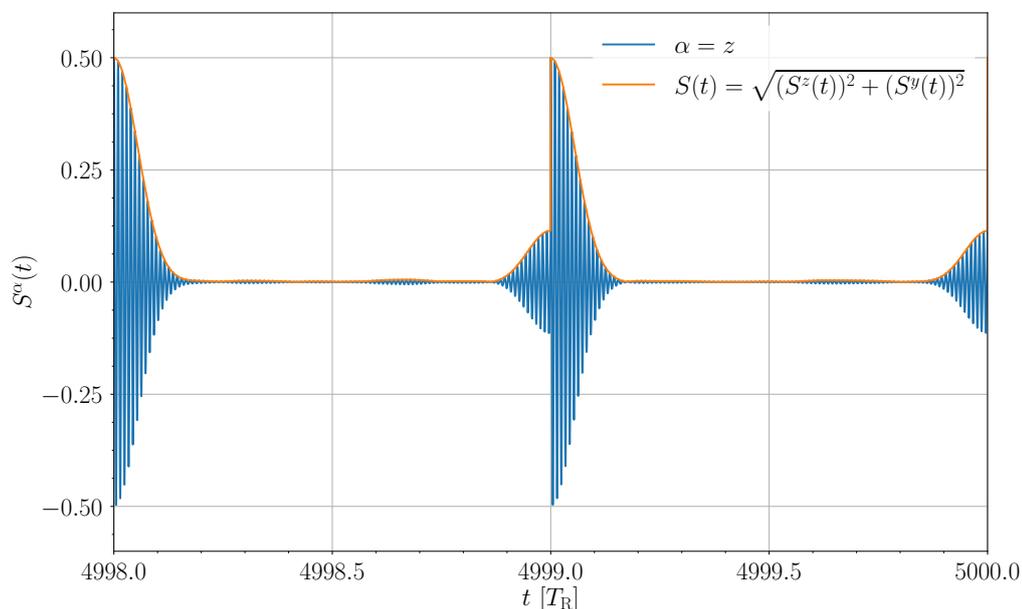
$$[\hat{S}_0^\alpha, \hat{S}_0^2] = 0 \quad (4.3)$$

mit  $\alpha \in \{x, y, z\}$  bestimmbar ist und sich für einen Elektronenspin zu  $S_1 = \sqrt{3}/2$  berechnet, können die Werte  $X$  und  $Y$  mit Hilfe von Zufallszahlen gezogen werden. Dabei ist der Mittelwert der Zufallszahlen durch  $\mu_X = \mu_Y = 0$  gegeben und die Varianz der Größen durch  $\text{Var}[X] = \text{Var}[Y] = 1/4$ .

Dies hat zunächst zur Folge, dass die Länge des Zentralspins bei einer einzelnen Konfiguration von  $S_1$  verschieden sein kann. Da zur Reproduktion des quantenmechanischen Systems allerdings über  $N_C \simeq 10^4$  Konfigurationen gemittelt wird, gilt für die gemittelte Spinlänge  $\overline{S_0} \approx S_1$ , sodass das Verwenden von Zufallszahlen für das Pulsmodell gerechtfertigt ist.

### 4.1.2 Wiederholung von Pulsen

Durch wiederholtes Pulsen und Ausrichten des Zentralspins, wie es auch im Experiment der Fall ist, lassen sich einige physikalische Effekte beobachten, die im Folgenden kurz andiskutiert werden. Zunächst einmal ist zu beobachten, dass durch periodisches Wiederkehren der Pulse der Zentralspin nach der entsprechenden Repititionszeit  $T_R \simeq 10$  ns wieder ausgerichtet wird. Die angewendeten Pulse werden im Folgenden gemäß des Modells in Gleichung (4.1) parametrisiert.



**Abbildung 4.1:** Erwartungswert der  $S^z$ -Komponente (blaue Kurve) sowie Einhüllendenfunktion nach (3.10) (orangene Kurve) des Zentralspins zwischen  $n_p = 4998$ – $5000$  Pulsen. Das externe Magnetfeld weist eine Stärke von  $B_{\text{ext}} = 1$  T auf und die Repititionsrate wurde auf die experimentelle Größe von  $T_R = 13,2$  ns angepasst. Das Bad besteht aus  $N = 100$  Spins gleichem Isotops mit einem gemittelten Landéfaktor für GaAs mit  $z^{-1} = 800$ . Es wurde über  $N_C = 10^5$  Konfigurationen gemittelt.

In Abbildung 4.1 ist zu sehen, dass nach einer hinreichenden Anzahl an Pulsen  $n_p$  das periodische Wiederausrichten des Zentralspins einen Anstieg der Einhüllendenfunktion der Larmor-Präzession auch schon vor Anwendung des Pulses zur Folge

hat. Um diesen Wert zu quantifizieren, wird im Folgenden die Pre-Puls-Amplitude

$$S_{\text{pre}}(t_n = n T_R) := \lim_{\delta t \rightarrow 0} S(n T_R - \delta t) \quad (4.4)$$

definiert, die den Wert der Einhüllendenfunktion unmittelbar vor Anwendung des nächsten Pulses wiedergibt. Sie ist ein Maß dafür, wie stark sich der Zentralspin vor Anwendung des nächsten Pulses in seine Ursprungsposition ausrichtet. Diese Größe stellt eine der zentralen Messgrößen in dieser Arbeit dar und wird unter anderem auf ihren zeitlichen Verlauf untersucht. Sie liefert Aufschluss darüber, wie stark der Zentralspin vom Overhauserfeld sowie den externen Einflüssen, also externes Magnetfeld und Laserpulsen, beeinflusst wird.

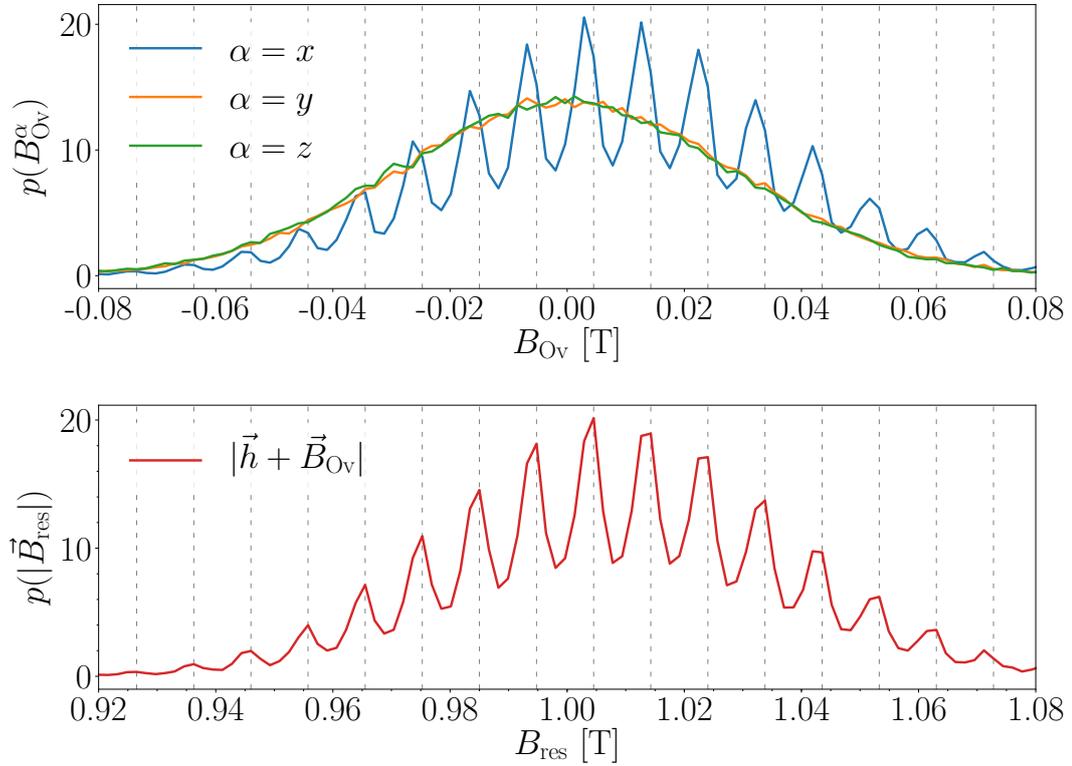
Das Wiederkehren der Einhüllendenfunktion kann über die Hyperfeinwechselwirkung zwischen Zentralspin und Badspins erklärt werden: Die permanente Wiederausrichtung des Zentralspins beeinflusst die Dynamik der Badspins nach (3.3b). Die Ausrichtung dieser verändert sich so lange, bis das Gesamtfeld  $\vec{B}_{\text{res}} = \vec{h} + \vec{B}_{\text{Ov}}$  die Kommensurabilitätsbedingung

$$|\vec{B}_{\text{res}}| \cdot T_R = 2\pi \cdot m, \quad m \in \mathbb{Z} \quad (4.5)$$

erfüllt. Begründet werden kann dies dadurch, dass so die Anzahl der Präzessionen innerhalb der Zeit  $T_R$  zwischen zwei Pulsen ganzzahligen Vielfachen des Gesamtfeldes  $|\vec{B}_{\text{res}}|$  entspricht. Da das externe Feld  $\vec{h}$  seine Stärke und Richtung nicht ändert führt dies dazu, dass nur bestimmte Werte für  $\vec{B}_{\text{Ov}}$  eine Erfüllung von Bedingung (4.5) ermöglichen. Ist dieser Zustand erreicht, so befinden sich die Badspins in einem quasistationären Zustand und weiteres Pulsen hat keinen Einfluss mehr auf die Larmorpräzession des Zentralspins, da dieser nun der Dynamik der Pulsrate folgt.

In Abbildung 4.2 ist im unteren Teil die Entwicklung des Gesamtfeldes bei einem externen Feld  $h = 1,0 \text{ T}$  nach  $n_p = 5000$  Pulsen gezeigt. Dabei wird das resultierende Feld  $\vec{B}_{\text{res}}$  für jede Konfiguration einzeln berechnet und anschließend in einem Histogramm aufgetragen. Durch anschließende Normierung kann die gezeigte Kurve als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden. Es zeigt sich, dass die Gaußverteilung zu Beginn der Simulation (nicht aufgezeigt) durch das periodische Pulsen anfängt, Peaks an den Stellen auszubilden, die den Resonanzbedingungen (4.5) entsprechen. Die Bevorzugung dieser Werte  $|\vec{B}_{\text{res}}|_m$  und das Ausprägen der Peaks wird auch als Frequency-Focusing bezeichnet [15, 16, 39, 40].

Bei der Betrachtung der einzelnen Feldkomponenten des Overhauserfeldes  $B_{\text{Ov}}^\alpha$  fällt auf, dass die  $y$ - und  $z$ -Komponente durch das Pulsen nicht beeinflusst werden und ihre ursprüngliche, gaußförmige Form beibehalten. Hingegen bildet die  $x$ -Komponente, in deren Richtung auch das externe Magnetfeld  $\vec{h}$  angelegt ist, ähnliche Peaks aus wie auch schon das Gesamtfeld  $|\vec{B}_{\text{res}}|$ . Diese liegen allerdings nicht auf den berechneten Resonanzen (4.5), sondern sind verschoben. Lediglich der



**Abbildung 4.2:** Darstellung der Wahrscheinlichkeitsdichte der Overhauserfeldkomponenten (oberer Teil) sowie des Betrags des resultierenden Feldes  $|\vec{h} + \vec{B}_{\text{Ov}}|$  (unterer Teil) nach  $n_p = 5000$  Pulsen. Die gestrichelten Linien entsprechen den Resonanzbedingungen (4.5). Weitere physikalische Parameter können der Unterschrift aus Abbildung 4.1 entnommen werden.

Abstand zwischen zwei Peaks ist der gleiche. Die Erklärung hierfür wird in Artikel [39] geliefert: Nicht bloß die Feldkomponente, in die das externe Feld angelegt wird, ist von Relevanz für die Erfüllung der Resonanzbedingung, sondern das Gesamtfeld. Jedoch ist die Komponente, in der auch das externe Feld angelegt ist, hauptsächlich dafür verantwortlich, dass sich die Peaks in der Wahrscheinlichkeitsdichte ausbilden, da die Larmorpräzession insbesondere für große externe Felder  $h$  um die  $x$ -Achse stattfindet. Für diesen Fall unterscheiden sich die Wahrscheinlichkeitsdichten von  $p(B_{\text{Ov}}^x)$  und  $p(|\vec{B}_{\text{res}}|)$  auch nur geringfügig voneinander, da hier der Einfluss der  $y$ - und  $z$ -Komponente immer stärker vernachlässigbar ist.

Das Ausbilden eines quasistatischen Badzustands aufgrund des Frequency-Focusing und entsprechend die auftretenden ganzzahligen Präzessionen des Zentralspins innerhalb der Zeit führt dazu, dass das Bad keinen weiteren Einfluss mehr auf die

Dynamik des Spins nimmt und vice versa. Entsprechend führt das Pulsen lediglich dazu, dass der Zentralspin wieder ausgerichtet wird. Für die Pre-Puls-Amplitude zeigt sich, dass diese ihren Wert auch nicht mehr verändern und somit zeitlich gesehen in einen Sättigungswert gelaufen sind. Eine genauere Analyse dazu gibt es in Kapitel 6.1, da hier auch die Methodik vorgestellt wird, mit der weitere relevante Größen bestimmt werden.

## 4.2 Erweiterungsmöglichkeiten

### 4.2.1 Trion-Zerfall

Zur Vereinfachung des Pulsmodells wurden einige physikalische Effekte nicht betrachtet, die nun diskutiert werden sollen. Ein wesentlicher Effekt ist dabei der Trion-Zerfall. Das externe Pulsen mit zirkular polarisiertem Licht führt dazu, dass unter Berücksichtigung der optischen Auswahlregeln aus dem Valenzband des Quantenpunktmaterials ein Elektron ins Leitungsband angeregt wird und das Valenzband ein Loch aufweist. Exemplarisch wird dies nun für  $\pi$ -Laserpulse mit  $\sigma^+$ -polarisiertem Licht dargestellt: Durch den Puls wird der Übergang

$$|\uparrow\rangle \rightarrow |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \quad (4.6)$$

erzwungen, während hingegen der Zustand  $|\downarrow\rangle$  durch diese Pulse nicht beeinflusst wird. Entsprechend ist der Grundzustand nun polarisiert, da die Hälfte der Elektronen zu einem Trion angeregt wurden<sup>1</sup>. Dieser polarisierte Grundzustand entwickelt sich nun schon zeitlich unter Berücksichtigung des externen Magnetfeldes gemäß Kapitel 3.1.2, während das Trion dieser Dynamik nicht folgt [40]. Dieses ist jedoch instabil und zerfällt nach einer Zeit  $\tau \simeq 0,1$  ns unter Aussendung eines Photons wieder in seinen Ausgangszustand, sodass auch hier die zeitliche Entwicklung nach Kapitel 3.1.2 zeitverzögert einsetzt. Experimentell kann dies durch die Vertiefung bei Zeiten  $t \simeq \tau$  beobachtet werden.

Eine Vernachlässigung dieses Effektes wird dadurch begründet, dass die Wiederausrichtung des Elektronenspins im Gegensatz zum Zerfall nur unwesentlich vom Trion-Zerfall betroffen ist, da hier eine hinreichend große Zeit verstrichen ist und der Zerfall des Trions nur auf Zeitskalen  $\tau \simeq 10^{-2} \cdot T_R$  einen wesentlichen Effekt auf die Entwicklung der Einhüllendenfunktion hat. Entsprechend sind die Auswirkungen auf die Pre-Puls-Amplitude (4.4) als geringfügig zu bewerten, sodass diese Näherung für die in dieser Arbeit untersuchten Effekte gerechtfertigt scheint.

<sup>1</sup>Hier wird die Annahme getroffen, dass bei einer Simulation mit einem hinreichend großen  $N_C$  ungefähr gleich viele Elektronen sich im Zustand  $|\uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\rangle$  befinden

### 4.2.2 Pulslänge

Weiterhin wurde die Näherung durchgeführt, dass es sich bei den Pulsen um instantane Pulse handelt. Allerdings ist es so, dass die Pulse über einen endlichen Zeitraum von  $t_p \simeq 1 - 10$  ps auf den Zentralspin wirken. In Artikel [17] wurden die Folgen einer endlichen Pulslänge auf die Dynamik des Systems untersucht. Es zeigt sich, dass aufgrund der endlichen Länge die Pulse weniger effizient werden und entsprechend mehr Pulse benötigt werden, um einen gleichen Pre-Puls-Wert nach (4.4) zu erhalten. Insbesondere bei großen Magnetfeldern ist dieser Effekt zu beobachten, da die Frequenz der Larmor-Präzession vom externen Magnetfeld abhängt und somit mehr Präzessionsumdrehungen während der Pulszeit  $t_p$  durchgeführt werden können.

Jedoch ist zu erwähnen, dass die Pulsdauer in diesem Artikel zu groß gewählt wurde, um grundsätzlich den Einfluss einer endlichen Pulsdauer auf die Systemdynamik zu beobachten. Entsprechend sind die Effekte im Experiment weniger stark ausgeprägt und können für die in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen vernachlässigt werden.

## 5 Numerische Grundlagen und Fehlerabschätzung

### 5.1 Verwendeter Algorithmus

Die in dieser Arbeit zu lösenden Bewegungsgleichungen (3.3a) und (3.19) stellen Differentialgleichungssysteme 1. Ordnung dar. Allgemein lassen sich solche Systeme durch

$$\frac{d\vec{x}}{dt}(t) = \vec{f}(\vec{x}(t), t) \quad (5.1)$$

ausdrücken, wobei diese genau dann numerisch lösbar sind, wenn eine vorgegebenen Startbedingung  $\vec{x}(t_0) = \vec{x}_0$  existiert. In dieser Arbeit wird zum Lösen der Bewegungsgleichungen der in C++ vorimplementierte Dormand-Price-Algorithmus (DOPRI5) verwendet. Bei diesem Algorithmus handelt es sich um einen adaptiven Algorithmus, bei welchem eine dynamische Anpassung der Schrittweite  $\Delta t$  durchgeführt wird. Dies geschieht nach folgendem Muster:

- Zunächst wird extern eine absolute und relative Genauigkeit  $\Delta_{\text{abs}}$  und  $\Delta_{\text{rel}}$  sowie eine Startschrittweite  $\Delta t_0$  vorgegeben. Die Genauigkeiten sollen bei jedem Rechenschritt eingehalten werden; die Startschrittweite wird zunächst in jedem Rechenschritt als Ausgangsbasis eingesetzt, um ein optimales  $\Delta t$  zu bestimmen.
- Im nächsten Schritt werden mit Hilfe des vorgegebenen  $\Delta t_0$  zwei Lösungen der Differentialgleichung zum Zeitpunkt  $\vec{x}(t + \Delta t_0)$  berechnet, einmal mit 4. Ordnung Genauigkeit und einmal in 5. Ordnung Genauigkeit.
- Mit Hilfe der berechneten Lösungen werden nun die Genauigkeiten der Lösung 4. Ordnung mit der 5. Ordnung verglichen und die Schrittweite  $\Delta t$  so angepasst, dass sie als optimal gewählt gilt. Auf dieser Basis wird schließlich der neue Datenpunkt  $\vec{x}(t + \Delta t) =: \vec{x}_{i+1}$  in 5. Ordnung berechnet, der als Lösung der Differentialgleichung angesehen wird und als Ausgangspunkt für den nächsten zu lösenden Zeitschritt verwendet wird.

Ein weiterer Vorteil des verwendeten Algorithmus ist das *First-Same-As-Last*-Prinzip, dass für den Schritt  $\vec{x}_i$  berechnete Ergebnisse auch im Schritt  $\vec{x}_{i+1}$  wiederverwenden kann und somit Rechnungen beschleunigt [41].

## 5.2 Grundlage zur Fehlerabschätzung

Als Grundlage für diese Arbeit wird ein C++ Programm verwendet, welches auch schon zur Berechnung von in Artikel [39] veröffentlichten Ergebnissen Anwendung fand. Hier zeigte sich schon das Problem, dass die numerischen Rechnungen sehr zeitaufwendig sind, um mit experimentellen Daten vergleichbare Ergebnisse zu erhalten, sodass es notwendig ist, diese möglichst effizient zu gestalten. Der vielversprechendste Ansatz ist, die Genauigkeiten der Rechnungen zu verringern, da hier nach Kapitel 5.1 die Schrittweite  $\Delta t$  größer gewählt wird und somit längere Zeiten mit gleichem Rechenaufwand simuliert werden können. Allerdings ist hier zu beachten, dass der damit einhergehende numerische Fehler größer wird. Entsprechend ist eine systematische Analyse des Fehlers unbedingt notwendig, um den Einfluss der einzelnen physikalischen Parameter auf diesen zu beurteilen. Durch die Anpassung der Genauigkeiten  $\Delta_{\text{abs}}$  und  $\Delta_{\text{rel}}$  soll garantiert werden, dass sich der Fehler für eine beliebige Abänderung der physikalischen Parameter innerhalb eines Zielkorridors befindet, sodass den Ergebnissen in jedem Fall vertraut werden kann.

Um diesen berechnen zu können, wird zunächst eine Referenzrechnung benötigt, mit der schließlich Rechnungen mit verschiedenen Genauigkeiten verglichen werden können. Da eine analytische Lösung der Differentialgleichungen nicht berechenbar ist, werden die Genauigkeiten für die Referenzrechnung  $\Delta_{\text{abs}}^{\text{ref}}$  und  $\Delta_{\text{rel}}^{\text{ref}}$  so klein gewählt, dass die numerischen Fehler im betrachteten Zeitintervall als vernachlässigbar klein anzusehen sind. Dies wird im Folgenden als *quasiexakte* Rechnung bezeichnet. Die externen Parameter werden dabei wie folgt gewählt:

$$N = 1000 \quad B_{\text{ext}} = 1,0 \text{ T} \quad n_{\text{p}} = 100\,000 \quad T_{\text{R}} = 13,2 \text{ ns} \quad g_{\text{e}} = 0,555.$$

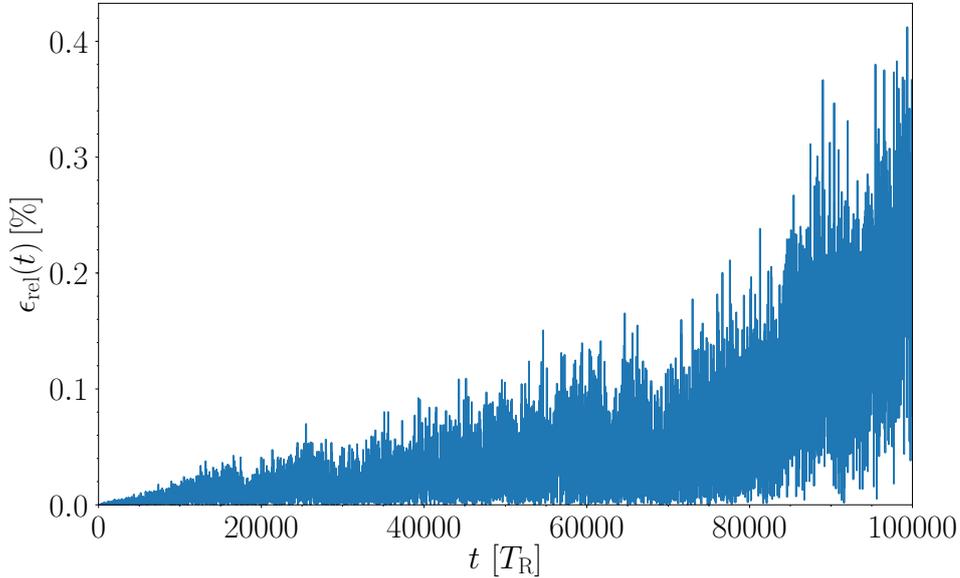
Anschließend muss der numerische Fehler, der aus der Wahl der Genauigkeiten resultiert, definiert werden. Unter der Annahme, dass  $S_{\text{pre}}^i(t)$  eine beliebige Simulation mit den gleichen gewählten Parametern, aber anderen Genauigkeiten  $\Delta_{\text{abs}}^i$  und  $\Delta_{\text{rel}}^i$  ist, ist der auf die Spinlänge normierte, relative Fehler durch

$$\epsilon_{\text{rel}}(t) := \frac{S_{\text{pre}}^{\text{ref}}(t) - S_{\text{pre}}^i(t)}{\sqrt{\langle S_0 \rangle}} \quad (5.2)$$

gegeben, wobei  $S_{\text{pre}}^{\text{ref}}(t)$  dem Ergebnis der numerischen Simulation aus der quasiexakten Berechnung entspricht.

Schließlich wird ein Maximalfehler  $\epsilon_{\text{max}}$  festgelegt. Liegt der Fehler einer Rechnung  $S_{\text{pre}}^i$  unter diesem Wert, so wird diese als hinreichend genau angesehen. In dieser Arbeit wird für die Abschätzung ein Wert von  $\epsilon_{\text{max}} \approx 0,5\%$  gewählt. In Abbildung 5.1 ist der berechnete Fehler  $\epsilon_{\text{rel}}(t)$  aufgetragen<sup>1</sup>. Es ist ersichtlich, dass dieser in

<sup>1</sup>Der Fehler wurde im rotierten System berechnet, welches in Kapitel 5.3 eingeführt wird.



**Abbildung 5.1:** Graphische Darstellung des Fehlers  $\epsilon_{\text{rel}}(t)$ .

etwa linear mit der Zeit ansteigt. Begründet ist dies dadurch, dass sich die Fehler, die in den einzelnen Rechenschritten gemacht werden, addieren. Da weiterhin extern eine Genauigkeit vorgegeben wird, ist der Fehler in jedem Schritt in etwa gleich groß, sodass der Zusammenhang  $\epsilon_{\text{rel}}(t) \propto t$  als näherungsweise linear angesehen werden kann. Nach der Pulszahl  $n_p = 100\,000$  liegt der Fehler in etwa in der vorgegebenen Größenordnung von  $\epsilon_{\text{max}}$ , sodass diese Rechnung als Basis für das Skalierungsverhalten mit den physikalischen Parametern  $N$ ,  $n_p$  und  $B_{\text{ext}}$  dient. Die Genauigkeiten, die zur Berechnung des Fehlers  $\epsilon_0(t)$  verwendet werden, sind durch

$$\begin{aligned} \Delta_{\text{abs}}^{\text{ref}} &= \frac{4 \cdot 10^{-8}}{a} & \Delta_{\text{abs}}^0 &= \frac{1 \cdot 10^{-2}}{a} \\ \Delta_{\text{rel}}^{\text{ref}} &= \frac{4 \cdot 10^{-9}}{a} & \Delta_{\text{rel}}^0 &= \frac{1 \cdot 10^{-3}}{a} \\ \Delta t_0^{\text{ref}} &= \frac{4 \cdot 10^{-6}}{a} & \Delta t_0^0 &= \frac{1 \cdot 10^{-3}}{a} \end{aligned}$$

gegeben, wobei  $a := 1 + h_{B=1T} \approx 49,81$  entspricht und aus dem programmhistorischen Kontext übernommen wurde.

### 5.3 Rotationsansatz

Wird ein externes Magnetfeld  $\vec{h} = h \cdot \vec{e}_x$  eingeschaltet, so kann die Rechenzeit verkürzt werden, indem das Koordinatensystem in jedem Rechenschritt mitrotiert wird. Die Rotationsfrequenz entspricht dabei der des Zentralspins, also der Larmor-Frequenz, die durch  $\omega = h/\hbar$  gegeben ist. Mathematisch lässt sich dies über eine Drehmatrix  $\mathbf{D}$  ausdrücken, die bei der vorgegebenen Geometrie des Systems durch

$$\mathbf{D}(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\omega t) & \sin(\omega t) \\ 0 & -\sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

bestimmt ist. In den numerischen Rechnungen wurde  $\hbar = 1$  gesetzt, weshalb im Folgenden  $\omega t \rightarrow ht$  verwendet wird. Es wird der Ansatz  $\vec{S}_0(t) = \mathbf{D}(t) \cdot \vec{Z}(t)$  gewählt, sodass sich für die Bewegungsgleichung (3.3a) folgendes ergibt:

$$\frac{d\vec{S}_0}{dt}(t) = \frac{d\mathbf{D}}{dt}(t) \cdot \vec{Z}(t) + \mathbf{D}(t) \cdot \frac{d\vec{Z}}{dt}(t). \quad (5.4)$$

Durch explizites Ausrechnen des ersten Summanden dieser Gleichung stellt sich heraus, dass

$$\frac{d\mathbf{D}}{dt}(t) \cdot \vec{Z}(t) = \vec{h} \times \vec{S}_0(t) \quad (5.5)$$

ist, sodass sich für den Spin im rotierten Koordinatensystem schließlich die Bewegungsgleichung

$$\frac{d\vec{Z}}{dt}(t) = \mathbf{D}^{-1}(t) \cdot (\vec{B}_{\text{ov}}(t) \times \vec{S}_0(t)) \quad (5.6)$$

$$= \begin{pmatrix} B_y \cdot S_z - B_z \cdot S_y \\ S_x \cdot (B_z \cos(ht) + B_y \sin(ht)) - B_x \cdot Z_z \\ S_x \cdot (B_z \sin(ht) - B_y \cos(ht)) + B_x \cdot Z_y \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

ergibt, die in den numerischen Berechnungen gelöst wird<sup>2</sup>.

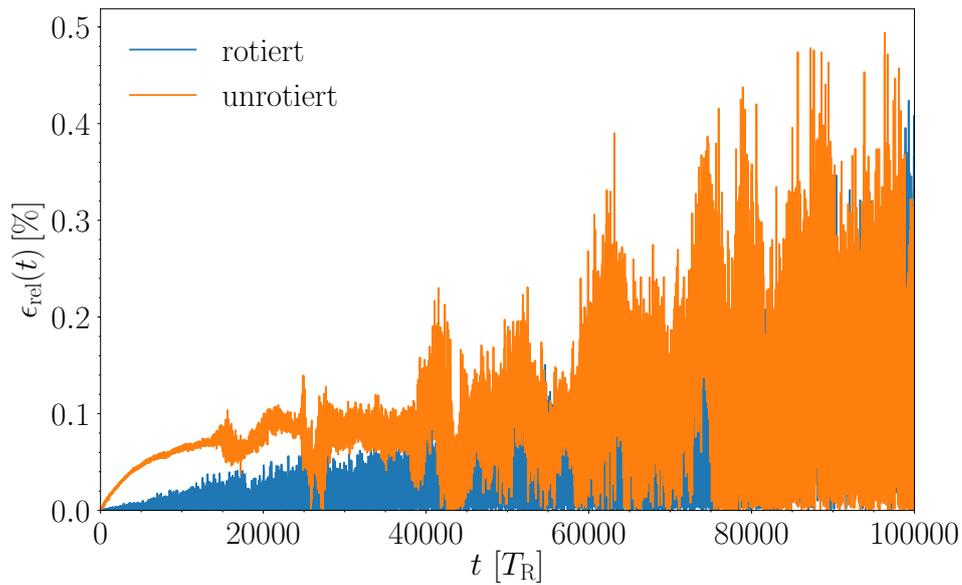
Um zunächst zu überprüfen, ob ein Laufzeitvergleich sinnvoll ist, müssen die Fehler, die in beiden Rechnungen gemacht werden, betrachtet werden. Die Genauigkeiten wurden dabei schon in Kapitel 5.2 durch  $\Delta_{\text{abs}}^0$  und  $\Delta_{\text{rel}}^0$  festgelegt. Diese sind in Abbildung 5.2 zu sehen. Es fällt auf, dass die Fehler in etwa in der gleichen Größenordnung liegen, aber die rotierte Rechnung insgesamt leicht genauere Ergebnisse liefert.

---

<sup>2</sup>In Kapitel A.2 werden die angegebenen Relationen gezeigt beziehungsweise hergeleitet

|         |           | unrotiert               | rotiert                 |
|---------|-----------|-------------------------|-------------------------|
| $B$ [T] | $n_p$ [#] | $t_{\text{lauf}}$ [min] | $t_{\text{lauf}}$ [min] |
| 1,0     | 12 000    | 0,67                    | 0,54                    |
| 2,0     | 48 000    | 7,19                    | 4,56                    |

**Tabelle 5.1:** Laufzeitvergleich für den Rotationsansatz und die direkte Lösung. Die physikalischen Parameter sind durch  $N = 100$  und  $g_e = 0,555$  gegeben. Dabei wurde über  $N_C = 10^4$  Konfigurationen gemittelt und es wurden pro Kern 5 Konfigurationen berechnet.



**Abbildung 5.2:** Graphische Darstellung des Fehlers  $\epsilon_0(t)$ , einmal für die Lösung via Rotationsansatz (rotiert) und einmal für die direkte Lösung (unrotiert).

Entsprechend ist es auch möglich, die Laufzeiten der beiden Rechenansätze miteinander zu vergleichen. Exemplarisch wurde dies in Tabelle 5.1 für zwei verschiedene Simulationen getan. Es zeigt sich, dass der Rotationsansatz je nach eingegebenen Parametern um etwa 20 % – 40 % effizienter ist als eine direkte Lösung über den unrotierten Ansatz.

## 5.4 Skalierungsverhalten

Durch die Abänderung physikalischer Parameter in der Simulation können die in Kapitel 5.2 festgelegten Genauigkeiten nicht mehr verwendet werden, da sie zu einer anderen zeitlichen Entwicklung des Fehlers führen. Dies führt entweder dazu, dass die Rechnungen zu ungenau sind und  $\epsilon_{\max}$  deutlich überschritten wird oder aber, dass die Rechnungen genauer als notwendig sind und entsprechend zu viel Rechenkapazität verwendet wird, um ausreichend genaue Daten zu erzeugen.

Zunächst ist zu erwähnen, dass eine Erhöhung der Genauigkeiten einen geringeren Anstieg des Fehlers zur Folge hat, da so die Zeitschritte  $\Delta t$  durch den Algorithmus kleiner gewählt werden und somit genauere Simulationen möglich sind. Insbesondere die Wahl des Wertes für  $\Delta_{\text{abs}}$  hat hier einen großen Einfluss, da sie einen Aufschluss darüber gibt, wie groß der absolute Fehler in jedem Rechenschritt ist. Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass die gewählte Genauigkeit und Fehler in einem umgekehrt proportionalen Verhältnis zueinander stehen. Wird also doppelt so genau simuliert, so steigt der Fehler nur halb so schnell an. Begründet werden kann dies mit der Additivität des Fehlers in jedem Rechenschritt sowie mit dem linearen Anstieg des Fehlers in der Zeit (vergleiche Abbildung 5.1).

Im Folgenden wird nun diskutiert, wie sich die Fehler unter Abänderung der physikalischen Parameter  $x_i \in \{n_p, N, B_{\text{ext}}\}$  entwickeln und welche Konsequenzen dies für die Skalierung der Genauigkeiten hat. Dies wird über die Anpassungsfunktionen  $f_i(x_i)$  ausgedrückt, sodass sich für die Genauigkeiten  $\Delta_j$  mit  $j \in \{\text{abs}, \text{rel}\}$

$$\Delta_j = \Delta_j^0 \cdot \prod_{\{i\}} f_i(x_i) \quad (5.8)$$

ergibt. Ebenfalls wird empirisch die Behauptung belegt, dass sich Genauigkeit und Fehler umgekehrt proportional zueinander entwickeln.

- Eine Abänderung des Parameters  $n_p$  hat zur Folge, dass über unterschiedlich lange Zeiträume simuliert werden muss. Je größer  $n_p$ , desto länger muss simuliert werden. Da am Ende der Simulationszeit  $t_{\text{end}} = n_p \cdot T_R$  der Fehler  $\epsilon_{\max}$  nicht überschritten werden soll und zuvor angenommen wurde, dass

Genauigkeiten und Fehler umgekehrt proportional verhalten, wird die Funktion

$$f_1(n_p) = \frac{n_p^0}{n_p} \quad (5.9)$$

zur Skalierung verwendet. Dies ist für verschiedene  $n_p$  im oberen Teil von Abbildung 5.3 gezeigt.

- Durch eine Abänderung der Badgröße  $N$  verändert sich auch die Stärke der Kopplungskonstanten aus Gleichung (3.17), die bei der Simulation in Betracht gezogen werden müssen. Mit einer geringeren Kopplungskonstante geht ein langsamerer Anstieg der Pre-Puls-Amplitude (4.4) einher, weshalb auch hier die Genauigkeit der Schrittweite angepasst werden kann. Je schneller die Kurven ansteigen, desto genauer muss simuliert werden, um wesentliche Effekte mitnehmen zu können. Die Konsequenz daraus ist, dass für geringe Badgrößen eine kleinere Schrittweite notwendig ist. Dies übersetzt sich im angewendeten Algorithmus durch eine höhere Genauigkeit. Empirisch zeigt sich, dass die Funktion

$$f_2(N) = \frac{N}{N^0} \quad (5.10)$$

am Besten für die Skalierung der Genauigkeit geeignet ist. Graphisch wird dies im mittleren Teil von Abbildung 5.3 gezeigt.

- Eine Veränderung des externen Magnetfeldes  $B_{\text{ext}}$  führt dazu, dass sich die Larmor-Frequenz des Spins ändert. In Kapitel 5.3 wurde  $\hbar = 1$  gesetzt, sodass durch  $\omega = h$  gegeben ist.

Da die Larmor-Frequenz bei hinreichend großem  $h$  die auf der Zeitskala kleinste aufzulösende Größe ist, gehen mit höheren Larmor-Frequenzen kleinere aufzulösende Zeiten einher. Demnach müssen auch die Genauigkeiten der Simulation angepasst werden, um kleinere Zeiten hinreichend scharf auflösen zu können. Da sich die Frequenz  $\omega$  antiproportional zur Periodendauer  $T$  der Präzession verhält, werden die Genauigkeiten linear mit der Frequenz beziehungsweise mit dem externen Magnetfeld skaliert, sodass sich

$$f_3(h) = \frac{1 + h_{B=1\text{T}}}{1 + h} \quad (5.11)$$

ergibt<sup>3</sup>. Entsprechend wird bei großen Magnetfeldern genauer simuliert, um eine Larmorpräzession genau auflösen zu können. Eine graphische Darstellung ist im unteren Teil von 5.3 gegeben.

<sup>3</sup>Aus programmhistorischen Gründen findet keine exakte lineare Skalierung mit  $h$  statt, sondern eine mit dem Term  $1+h$ . Dies liegt daran, dass auch Simulationen für den Fall  $h = 0$  durchgeführt werden können. Da bei den verwendeten externen Feldern  $B \simeq 1 - 10 \text{ T}$  und Zerfallszeiten  $T_2^* \simeq 1 \text{ ns}$  allerdings  $h \gg 1$  ist, kann hier von einer linearen Skalierung gesprochen werden, da in diesem Fall  $1 + h \approx h$  gilt.

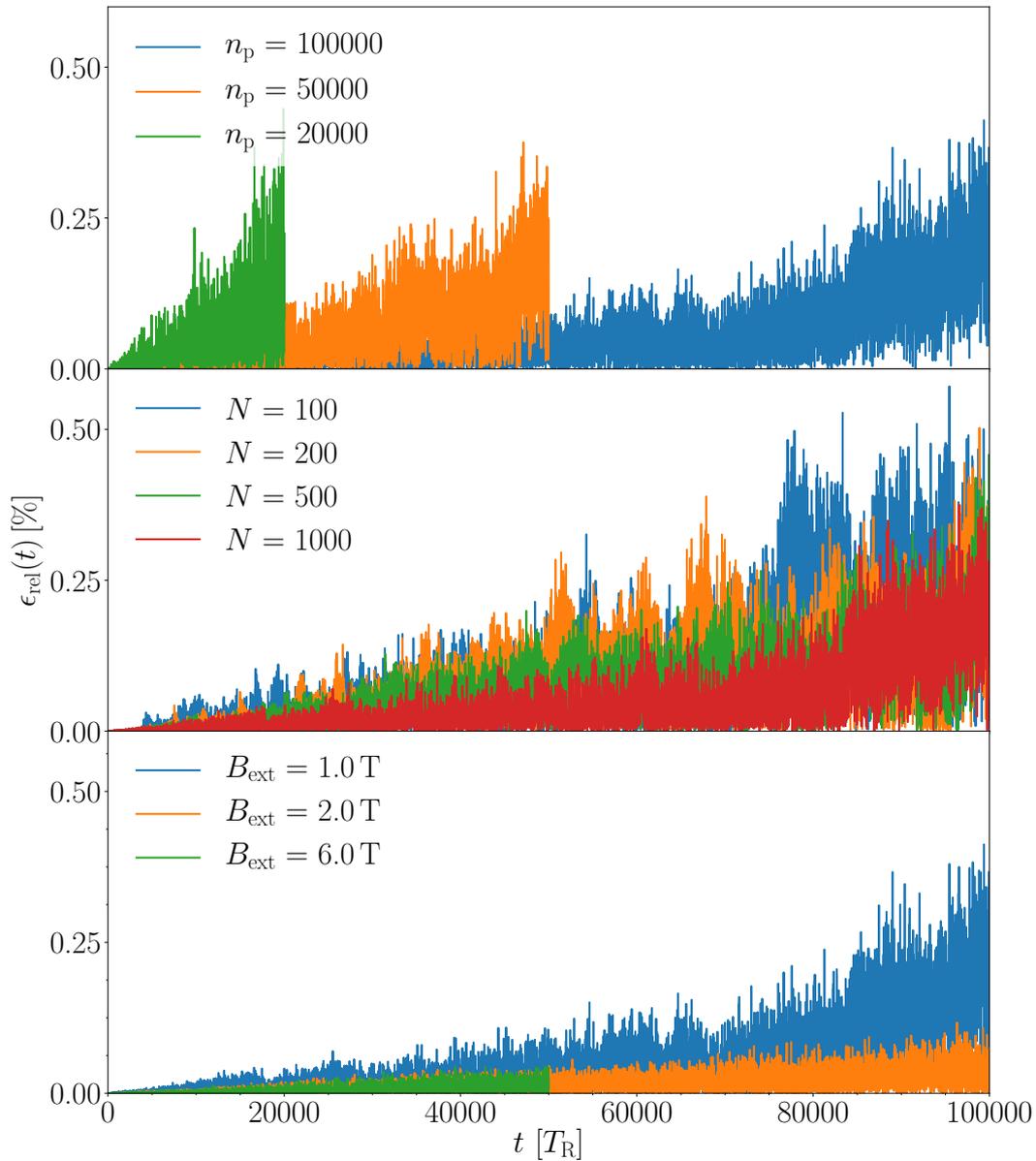
Weiterhin werden Ober- beziehungsweise Untergrenzen für die jeweiligen physikalischen Parameter, mit welchen skaliert wird, festgelegt. Begründen lässt sich dies damit, dass die Fehler nahe dieser Grenzen stark schwanken und somit beim Überschreiten dieser nicht mehr gewährleistet ist, dass  $\epsilon_{\text{rel}}(t) < \epsilon_{\text{max}}$  ist. Überschreitet ein Parameter also eine Obergrenze oder vice versa, so wird der physikalische Parameter zur Skalierung der Genauigkeit auf den Grenzwert gesetzt. Entsprechend

**Tabelle 5.2:** Grenzwerte bei der Skalierung der jeweiligen Parameter  $x_i$  in den Skalierungsfunktionen  $f_i(x_i)$ .

| $x_i$            | Art der Grenze | Grenzwert |
|------------------|----------------|-----------|
| $n_p$            | Untergrenze    | 10 000    |
| $N$              | Obergrenze     | 1000      |
| $B_{\text{ext}}$ | Untergrenze    | 1,0 T     |

In Tabelle 5.2 sind diese Werte aufgelistet.

Im mittleren Teil Abbildung 5.3 wird sichtbar, dass die zuvor festgelegte Grenze von  $\epsilon_{\text{max}}$  unter Abänderung der physikalischen Parameter und damit einhergehend der Genauigkeiten nicht wesentlich überschritten wird. Bei den Größen  $n_p$  und  $N$  ist der Kurvenverlauf und der Endfehler ähnlich, während hingegen bei  $B_{\text{ext}}$  sogar mit zunehmenden Feldstärken der Fehler sogar stärker abnimmt als gefordert. Eine Anpassung der Funktion (5.11) könnte entsprechend sogar noch die Laufzeit verkürzen.



**Abbildung 5.3:** Skalierung des Fehlers mit den jeweiligen Funktionen  $f_i(x_{\text{skal}})$ . Der jeweils untersuchte Parameter  $x_{\text{skal}}$  ist der Legende zu entnehmen, während die anderen physikalischen Parameter aus Kapitel ?? übernommen wurden.

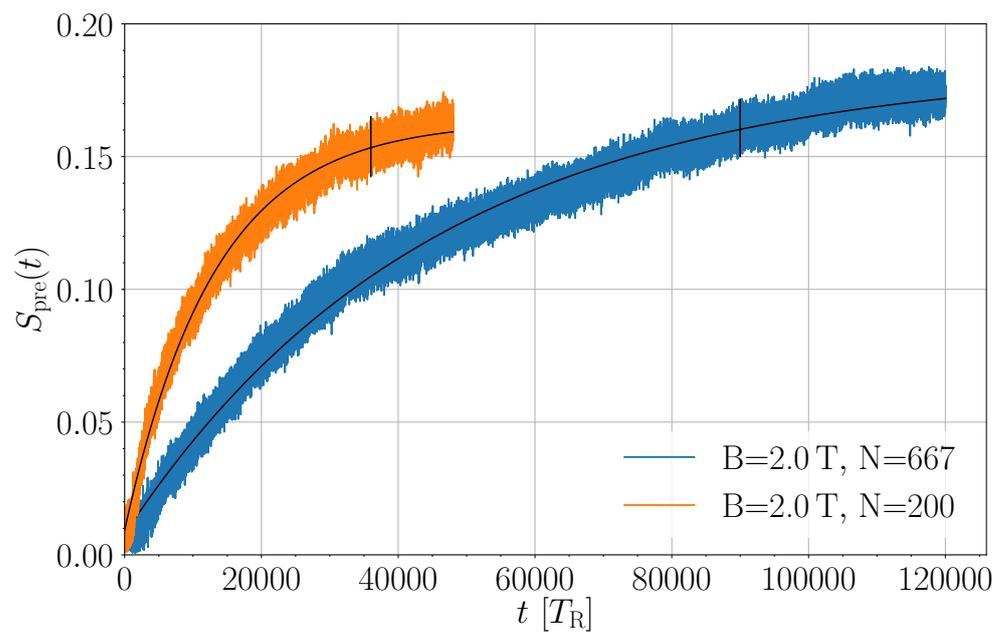


## 6 Analyse der Pre-Puls-Amplituden

### 6.1 Bestimmung der Sättigungswerte und Fehler

#### 6.1.1 Definition

Die Simulationsergebnisse für die Zeitentwicklung der in Gleichung (4.4) definierten Pre-Puls-Amplitude zeigen auf, dass diese sich je nach Wahl der physikalischen Parametern unterschiedlich entwickeln. Eine Illustration hierzu ist in Abbildung



**Abbildung 6.1:** Pre-Puls-Amplitude  $S_{\text{pre}}$  in Abhängigkeit von der Zeit  $t = n_{\text{p}} T_{\text{R}}$  für verschiedene Badgrößen  $N$  bei einem externen Feld von  $B_{\text{ext}} = 2,0 \text{ T}$  und einer Dephasierungszeit  $T_2^* = \sqrt{2} \text{ ns}$ . Die schwarzen Linien durch die generierten Daten beschreiben die Ausgleichskurve; die vertikalen schwarzen Linien die Schwelle, ab der die Daten zum Berechnen des Rauschfehlers  $\Delta S_{\text{fit}}$  herangezogen werden.

6.1 gegeben. Exemplarisch wird der Einfluss der Badgröße  $N$  auf den zeitlichen Anstieg der Pre-Puls-Amplitude untersucht: Je Größer das Bad, desto langsamer läuft dieser Anstieg ab. Beobachtet wurde dies auch schon in Artikel [39] und ist auf die schwächere Kopplung der einzelnen Spins an den Zentralspin zurückzuführen. Desweiteren ist zu beobachten, dass mit zunehmender Zeit die Pre-Puls-Amplitude gegen einen Sättigungswert strebt. Aus den generierten Daten ist dieser jedoch nicht unmittelbar bestimmbar. Zum einen kann dies auf das Rauschen zurückgeführt werden, welches aufgrund der Mittelung über  $N_C$  Konfigurationen entsteht. Zum anderen ist zu beachten, dass bei großen Bädern und großen externen Magnetfeldern sehr lange gepulst werden muss, bis die Pre-Puls-Amplitude in einen Sättigungswert läuft [39]. Um auch für diese Fälle einen solchen Wert bestimmen zu können, wird durch die generierten Daten die Ausgleichsfunktion

$$S_{\text{fit}}(t) = S_{\text{amp}} \cdot (1 - e^{-\lambda t}) + S_0 \quad (6.1)$$

gelegt, aus der dieser schließlich für den Langzeitlimes

$$S_{\text{lim}} = \lim_{t \rightarrow \infty} [S_{\text{fit}}(t)] = S_{\text{amp}} + S_0 \quad (6.2)$$

bestimmt werden kann. Für die in Abbildung 6.1 zeigt sich, dass die Ausgleichskurven gut zu den generierten Daten passen. Um das Rauschen in weiteren Rechnungen zu berücksichtigen, wird der Fehler  $\Delta S_{\text{fit}}$  eingeführt. Er wird hier definiert als die Standardabweichung der generierten Datenpunkte  $S(t)$  von der Ausgleichsfunktion  $S_{\text{fit}}(t)$ , also als

$$\Delta S_{\text{fit}} := \frac{1}{\sqrt{n_+ - n_-}} \cdot \sqrt{\sum_{j=n_-}^{n_+} [S(t_j) - S_{\text{fit}}(t_j)]^2}, \quad (6.3)$$

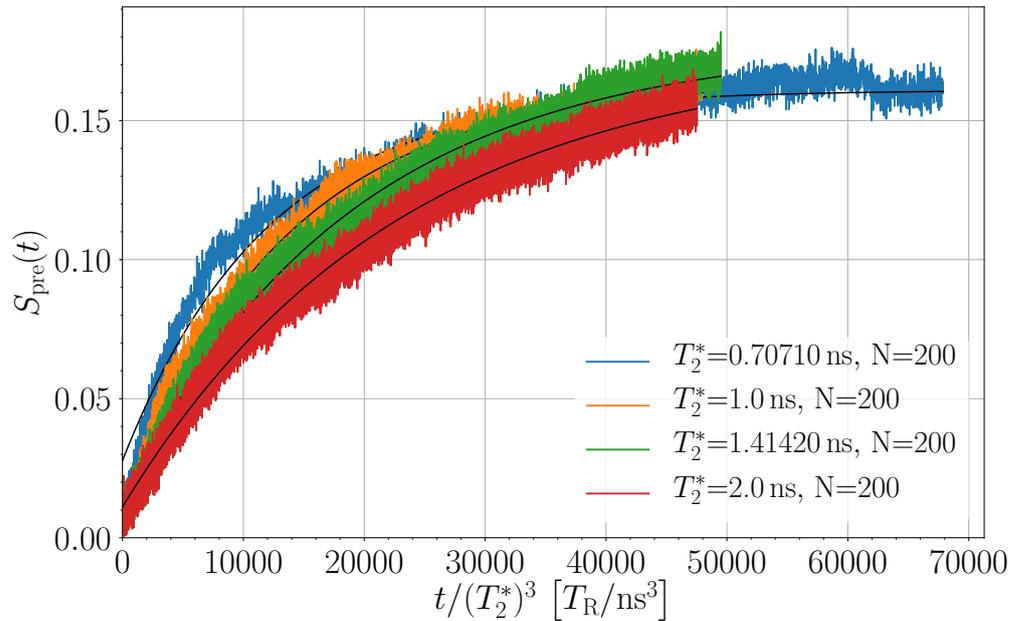
wobei  $n_-$  beziehungsweise  $n_+$  die niedrigste beziehungsweise größte Pulszahl angibt, die in die Berechnung der Standardabweichung mit einfließt. In Abbildung 6.1 ist  $n_-$  mit einer vertikalen schwarzen Linie gekennzeichnet, während  $n_+$  dem letzten Datenpunkt entspricht.

Begründen lässt sich die Auswahl der Datenpunkte damit, dass in weiteren Betrachtungen lediglich der Sättigungswert verwendet wird und somit nur das Rauschen um diesen von Interesse für den Fehler ist; der Anstieg auf den Sättigungswert beziehungsweise die hier auftretenden Rauschfehler allerdings nicht. Für die folgenden Rechnungen wird  $n_- = 0,75 \cdot n_+$  gewählt. Gleichzeitig fließt in  $\Delta S_{\text{fit}}$  auch die Genauigkeit des Fits ein: Weicht die Ausgleichskurve stark von den Datenpunkten  $S(t)$  ab, so wird auch der Fehler größer. Entsprechend fließt in den Wert  $\Delta S_{\text{fit}}$  sowohl die Stärke des Rauschens, als auch die Genauigkeit des Fits ein.

### 6.1.2 Einfluss physikalischer Parameter

Für eine Abschätzung, wie viele Pulse simuliert werden müssen, bis sich ein Sättigungswert der Pre-Puls-Amplituden  $S_{\text{pre}}$  einstellt, wird die Abhängigkeit dieser von den Parametern untersucht, die einen Einfluss auf das physikalische System haben. In Artikel [39] wurde eine lineare Abhängigkeit der Pulszahl  $n_p$  zur Badgröße  $N$  sowie eine quadratische Abhängigkeit zum externen Magnetfeld  $B_{\text{ext}}$  festgestellt, sodass die Pre-Puls-Amplitude in einen Sättigungswert übergeht. Dies geschah allerdings für eine andere Kopplungskonstantenverteilung. Der Einfluss dieser Größen soll nun ebenfalls für das Box-Modell untersucht werden, damit sich herausstellt, ob diese Skalierungsgesetze unabhängig von der genauen Parametrisierung der Kopplungskonstanten sind.

Neben diesen Abhängigkeiten legen die Bewegungsgleichungen (3.3a) und (??) nahe, dass auch die Dephasierungszeit  $T_2^*$  einen Einfluss auf den Kurvenverlauf von  $S_{\text{pre}}(t)$  hat, da diese nach Gleichung (3.17) einen Einfluss auf die Kopplungskonstante  $J$  und nach Gleichung (3.20c) auf die Varianz des Overhauserfeldes  $\text{Var}[B_{\text{Ov}}^\alpha]$  hat. Für den



**Abbildung 6.2:** Vergleich verschiedener Kurven  $S_{\text{pre}}$  mit unterschiedlichen Dephasierungszeiten  $T_2^*$ , wobei die Zeitachse kubisch mit diesen skaliert wird. Die physikalischen Parameter wurden auf  $N = 200$  und  $B_{\text{ext}} = 2,0 \text{ T}$  gesetzt, weiterhin besteht das Bad aus einer Kernsorte mit  $z^{-1} = 800$ .

Fall der Dephasierungszeit kann in etwa eine kubische Abhängigkeit der Pulszahl

zu  $T_2^*$  festgestellt werden, bis die Pre-Puls-Amplitude einen Sättigungswert erreicht hat. Graphisch ist dies in Abbildung 6.2 zu sehen, in der die Zeitachse kubisch mit den jeweiligen Dephasierungszeiten  $T_2^*$  skaliert wird. Es lässt sich erahnen, dass die skalierten Kurven in etwa bei der gleichen skalierten Zeit  $t/(T_2^*)^3$  in Sättigung übergehen, was ein Indiez für die Korrektheit dieser Skalierung ist.

Ein Argument für dieses Verhalten ist, dass die Kopplungskonstante  $J$  einen quadratischen Einfluss auf das Erreichen des Sättigungswerts hat, was auch gut mit dem Skalierungsverhalten der Badgröße  $N$  begründet werden kann. Da  $J \propto (T_2^*)^{-1}$  ist, ergibt sich hier zunächst ein Skalierungsverhalten von  $(T_2^*)^{-2}$ . Weiterhin beeinflusst die Dephasierungszeit nach Gleichung (3.20c) die Varianz der Overhauserfeldverteilung und entsprechend auch ihre Breite  $\sigma_{\text{Ov}} = \sqrt{\text{Var}[B_{\text{Ov}}]} \propto (T_2^*)^{-1}$ . Unter der Annahme, dass die Breite einen linearen Einfluss auf die maximale Pulszahl hat, wird unter Zusammenführung beider Effekte die kubische Skalierung mit  $T_2^*$  begründet. Eine quantitative Analyse wird mittels der Parameter durchgeführt, die die Ausgleichsrechnung (6.1) liefert. Von Relevanz ist hier der Parameter  $\lambda$ , da dieser den Anstieg der Pre-Puls-Amplitude beschreibt. Zur Überprüfung der Skalierung, die die graphische Betrachtung nahelegt, wird der Parameter

$$\bar{\lambda} = \lambda \cdot \varphi(x_{\text{skal}}) \approx \text{const} \quad (6.4)$$

eingeführt, wobei  $\varphi(x_{\text{skal}})$  der Skalierungsfunktion in Abhängigkeit vom zu skalierenden Parameter  $x_{\text{skal}}$  entspricht. Für den hier vorliegenden Fall ist  $x_{\text{skal}} = T_2^*$  und  $\varphi(T_2^*) = (T_2^*)^{-3}$ . In Tabelle A.1 sind diese Parameter aufgeführt. Es fällt auf, dass trotz der durchgeführten Skalierung die Werte von  $\bar{\lambda}$  stark voneinander abweichen, sodass nicht von einer Konstanz gesprochen werden kann. Entsprechend muss zum Erreichen eines besseren Skalierungsverhaltens eine weitere Anpassung durchgeführt werden, die zum Beispiel über die Erhöhung des Exponenten

$$\bar{\lambda}_{\text{B}} = \lambda \cdot (T_2^*)^{-(3+c)}, \quad 0 < c < 1 \quad (6.5)$$

erfolgen kann. Die Einschränkungen für  $c$  ergeben sich dadurch, dass eine Skalierung mit  $(T_2^*)^{-4}$  ebenfalls durchgeführt wurde; hier wurde der Betrag des Exponenten jedoch zu groß gewählt. Eine weitere Anpassung stellt die Mitnahme höherer Ordnungsbeiträge

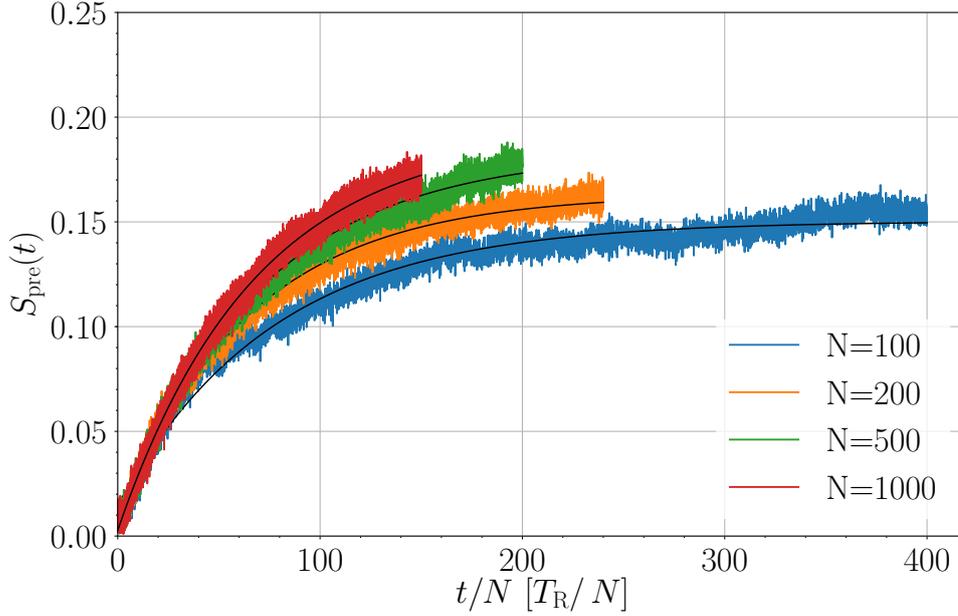
$$\bar{\lambda} = \lambda \cdot \left( (T_2^*)^{-3} + \underbrace{\sum_{i=1}^Z c_i \cdot (T_2^*)^{-(3+i)}}_{=:g(T_2^*)} \right), \quad g(T_2^*) > 0 \quad (6.6)$$

dar, wobei  $Z + 3$  der maximalen Ordnung entspricht, auf die die Skalierung erweitert wird.

Da es jedoch hauptsächlich nur um eine grobe Abschätzung zur Festsetzung der

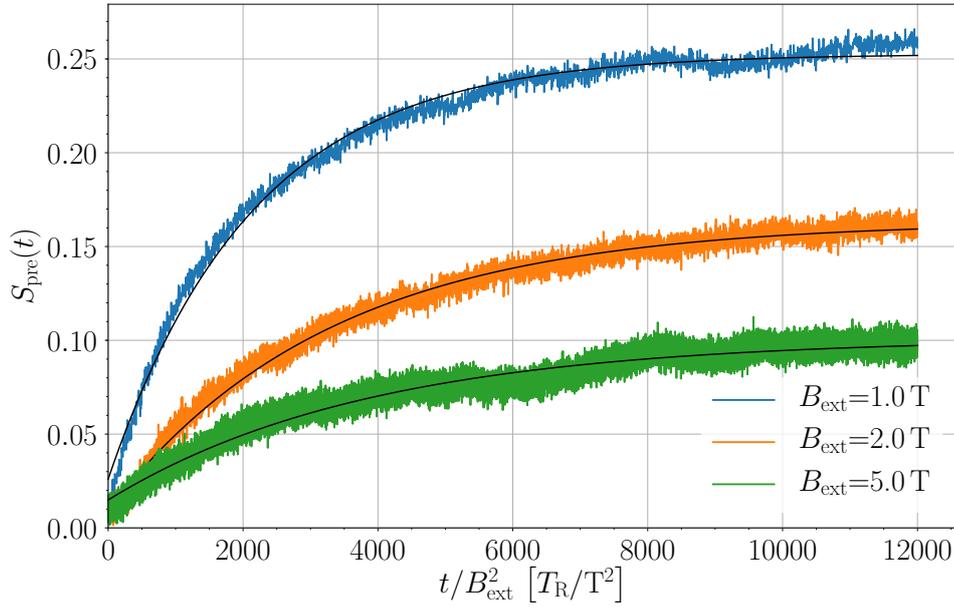
Pulszahl  $n_p$  geht, sodass sich die Pre-Puls-Amplitude in Sättigung befindet, ist das genaue Skalierungsverhalten nicht von weiterer Relevanz. Um diese Effekte jedoch in weiteren Rechnungen zu berücksichtigen, sollte die Abschätzung der Pulszahl konservativ erfolgen.

Im Folgenden werden ebenfalls noch die Skalierungen für  $x_{\text{skal}} = N$  und  $x_{\text{skal}} = B_{\text{ext}}$



**Abbildung 6.3:** Vergleich der  $S_{\text{pre}}(t)$  Kurven für verschiedene Badgrößen  $N$ , die linear mit dieser skaliert werden. Die Parameter wurden auf  $T_2^* = \sqrt{2}$  ns und  $B_{\text{ext}} = 2,0$  T festgesetzt.

untersucht. Graphisch sind diese in Abbildung 6.3 und 6.4 zu sehen. Die jeweiligen Skalierungsfunktionen sind durch  $\varphi(N) = N^{-1}$  und  $\varphi(B_{\text{ext}}) = (B_{\text{ext}})^{-2}$  gegeben. Bei Betrachtung der Abbildungen fällt auf, dass die gewählten Skalierungsfunktionen auch dazu führen, dass die Pre-Puls-Amplituden in etwa bei den gleichen skalierten Zeiten  $t \cdot \varphi(x_{\text{skal}})$  in Sättigung übergehen. Analog zur quantitativen Analyse der Skalierung mit der Dephasierungszeit werden diese ebenfalls für die Badgröße und das externe Magnetfeld durchgeführt. In den Tabellen A.2 und A.3 sind der Parameter  $\lambda$  der Ausgleichsrechnung (6.1) sowie der skalierte Parameter  $\bar{\lambda}$  nach Gleichung (6.4) aufgeführt. Es wird festgestellt, dass die Skalierung mit der Badgröße  $\varphi(N)$  zu nur geringen Schwankungen von  $\bar{\lambda}$  führt, weshalb diese als hinreichend genau angesehen werden kann. Bei der Skalierung mit der externen Magnetfeldstärke  $\varphi(B_{\text{ext}})$  fällt auf, dass hier die Parameter  $\bar{\lambda}$  deutlich voneinander abweichen, ähnlich wie bei der



**Abbildung 6.4:** Vergleich der  $S_{\text{pre}}(t)$  Kurven für unterschiedliche externe Magnetfelder  $B_{\text{ext}}$ , die quadratisch mit diesem skaliert werden. Die Parameter wurden auf  $T_2^* = \sqrt{2}$  ns und  $N = 200$  festgesetzt.

Skalierung mit  $\varphi(T_2^*)$ . Entsprechend sollten hier zur exakten Skalierung Korrekturen in Betracht gezogen werden, entweder über eine Abänderung des Exponenten oder aber über die Mitnahme höherer Ordnungsbeiträge, analog zu den Gleichungen (6.5) oder (6.6). Allerdings ist zu erwähnen, dass eine Betrachtung von weiteren Feldstärken für eine eindeutigere Aussage erforderlich ist. Insbesondere bei geringen Feldstärken können Abweichungen von Skalierungsgesetzen auftauchen, da hier die Fluktuation des Overhauserfeldes einen stärkeren Einfluss hat, wie auch schon in Kapitel [39] gezeigt wurde.

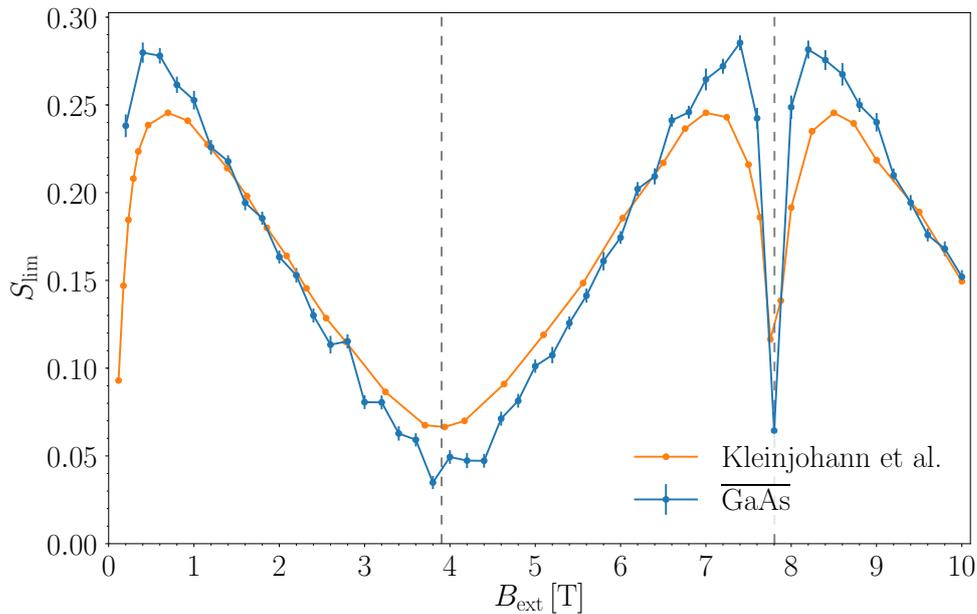
Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die Skalierung insbesondere dann gut funktioniert, wenn kein Einfluss auf das resultierende Gesamtfeld  $\vec{B}_{\text{res}} = \vec{B}_{\text{Ov}} + \vec{B}_{\text{ext}}$  festzustellen ist. Hier ist dies lediglich der Fall für die Badgröße  $N$ . Werden die Parameter verändert, die auch einen Einfluss auf  $\vec{B}_{\text{res}}$  ausüben, so kann die Skalierung grob abgeschätzt werden, für eine genauere Skalierung müssen aber Korrekturen in Betracht gezogen werden. Ein Vergleich der hier gezeigten Skalierungsgesetze für  $N$  und  $B_{\text{ext}}$  mit Artikel [39] liefert außerdem die Erkenntnis, dass die genaue Parametrisierung der Kopplung keinen starken Einfluss hat und  $n_p$  universell abgeschätzt werden kann, bis die Pre-Puls-Amplitude in Sättigung läuft.

## 6.2 System mit einem Isotop

### 6.2.1 Untersuchung der Pre-Puls-Amplituden

Die im vorherigen Kapitel erläuterte Methode zur Bestimmung des Sättigungswerts der Pre-Puls-Amplitude  $S_{\text{lim}}$  soll nun dazu verwendet werden, um dessen Abhängigkeit vom externen Magnetfeld  $B_{\text{ext}}$  zu untersuchen.

Zur hier angewendeten Methodik ist zu erwähnen, dass als Referenzwert bei einem externen Feld von  $B_{\text{ext}} = 1,0 \text{ T}$  die Pulszahl auf  $n_p = 12\,000$  festgesetzt wurde, da hier die Pre-Puls-Amplitude ihren Sättigungswert erreicht hat. Gemäß den Ergebnissen aus Kapitel 6.1.2 wird diese Pulszahl für jedes Magnetfeld quadratisch skaliert, sodass sich Pre-Puls-Amplitude für alle untersuchten Feldstärken ungefähr in Sättigung befindet. Mittels der Ausgleichsfunktion (6.1) werden die Daten anschließend gefittet und anschließend über (6.2) und (6.3) der Sättigungswert und der dazu gehörige Fehler (6.3) berechnet.



**Abbildung 6.5:** Sättigungswerte  $S_{\text{lim}}$  der Pre-Puls-Amplituden in Abhängigkeit des externen Magnetfelds  $B_{\text{ext}}$ , einmal für das Box-Modell mit  $N = 200$  Badspins und einer Dephasierungszeit von  $T_2^* = 1,0 \text{ ns}$  und einmal für eine Kopplungskonstantenverteilung gemäß Kapitel 3.2.3 mit der Einstellung  $\gamma = 0,01$  [17, 39].

Die Ergebnisse sind in Abbildung 6.5 durch die blauen Datenpunkte dargestellt. Dabei wurden die Parameter so gewählt, dass die Rechnung konsistent mit der aus Artikel [17] ist. Die aus dieser Rechnung resultierenden Ergebnisse werden mittels der orangenen Datenpunkte ebenfalls in die Graphik aufgenommen, um einen besseren Vergleich zu ermöglichen.

Dieser zeigt auf, dass beide Kurven qualitativ den gleichen Verlauf aufweisen, die orangene Kurve jedoch deutlich glatter ist als die blaue Kurve. Dies kann einerseits darauf zurückgeführt werden, dass für diese Rechnung ein größeres Differentialgleichungssystem gelöst werden muss und entsprechend mehr Zufallszählensätze gezogen werden. Die anschließenden Berechnung des Overhauserfeldes können so Schwankungen in den Zufallszahlen besser ausgeglichen werden. Die genaue mathematische Vorgehensweise ist in den Artikeln [17, 30] dargestellt. Im Vergleich dazu werden beim einfachen Box-Modell nur drei Zufallszählensätze gezogen, für jede Raumdimension einer. Entsprechend fallen hier Schwankungen in den Zufallszahlen stärker ins Gewicht.

Andererseits ist die Berechnung des Sättigungswerts schwankungsanfällig, wenn die Pre-Puls-Amplitude  $S_{\text{pre}}(t)$  nicht bis in Sättigung simuliert, sondern nur den Anstieg der Pre-Puls-Amplitude darstellt (zur graphischen Illustration siehe zum Beispiel Abbildung 6.1). Da der Sättigungswert  $S_{\text{lim}}$  über die Ausgleichsrechnung bestimmt wird, kommt es hierdurch zu stärkeren Schwankungen. Vergleichsrechnungen, in denen doppelt so lange simuliert wurde, haben gezeigt, dass der Kurvenverlauf deutlich glatter und somit eine längere Simulation anzustreben ist. Dem gegenüber steht, dass dies ein mehr an Rechenaufwand bedeutet. Über die Fehlerbalken kann jedoch nicht die ganze Schwankung auf Rausch- und Fitfehler zurückgeführt werden, weshalb eine längere Simulation von etwa 20 – 30 percent anzustreben ist, um eine hinreichend glatte Kurve unter Berücksichtigung von  $\Delta S_{\text{fit}}$  zu erhalten.

### 6.2.2 Resonanzen

Bei Betrachtung beider Sättigungswert-Kurven in Abbildung 6.5 fällt auf, dass diese zunächst bei  $B_{\text{ext}} \approx 0,4 - 0,6 \text{ T}$  ein Maximum durchlaufen, bis sie sich bei  $B \approx 3,8 - 4,0 \text{ T}$  in einem Minimum befinden. Anschließend findet wieder ein Anstieg statt, bis bei  $B \approx 7,8 \text{ T}$  ein zweites Minimum zu beobachten ist. Dieses ist sehr stark und scharf ausgeprägt, während hingegen das erste Minimum wesentlich breiter ist. Die Position der Minima kann über

$$B_{\text{min}}^n = n \cdot \frac{\pi \hbar}{T_{\text{R}} z g_{\text{e}} \mu_{\text{B}}}, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (6.7)$$

berechnet werden [17]. Diese sind durch die grau gestrichelten Linien in Abbildung 6.5 dargestellt. Mit den in der Simulation verwendeten Werten von  $g_{\text{e}} = 0,555$  und

$z^{-1} = 800$ , was in etwa dem gemittelten Wert von GaAs entspricht, ergibt sich hier  $B_{\min}^n \approx n \cdot 3,90 \text{ T}$ .

Es zeigt sich, dass die Minima der simulierten Kurven in beiden Fällen sehr gut mit den theoretisch berechneten Werten übereinstimmen. Die physikalische Erklärung zur Ausbildung der Minima an den berechneten Stellen ist Folgende: Aufgrund des nuklearen Zeemann-Effekts koppeln die Badspins ans externe Magnetfeld. Die in Bedingung (6.7) dargestellten Felder entsprechen gerade dem Fall, dass innerhalb der Zeit zwischen zwei Pulsen  $T_R$  die Badspins Vielfache einer halbzahligen Anzahl an Präzessionen durchführen<sup>1</sup>. Warum gerade dies zur Ausbildung von Minima führt, ist bis zum jetzigen Zeitpunkt unklar. Allerdings kann dieser Effekt auf die Wahl des Pulsmodells zurückgeführt werden. Simulationen, in denen für das Pulsmodell (4.1) die Werte  $X = Y = 0$  gesetzt werden zeigen auf, dass hier die Pre-Puls-Amplitude nach einer hinreichenden Anzahl an Pulsen unabhängig von  $B_{\text{ext}}$  den Sättigungswert  $S_{\text{lim}} = 0,5$  annimmt und die Dephasierung komplett unterdrückt wird [17, 39]. Entsprechend sind quantenmechanische Effekte für Magnetfeldabhängigkeit von  $S_{\text{lim}}$  verantwortlich, die durch  $X \neq Y \neq 0$  ins Pulsmodell eingebaut wurden<sup>2</sup>.

Insgesamt lässt sich schlussfolgern, dass die Verwendung des Box-Modells ihre Berechtigung hat, da die Ergebnisse aus dieser Rechnung bis auf Unterschiede in der Amplitude ähnliche Ergebnisse liefert. Dies gilt insbesondere im Hinblick auf die Ausprägung der Maxima und Minima in Abhängigkeit vom externen Magnetfeld. Für diese Effekte ist nach Gleichung (6.7) die genaue Parametrisierung der Kopplungskonstanten nicht von Relevanz. Auf dieser Ergebnisgrundlage können somit Erweiterungen im Box-Modell durchgeführt werden, die Quantenpunkte realistischer beschreiben, aber numerisch im Hinblick auf die Rechenzeit immer noch handhabbar sind.

## 6.3 System mit mehreren Isotopen

Eine Möglichkeit der Erweiterung des Modells, die der Beschreibung von Quantenpunkten näher kommt, ist das Betrachten der einzelnen Isotope. Hierfür wird das Modell in der Theorie so erweitert, dass die einzelnen Kopplungskonstanten  $J_i$ , nuklearen Landéfactoren  $z_i g_e$  sowie die jeweiligen Spinlängen  $S_i$  in den für die Dynamik relevanten Gleichungen (3.19) und (3.20c) berücksichtigt werden. Von besonderem Interesse sind hier die nuklearen Landéfactoren, da diese ausschlaggebend

<sup>1</sup>Das vom Zentralspin ausgehende effektive Feld wird hier vernachlässigt.

<sup>2</sup>In Artikel [17] werden dazu auch quantenmechanische Rechnungen durchgeführt, die zeigen, dass das Frequency-Focusing einen Einfluss auf die Ausbildung von Maxima und Minima in den Sättigungswerten hat. Jedoch erklären diese Rechnungen nicht die Ausbildung der Minima im hier verwendeten klassischen Modell.

**Tabelle 6.1:** Gegebene nukleare Landéfactoren für die in diesem Kapitel verwendeten Isotope sowie die daraus resultierenden Minima für einen elektronischen Landéfaktor von  $g_e = 0,555$  [34].

| Isotop $i$             | $z_i^{-1}$ | $B_{\min}^n$             | $S_i$ | $A^i$                |
|------------------------|------------|--------------------------|-------|----------------------|
| $\overline{\text{Ga}}$ | 684,4      | $n \cdot 3,33 \text{ T}$ | 3/2   | 82,8 $\mu\text{eV}$  |
| Ga-69                  | 758,7      | $n \cdot 3,69 \text{ T}$ | 3/2   | 74,0 $\mu\text{eV}$  |
| Ga-71                  | 596,4      | $n \cdot 2,90 \text{ T}$ | 3/2   | 96,0 $\mu\text{eV}$  |
| As-75                  | 1060,6     | $n \cdot 5,16 \text{ T}$ | 3/2   | 86,0 $\mu\text{eV}$  |
| $\overline{\text{In}}$ | 826,9      | $n \cdot 4,02 \text{ T}$ | 9/2   | 110,0 $\mu\text{eV}$ |

für die Position der Minima der Sättigungswerte der Pre-Puls-Amplituden sind. In Tabelle 6.1 sind diese aufgelistet, ebenso wie die externen Magnetfelder  $B_{\min}^n$ , bei denen ein solches Minimum zu erwarten ist.

Die Vorgehensweise zur Simulation der Quantenpunkte in dieser Arbeit ist dabei folgende: In einer ersten Stufe wird ein GaAs-Quantenpunkt betrachtet, bei dem über beide Galliumisotope gemittelt und der zugehörige Landéfaktor gemäß

$$z_{\overline{\text{Ga}}} = k_{\text{Ga-69}} z_{\text{Ga-69}} + k_{\text{Ga-71}} z_{\text{Ga-71}} \quad (6.8)$$

berechnet wird. Dabei entspricht  $k_i$  den relativen natürlichen Häufigkeiten der jeweiligen Galliumisotope. Das Verhältnis von Gallium zu Arsen ist dabei durch 1:1 gegeben.

In einem zweiten Schritt wird erneut ein GaAs-Quantenpunkt betrachtet, wobei hier eine Zusammensetzung aus beiden Gallium-Isotopen gemäß ihrer natürlichen Häufigkeiten und Arsen betrachtet wird. Dies ist die realistischste Simulation eines reinen GaAs-Quantenpunkts vor dem Hintergrund, dass das Box-Modell Anwendung findet. In einem letzten Schritt wird das Modell so erweitert, dass  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -Quantenpunkte betrachtet werden können. Dies stellt auch im Vergleich zu experimentellen Daten, wie sie in Abbildung 1.1 dargestellt sind, die realistischste Variante der Simulation dar. Bei der Modellbildung ist zu erwähnen, dass auch hier über die beiden Indiumisotope In-113 und In-115 gemittelt wird, sodass ebenfalls ein gemittelter Landéfaktor

$$z_{\overline{\text{In}}} = k_{\text{In-113}} z_{\text{In-113}} + k_{\text{In-115}} z_{\text{In-115}} \quad (6.9)$$

in den Berechnungen verwendet wird. Im Vergleich zu den beiden Galliumisotopen gilt allerdings  $z_{\text{In-113}} \approx z_{\text{In-115}} \approx z_{\overline{\text{In}}}$ , sodass bei der hier betrachteten Diskretisierung von  $\Delta B_{\text{ext}} = 0,2 \text{ T}$  kein Unterschied bei den Positionen (6.7) der Minima beobachtet werden kann. Desweiteren weisen auch die Kopplungskonstanten

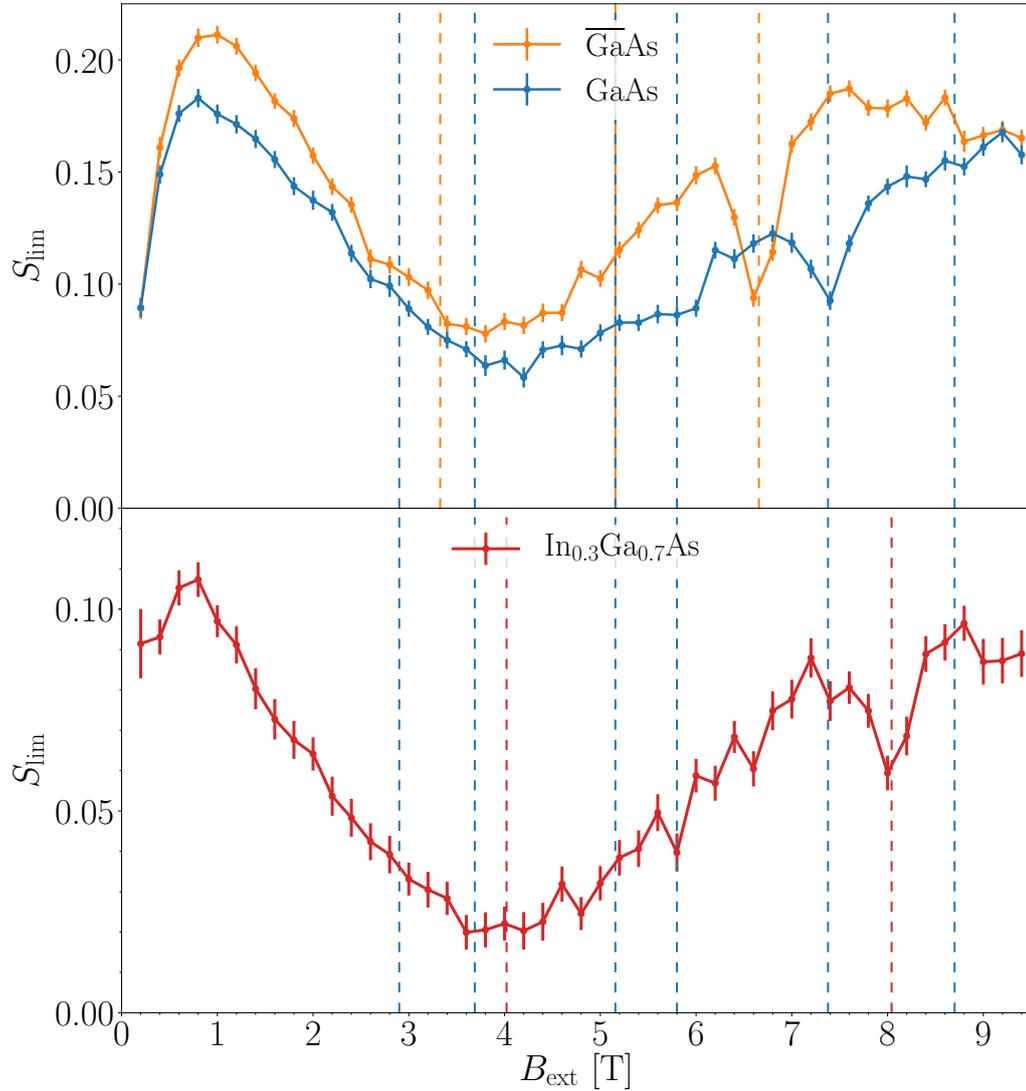
$J_{\text{In-113}} \approx J_{\text{In-115}} \approx J_{\overline{\text{In}}}$  in etwa den gleichen Wert auf, was zu einer nahezu gleichen Dynamik beider Isotope nach den Bewegungsgleichungen (3.3a) und (3.19) führt und die Betrachtung eines gemittelten Indium-Isotops  $\overline{\text{In}}$  rechtfertigt.

Die jeweiligen Sättigungswerte  $S_{\text{lim}}$  der Pre-Puls-Amplituden sind für die verschiedenen Fälle in Abbildung 6.6 dargestellt. Im oberen Teil der Abbildung werden die Kurven für  $\overline{\text{GaAs}}$  und  $\text{GaAs}$  gezeigt, während im unteren Teil exemplarisch eine Kurve für  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  mit  $x = 0,3$  zu sehen ist. Zu beachten ist, dass die Kurven für unterschiedliche Dephasierungszeiten  $T_2^*$  berechnet wurden, weshalb sie in ihren Absolutwerten nicht miteinander vergleichbar sind. Lediglich die Position ihrer Minima hängt nach Gleichung (6.7) nicht von diesen Zeiten ab. Die Betrachtung von Abbildung 6.7 legt allerdings nahe, dass die Absolutwerte der  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -Kurve grundsätzlich, das heißt unter Vernachlässigung der Betrachtung der Minima, niedriger sind als die der  $\text{GaAs}$ -Kurven. Selbst eine kleine Beimischung von  $\overline{\text{In}}$  führt schon zu einem deutlich niedrigeren Wert für  $S_{\text{lim}}$ .

Hierfür gibt es auch eine physikalische Begründung: Da durch die Berücksichtigung mehrerer Isotope die Bedingungen für die Position der Minima - und entsprechend auch für die Ausbildung von möglichen Maxima - nur für einen Teil der betrachteten Badspins gilt, beeinflussen sich die verschiedenen Isotope je nach extern angelegtem Feld  $B_{\text{ext}}$  teilweise destruktiv. Dies führt dazu, dass die Pre-Puls-Amplitude einen niedrigeren Sättigungswert einnimmt. Je mehr Isotope mit unterschiedlichen nuklearen Landéfaktoren sich im Bad befinden, desto geringer ist der Wert  $S_{\text{lim}}$ . Im oberen Teil von Abbildung 6.6 ist dies sehr gut zu beobachten. Die orangene Kurve, bei der bloß ein gemitteltes Galliumisotop berücksichtigt wird, weist immer höhere Sättigungswerte  $S_{\text{lim}}$  auf als die blaue Kurve, bei der beide Galliumisotope in der Berechnung berücksichtigt werden. Lediglich dort, wo die orangene Kurve ein Minimum ausbildet, liegt die blaue Kurve über der Orangenen.

Auch bei Betrachtung der Minima in beiden Teilen der Abbildung kann eine ähnliche Argumentation angeführt werden: Es fällt auf, dass sich im Gegensatz zur  $\overline{\text{GaAs}}$ -Kurve in Abbildung 6.5 nicht bei allen theoretisch berechneten Minima, die durch die gestrichelten Linien gekennzeichnet sind, tatsächlich ein Minimum ausbildet. Insbesondere für Werte im Intervall  $B_{\text{ext}} \approx 3,0 - 6,0 \text{ T}$  liegt eher ein breites, tiefes Minimum vor. Dies ist auf Überlagerungseffekte der einzelnen Isotope zurückzuführen: Während eines der Isotope die Bedingung (6.7) erfüllt, ist dies für die anderen Isotope nicht der Fall, sodass zwischen den Positionen der theoretischen Minima in diesem Intervall kein Anstieg zu erwarten ist. Die Minima, die sich trotzdem ausprägen, was für die gezeigten Kurven im Intervall von  $B_{\text{ext}} \approx 6,0 - 8,0 \text{ T}$  der Fall ist, sind wesentlich weniger scharf und weniger stark ausgeprägt.

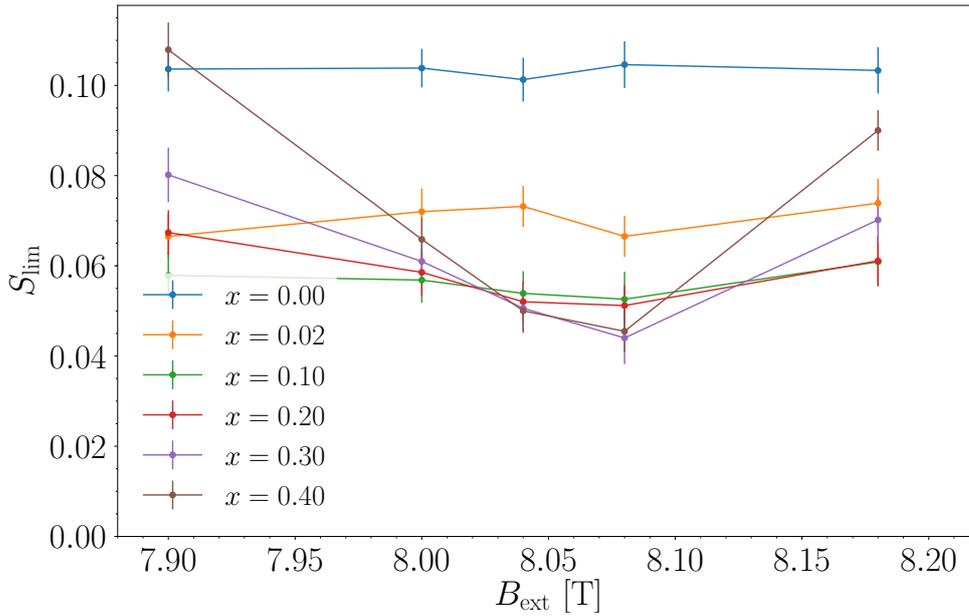
Dabei deutet die jeweilige Farbe der gestrichelten Linien an, für welche Kurve ein solches theoretisches Minimum zu erwarten ist. Zum unteren Teil der Abbildung ist anzumerken, dass die roten Linien lediglich die Position der theoretischen  $\overline{\text{In}}$ -Minima kennzeichnet, während die blauen Linien die Minima darstellen die sowohl in  $\text{GaAs}$ ,



**Abbildung 6.6:** Sättigungswerte  $S_{\text{lim}}$  der Pre-Puls-Amplituden für in diesem Kapitel aufgeführten Fälle. Im oberen Teil sind die Kurven für die GaAs-Varianten aufgeführt; es liegt eine Dephasierungszeit von  $T_2^* = \sqrt{2}$  ns vor. Im unteren Teil ist eine solche Kurve für einen  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  Quantenpunkt mit  $x = 0,3$  dargestellt, wobei hier  $T_2^* = 1$  ns beträgt. Weiterhin wurde  $g_e = 0,555$  gesetzt, das Bad besteht aus  $N = 100$  Spins. Die jeweiligen Minima nach Gleichung (6.7) sind durch die gestrichelten Linien in der Farbe gekennzeichnet, für dessen Kurven sie Gültigkeit haben, wobei die Minima für GaAs auch bei  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  zu erwarten sind.

als auch in  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  theoretisch zu erwarten sind.

Insbesondere das Minimum der  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -Kurve bei  $B_{\text{ext}} \approx 8,04\text{ T}$  ist für die weitere Analyse von Interesse: Da für die Ausprägung dieses Minimums die Indiumisotope verantwortlich sind, soll der genaue Einfluss der Indiumkonzentration  $x$  im Quantenpunkt auf die Tiefe und Schärfe dieses untersucht werden. In Abbildung 6.7



**Abbildung 6.7:** Feinere Diskretisierung um den theoretisch berechneten Wert des Minimums von  $B_{\text{min}} = 8,04\text{ T}$  für verschiedene Indiumkonzentrationen  $x$  im Quantenpunkt. Das Bad besteht aus  $N = 100$  Spins und die Dephasierungszeit wurde auf  $T_2^* = 1\text{ ns}$  gesetzt, sodass die Kurven mit der  $\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ -Kurve in Abbildung 6.6 vergleichbar sind. Für alle Felder wurde der Wert  $n_p^{\text{max}} = 360\,000$  gewählt.

ist deshalb eine schärfere Auflösung von Kurven mit verschiedenen Indiumkonzentrationen  $x$  um dieses Minimum dargestellt.

Zunächst einmal ist auffällig, dass die Position des eigentlichen Minimums leicht vom theoretischen Wert abweicht und für die meisten Kurven bei  $B_{\text{ext}} \approx 8,08\text{ T}$  liegt. Dies ist einerseits dadurch begründet, dass die Ausgleichsrechnung für die jeweiligen Kurven nach Gleichung (6.1) nah am Minimum fehleranfällig ist, da der Anstieg nach der Ausgleichsfunktion nur sehr schwach ausgeprägt ist. Weiterhin wird über eine endliche Anzahl an Konfigurationen  $N_C$  gemittelt, wodurch ein Einfluss der Zufallszahlen bemerkbar wird. Für die in Abbildung 6.7 gezeigten Kurven wurde

$N_C = 8000$  gesetzt, was ein vergleichsweise niedriger Wert ist und einen stärkeren Einfluss der einzelnen Konfigurationen auf das Gesamtergebnis mit sich bringt. Allerdings sind die Fehlerbalken im Bereich von  $B_{\text{ext}} = 8,00 - 8,08$  T größer als die Differenz der jeweiligen Werte, sodass keine eindeutige Aussage über die genaue Position des Minimums getroffen werden kann.

Andererseits gibt es auch ein physikalisches Argument für die Verschiebung: Da der Einfluss des Zentralspins zur Berechnung der theoretischen Werte für die Minima vernachlässigt wurde, wird die Systemdynamik in Gleichung (6.7) nicht komplett erfasst. Eigentlich müsste das vom Zentralspin herrührende Knight-Feld mit berücksichtigt werden. In Artikel [42] werden solche Verschiebungseffekte ebenfalls beobachtet und auf das vom Elektronenspin herrührende Feld zurückgeführt.

Weiterhin ist zu beobachten, dass sich der Tiefe Sättigungswert  $S_{\text{lim}}$  für das theoretisch berechnete Minimum bei  $B_{\text{ext}}^{\text{min}} = 8,04$  T schon ab einer Indiumkonzentration von  $x = 0,1$  nicht mehr wesentlich verändert. Im Gegensatz dazu prägt sich die Schärfe des Minimums mit zunehmenden Werten von  $x$  immer klarer aus, da für diesen Fall der Sättigungswert der Pre-Puls-Amplituden für Felder nahe dem Minimum, also bei  $B_{\text{ext}} = 7,90$  T und  $B_{\text{ext}} = 8,18$  T stark zunimmt.

Besonders erwähnenswert ist, dass selbst eine kleine Beimischung von Indium die Sättigungswerte stark beeinflusst, wie die Kurve für den Wert  $x = 0,02$  zeigt. Schließlich wird ein Minimalwert mit einer Konzentration von  $x = 0,1$  nahezu erreicht. Die Erklärung hierfür liefern die Bewegungsgleichungen (3.3a) und (3.19) sowie in der Definition des Overhauserfeldes (3.4). Da beide Indiumisotope eine Spinquantenzahl von  $S_{\text{In}} = 9/2$  aufweisen, dominieren sie sowohl Zusammensetzung des Overhauserfeldes  $\vec{B}_{\text{Ov}}$  als auch die Dynamik dieses. Im Hinblick auf die in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen zeigt sich, dass die Breite der Komponenten der Teilfelder, die als Wurzel der jeweiligen Varianzen (3.20c) aufgefasst werden können, in etwa proportional zur Spinlänge des betrachteten Isotops sind. Entsprechend dominieren die Indiumisotope bei der Zusammensetzung des Gesamtfeldes die Gallium- und Arsenisotope, die lediglich eine Spinlänge von  $S_{\text{GA/As}} = 3/2$  aufweisen. Somit ist es nicht verwunderlich, dass auch eine Beimischung von lediglich  $x \leq 10\%$  Indium wesentliche Veränderungen in den betrachteten Kurven mit sich führt.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die Isotope mit höheren Spinquantenzahlen die Dynamik des Systems dominieren. Dies hat entsprechend auch Auswirkungen auf den Verlauf Pre-Puls-Amplituden und die aus ihr resultierenden Sättigungswerte. Der Minimalsättigungswert ist entsprechend schon bei einer geringen Indiumkonzentration  $x \approx 0,1$  nahezu erreicht, lediglich die Werte um nahe um das Minimum verändern sich noch, indem hier  $S_{\text{lim}}$  durch eine Erhöhung der Indiumkonzentration wieder zunimmt.

## 6.4 Skalierung für große Bäder

Wie schon in Kapitel 6.1.2 gezeigt wird, variiert der Sättigungswert  $S_{\text{lim}}$  der Pre-Puls-Amplituden in Abhängigkeit von der gewählten Badgröße  $N$ , während hingegen nach den Ergebnissen aus Kapitel 6.2.2 die Position der Minima unabhängig von diesen ist. Auch in Artikel [17] konnten bei der klassischen Simulation solcher Kurven schon ähnliche Erkenntnisse gewonnen werden.

Von besonderem Interesse ist es, realistische Quantenpunkte mit einer Badgröße von  $N \simeq 10^4 - 10^6$  zu simulieren, da so ein Vergleich mit experimentellen Resultaten besser zu rechtfertigen ist. Es stellt sich allerdings heraus, dass die Rechenzeit der Programme insbesondere für hohe Magnetfelder  $B_{\text{ext}}$  und große Bäder  $N$  bis zum Erreichen eines Sättigungswertes  $S_{\text{lim}}$  zu groß ist. Dies begründet sich dadurch, dass für solche Simulation sehr viele Pulse in der Größenordnung von  $n_p \simeq 10^7 - 10^{10}$  benötigt werden, bis sich die Pre-Puls-Amplitude letztlich in Sättigung befindet. Aufgrund dessen soll im Folgenden das Skalierungsverhalten von  $S_{\text{lim}}$  so untersucht werden, dass eine Extrapolation realistischer Badgrößen möglich ist.

Eine naheliegende Möglichkeit, um das Skalierungsverhalten zu bestimmen, ist das Auftragen der Sättigungswerte gegen die reziproke Wurzel der Badgröße  $1/\sqrt{N}$ . Begründbar ist dies damit, dass die Badgröße über die Kopplungskonstante  $J \propto 1/\sqrt{N}$  die Bewegungsgleichung (3.19) und somit auch den Sättigungswert  $S_{\text{lim}}$  beeinflusst. Da allerdings auch die Dephasierungszeit einen Einfluss auf die Kopplungskonstante gemäß  $J \propto 1/T_2^*$  hat, wird in Abbildung 6.8 der Sättigungswert gegen  $1/(\sqrt{N} \cdot T_2^*)$  aufgetragen, was einer Auftragung gegen die Kopplungskonstante  $J$  ohne die Berücksichtigung von Vorfaktoren entspricht. Anschließend wird eine gewichtete, lineare Ausgleichsrechnung gemäß

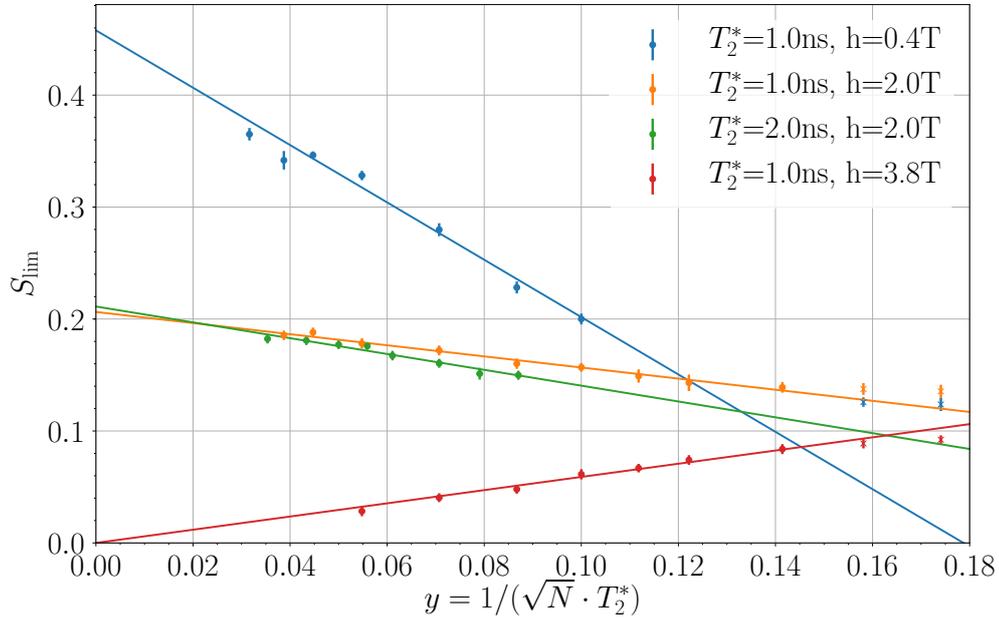
$$S_N(x) = \bar{S}_N \cdot x + \bar{S}_0 \quad (6.10)$$

durchgeführt, um anschließend den Sättigungswert der Pre-Puls-Amplitude für sehr große Bäder über

$$S_{\text{lim}}^\infty := \lim_{x \rightarrow 0} [S_N(x)] = \bar{S}_0 \quad (6.11)$$

zu bestimmen. Dies ist gerechtfertigt, da  $1/\sqrt{N} \simeq 10^{-3} - 10^{-2}$  für realistische Bäder entspricht und somit als sehr klein gegenüber den simulierten Badgrößen von einigen zehn bis hundert Spins betrachtet werden kann. Anzumerken ist, dass nach den Definitionen (3.10) und (4.4) die Werte für  $S_{\text{lim}}$  und entsprechend auch für  $S_{\text{lim}}^\infty$  nicht negativ werden können, weshalb bei der Ausgleichsrechnung die Restriktion  $\bar{S}_0 \geq 0$  eingeführt wurde.

Bei Betrachtung der Abbildung fällt auf, dass nahezu alle mit einem Kreis dargestellten Datenpunkte fast perfekt auf der Ausgleichsgeraden liegen und etwaige



**Abbildung 6.8:** Auftragung von Sättigungswerten  $S_{\text{lim}}$  der Pre-Puls-Amplitude für verschiedene Badgrößen  $N$ , externe Magnetfelder  $B_{\text{ext}}$  sowie Dephasierungszeiten  $T_2^*$ . Bei den jeweiligen Datensätzen, bei denen  $T_2^*$  und  $B_{\text{ext}}$  gleich sind, wurde eine lineare Ausgleichskurve gemäß Gleichung (6.10) durchgelegt.

Schwankungen minimal sind. Entsprechend können Abschätzungen für realistische Badgrößen getroffen werden, ohne dabei zu große Unsicherheiten in Kauf zu nehmen. Für die in Abbildung 6.8 aufgeführten Fälle ergeben sich

$$S_{\text{lim}}^{\infty}(B_{\text{ext}} = 0,4 \text{ T}, T_2^* = 1,0 \text{ ns}) = 0,458 \pm 0,005$$

$$S_{\text{lim}}^{\infty}(B_{\text{ext}} = 2,0 \text{ T}, T_2^* = 1,0 \text{ ns}) = 0,206 \pm 0,004$$

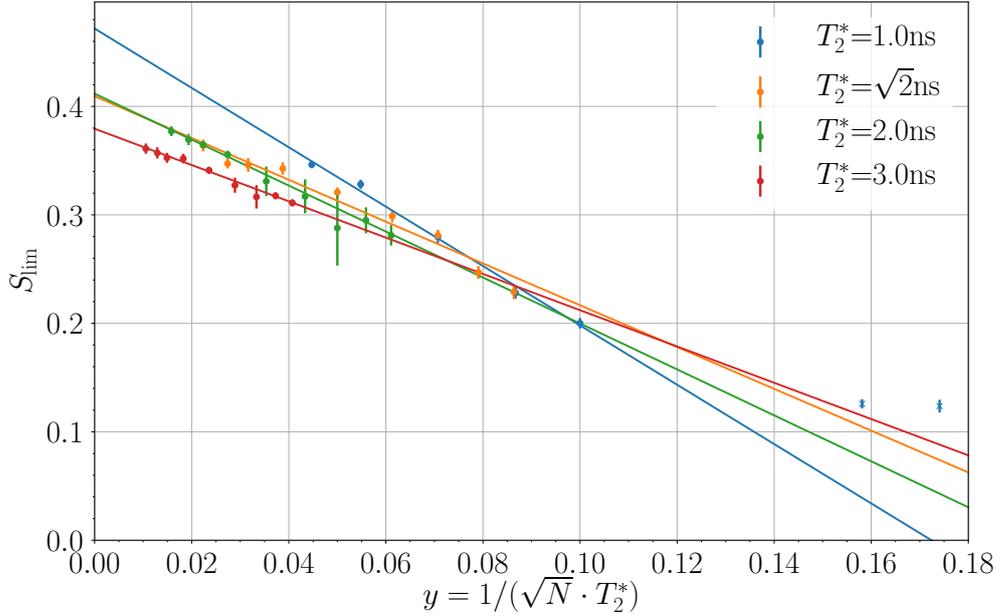
$$S_{\text{lim}}^{\infty}(B_{\text{ext}} = 2,0 \text{ T}, T_2^* = 2,0 \text{ ns}) = 0,211 \pm 0,005$$

$$S_{\text{lim}}^{\infty}(B_{\text{ext}} = 3,8 \text{ T}, T_2^* = 1,0 \text{ ns}) = 0,000 \pm 0,006$$

als finale Sättigungswerte. Da die relativen Fehler dieser Werte, die die Ausgleichsrechnung liefert, mit circa 1–3 % sehr gering ausfallen - die Datenpunkte also nahezu alle fast auf der Ausgleichsgeraden liegen - ist es im Hinblick auf flächendeckende Rechnungen sogar möglich, nur etwa drei bis vier Datenpunkte zu erzeugen und auf Grundlage dieser eine Extrapolation für sehr große Bäder vorzunehmen. Dies erspart Rechenzeit, die nach Kapitel 6.1.2 in etwa linear mit der Badgröße zunimmt, da mit höheren Werten für  $N$  auch mehr Pulse bis zum Erreichen der Sättigung simuliert werden müssen. Insbesondere für große Magnetfelder  $B_{\text{ext}}$ , bei denen die Simulation vieler Pulse notwendig ist damit die Pre-Puls-Amplitude in Sättigung

läuft, ist dies von großem Nutzen.

Die Betrachtung von  $S_{\text{lim}}^\infty$  bei einem externen Feld von  $B_{\text{ext}} = 2,0 \text{ T}$  zeigt, dass diese im Rahmen des Fehlers den gleichen Wert liefern. Dies legt den Schluss nahe, dass die Dephasierungszeit für hinreichend große Bäder keinen Einfluss auf den Sättigungswert  $S_{\text{lim}}^\infty$  hat. Um dies zu überprüfen, werden in Abbildung 6.9



**Abbildung 6.9:** Auftragung von Sättigungswerten  $S_{\text{lim}}$  der Pre-Puls-Amplitude für verschiedene Badgrößen  $N$  und Dephasierungszeiten  $T_2^*$  bei einem externen Magnetfeld von  $B_{\text{ext}} = 0,4 \text{ T}$ . Durch die Datenpunkte wird eine Gerade gelegt, die über eine lineare Ausgleichsrechnung nach (6.10) bestimmt wird.

die Sättigungswerte  $S_{\text{lim}}$  für verschiedene Badgrößen und Dephasierungszeiten bei einem externen Magnetfeld von  $B_{\text{ext}} = 0,4 \text{ T}$  gegen  $y$  aufgetragen und anschließend über eine lineare Ausgleichsrechnung nach Gleichung (6.10) gefittet. Es wird festgestellt, dass die jeweiligen Sättigungswerte  $S_{\text{lim}}^\infty$  lediglich für die Dephasierungszeiten  $T_2^* = \sqrt{2} \text{ ns}$  und  $T_2^* = 2 \text{ ns}$  in etwa übereinstimmen, während diese für die anderen beiden Kurven stark voneinander abweichen. Um jedoch eindeutige Aussagen darüber treffen zu können, ob die Dephasierungszeit  $T_2^*$  einen Einfluss auf  $S_{\text{lim}}^\infty$  hat, sind weitere Rechnungen erforderlich. Die starken Abweichungen hier können auch dadurch begründet werden, dass das externe Magnetfeld nicht hinreichend groß gegenüber der Breite der Overhauserfeldverteilung ist und somit einen zu starken Einfluss hat.

Weiterhin auffällig in Abbildung 6.8 ist, dass für große Werte  $y > 0,15 \text{ ns}^{-1}$  die

Linearität nicht mehr gegeben ist und die Datenpunkte vom Fit abweichen. Diese Punkte sind mit einem Kreuz anstatt eines Kreises gekennzeichnet. Begründet werden kann dies durch die Dominanz des Hyperfeinwechselwirkungsterms. Hier zeigt sich auch, dass die Auftragung gegen  $y = 1/(\sqrt{N} \cdot T_2^*)$  sinnvoll ist, da mit zunehmenden Werten auch stärkere Kopplungskonstanten einhergehen. Gezeigt werden kann diese Dominanz, indem im Folgenden eine grobe Abschätzung vorgenommen wird. Dazu wird der Hyperfeinwechselwirkungsterm ins Verhältnis zum nuklearen Zeemanterm gesetzt

$$\Delta_{\text{lim}} := \frac{J \vec{S}_0 \cdot \sum_j \vec{S}_j}{z h \sum_j S_j^\alpha}. \quad (6.12)$$

Anschließend werden die Komponenten  $S_j^\alpha =: S_j$  gleichgesetzt, was zu rechtfertigen ist, da alle Komponenten Zufallszahlen mit gleichem Erwartungswert und gleicher Varianz (3.9d) sind und über hinreichend viele Konfigurationen gemittelt wird. Weiterhin werden auch die Komponenten des Zentralspins auf  $S_0^\alpha = 1/2$  gesetzt. Streng genommen ist dies nicht korrekt, da diese nicht zufällig gezogen werden. Zur Abschätzung der Ergebnisse ist dieses Gleichsetzen allerdings hinreichend genau, insbesondere auch vor dem Hintergrund, dass der Zentralspin durch das Pulsen periodisch die Einstellung (4.1) annimmt. Ebenfalls wird für die Kopplungskonstante  $J = 1/(\sqrt{N} \cdot T_2^*) = y$  angenommen, indem  $\hbar = 1$  gesetzt wird. Somit ergibt sich zunächst

$$\Delta_{\text{lim}} \approx \frac{3 J S_0^\alpha \sum_j S_j^\alpha}{z h \sum_j S_j^\alpha} \quad (6.13a)$$

$$\approx \frac{3 y S_0^\alpha}{z h}, \quad (6.13b)$$

wobei darauf geachtet werden muss, dass das externe magnetische Feld  $h$  in den entsprechenden Einheiten angegeben wird. Eine Abschätzung für die betrachteten Feldstärken ist durch  $h \approx 100 \text{ ns}^{-1}$  gegeben, sodass sich durch Einsetzen aller Zahlenwerte schließlich

$$\Delta_{\text{lim}} \approx \frac{3 y S_0^\alpha}{z h} \quad (6.14a)$$

$$\lesssim \frac{3 \cdot 0,15 \text{ ns}^{-1} \cdot 1/2}{1/800 \cdot 100 \text{ ns}^{-1}} \quad (6.14b)$$

$$\lesssim 1,8 \quad (6.14c)$$

als grober Schätzwert ergibt. Somit zeigt sich, dass das Verhältnis kleiner als der angegebene Zahlenwert sein muss, damit eine lineare Skalierung erreicht wird. Die Interpretation dieser Abschätzung ist, dass der nukleare Zeemanterm der

Hamiltonfunktion mindestens die gleiche Größenordnung aufweisen muss wie der Hyperfeinwechselwirkungsterm. Zu beachten ist, dass das externe Magnetfeld  $h$  für die genaue Bestimmung des Wertes  $y$  für den Übergang zur linearen Skalierung eigentlich von Relevanz ist. Da hier aber sehr viele Näherungen durchgeführt werden, ist die Betrachtung bloß einer Feldstärke  $h$  ausreichend.

Es kann festgehalten werden, dass durch die Berechnung der Sättigungswerte  $S_{\text{lim}}$  für kleine und mittlere Bäder eine Extrapolation von  $S_{\text{lim}}^{\infty}$  für realistische Badgrößen möglich ist. Es wird gezeigt, dass hierfür schon die Simulation von drei bis vier Datenpunkten ausreicht, da die Abweichungen von der Ausgleichskurve minimal ausfallen. Bei der Extrapolation muss darauf geachtet werden, dass die Datenpunkte, die gegen die Kopplungskonstante aufgetragen werden, näherungsweise lineares Verhalten aufweisen, was mittels der Abschätzung in diesem Kapitel geschehen kann. Dabei können  $h$  und  $y$  so angepasst werden, dass die Bedingung (6.14) erfüllt bleibt. Weiterhin gibt es Indizien dafür, dass die Dephasierungszeit bei der Extrapolation des Wertes  $S_{\text{lim}}^{\infty}$  bloß eine untergeordnete Rolle spielt und bei externen Magnetfeldern, die wesentlich größer als die Breite der Overhauserfeldverteilung sind, beliebig gewählt werden kann. Dies muss jedoch in weiteren Rechnungen überprüft werden.



## 7 Analyse der Overhauserfelder

### 7.1 Verschiebung des Verteilungsmaximums

Wie in den vorhergehenden Kapiteln schon erläutert, sorgt das periodische Pulsen dafür, dass über den Zentralspin auch die Dynamik des Bades beeinflusst wird. Durch Gleichung (4.5) ist eine Bedingung für Feldstärken gegeben, die das resultierende Feld annehmen muss, damit der Zentralspin eine ganzzahlige Anzahl an Präzessionen innerhalb der Zeit  $T_R$  durchführen kann.

Bei der Betrachtung von Abbildung 4.2 lässt sich erahnen, dass sich der Mittelwert der Wahrscheinlichkeitsdichte durch weiteres Pulsen immer weiter verschiebt. Mit zunehmender Pulszahl prägen sich an den Stellen die Maxima deutlicher aus, bei denen das Magnetfeld stärker ist. Eine genauere Analyse zeigt, dass diese Verschiebung des Gesamtfeldes durch die Verschiebung der Komponente  $B_{Ov}^x$  geprägt ist, während hingegen die Komponenten  $B_{Ov}^y$  und  $B_{Ov}^z$  keinerlei Verschiebungen aufweisen. Die Verschiebung des Mittelwerts der  $x$ -Komponente, der im Folgenden als  $\mu(B_{Ov}^x)$  bezeichnet wird, ist in Abbildung 7.1 gegen die Zeit aufgetragen. Auf das Zeigen der  $y$ - und  $z$ -Komponente wird hier verzichtet, da nur geringe Schwankungen um den Mittelwert beider Verteilungen zu beobachten sind. Dieser ist auch schon zum Zeitpunkt  $t = 0$  gegeben.

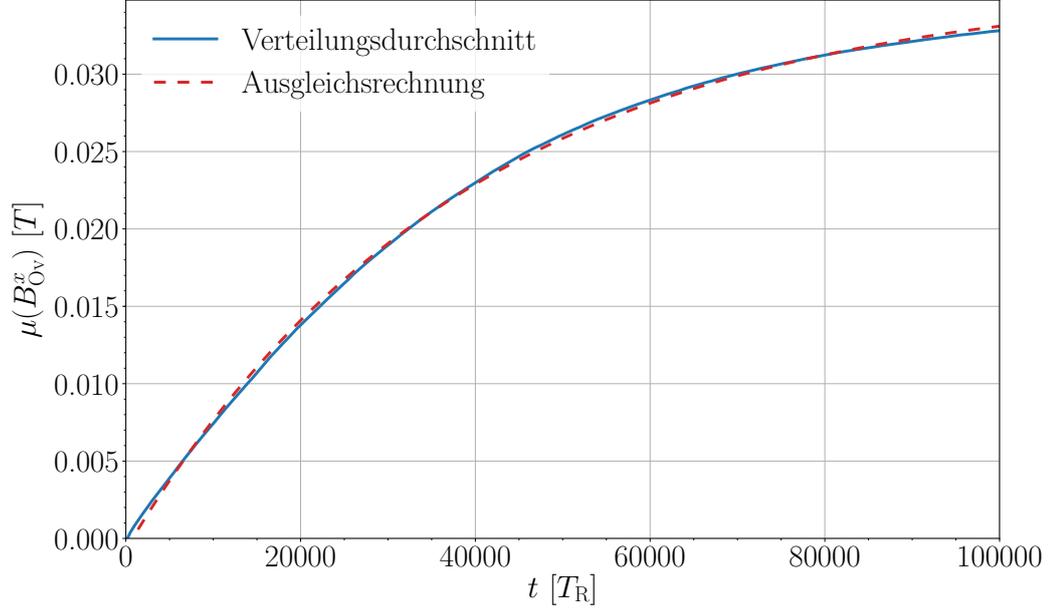
Zunächst einmal ist auffällig, dass der Mittelwert der Verteilung ansteigt und nach hinreichend vielen Pulsen in einen Sättigungswert  $B_x^\infty$  übergeht. Dieser kann mittels einer Ausgleichsrechnung bestimmt werden. Dazu wird durch die generierten Daten die Ausgleichsfunktion

$$B_\mu(t) = \bar{B} \cdot (1 - e^{-\beta t}) + \bar{B}_0 \quad (7.1)$$

gelegt und anschließend der Langzeitlimes

$$B_x^\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} [B_\mu(t)] = \bar{B} + \bar{B}_0 \quad (7.2)$$

gebildet. Es stellt sich beim Vergleich mit der orangenen Kurve in Abbildung ?? heraus, dass die Verschiebung des Verteilungsmittelwerts  $\mu(B_{Ov}^x)$  auch dann noch zu beobachten ist, wenn die Pre-Puls-Amplitude schon lange ihren Sättigungswert erreicht hat. Entsprechend ist anzunehmen, dass dieser Verschiebungseffekt eine andere, langsamere Zeitskala definiert, die für die Dynamik des Systems trotzdem

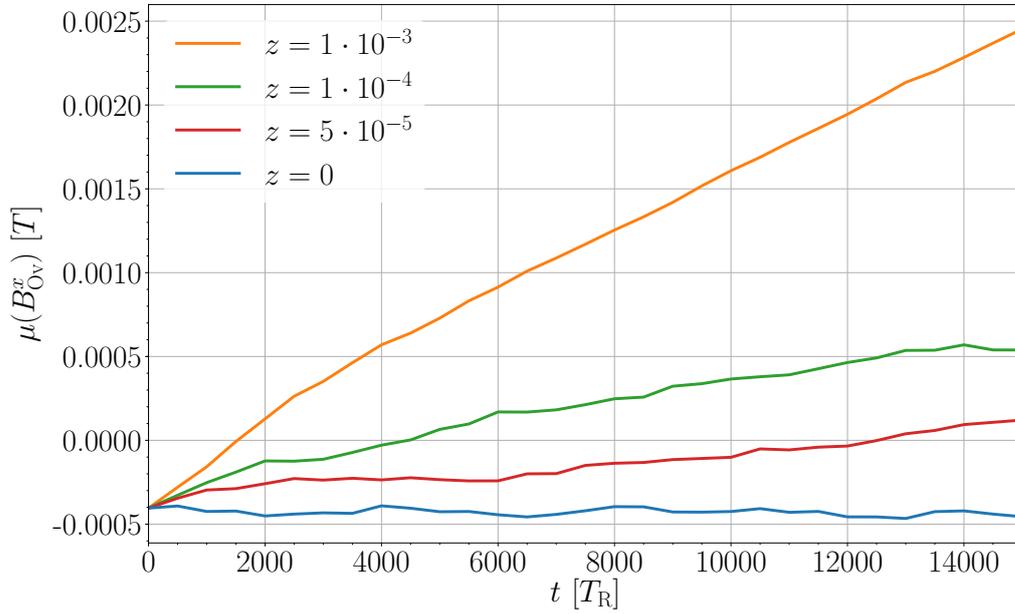


**Abbildung 7.1:** Verschiebung des Mittelwerts der Komponente  $B_{\text{Ov}}^x$  des Overhauserfeldes in Abhängigkeit von der Zeit. Die simulierten Daten sind durch die blaue Kurve dargestellt, während hingegen die Ausgleichsfunktion nach Gleichung (7.1) mit der rot gestrichelten Linie dargestellt ist. Die physikalischen Parameter sind durch  $B_{\text{ext}} = 1,0 \text{ T}$ ,  $N = 100$  und  $T_2^* = 1 \text{ ns}$  bei einem nuklearen Landéfaktor von  $z^{-1} = 800$  gegeben.

von Relevanz ist.

Während das Ausbilden des Sättigungswerts der Pre-Puls-Amplitude auf das periodische Pumpen und die Hyperfeinwechselwirkung zurückgeführt werden kann, so lässt sich die Verschiebung des Verteilungsmittelwerts durch den nuklearen Zeemann-Effekt begründen.

In Abbildung 7.2 ist die Verschiebung des Verteilungsmaximums für verschiedene nukleare Landéfaktoren dargestellt. Hier wird der Einfluss des nuklearen Zeemann-Effekts deutlich: Je stärker die jeweiligen Landéfaktoren sind, desto deutlicher prägt sich die Verschiebung des Verteilungsmittelwerts aus. Wird der nukleare Zeemann-Effekt in der Simulation nicht berücksichtigt, was durch den Fall  $z = 0$  dargestellt wird, so ist keine Verschiebung des Mittelwertes zu beobachten. Begründbar ist dies damit, dass das externe Magnetfeld über den Term  $H_{\text{NZ}}$  in Gleichung (3.2) an die  $x$ -Komponente der Badspins und entsprechend an die Overhauserfeldkomponente  $B_{\text{Ov}}^x$  koppelt. Mit größeren Werten für  $z$  geht ein stärkerer Einfluss dieses Terms

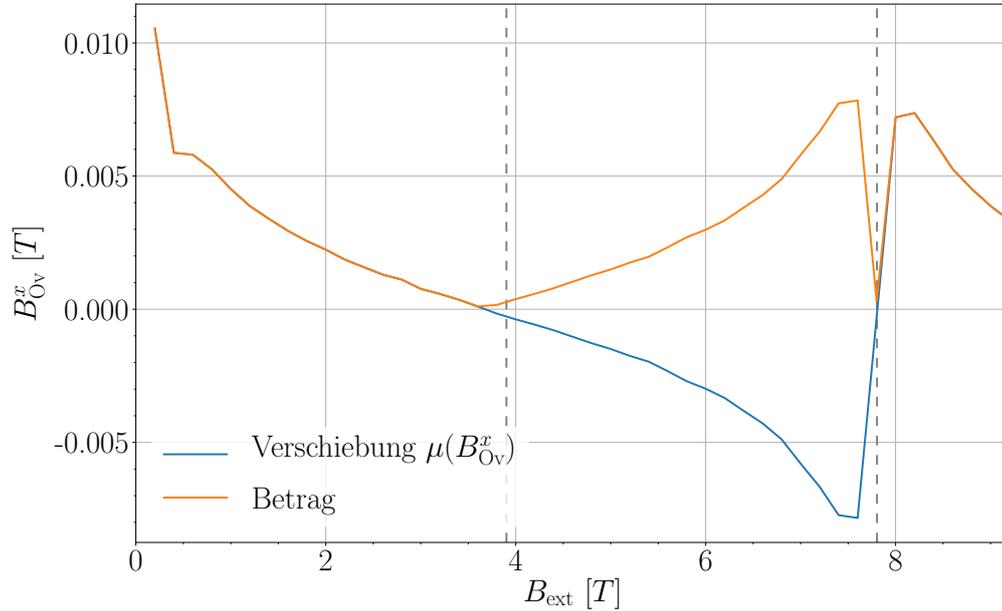


**Abbildung 7.2:** Verschiebung des Verteilungsmittelwerts von  $B_{Ov}^x$  für verschiedene nukleare Landéfactoren bei einem externen Magnetfeld von  $B_{ext} = 1,0$  T und einer Badgröße von  $N = 100$ .

einher, der das gesamte System somit deutlicher beeinflusst.

Durch die Beobachtung, dass die Verschiebung des Verteilungsmittelwerts auf dem nuklearen Zeemann-Effekt beruht, erscheint auch eine Untersuchung dieser Verschiebung in Abhängigkeit vom externen Magnetfeld  $B_{ext}$  sinnvoll. Die Ausprägung der Minima der jeweiligen Sättigungswerte  $S_{lim}$  der Pre-Puls-Amplituden ist nämlich ebenfalls durch diesen Effekt bestimmt.

Abbildung 7.3 zeigt diese Verschiebung des Verteilungsminimums in Abhängigkeit vom externen Magnetfeld für ein Bad mit  $N = 200$  Spins auf. Dabei entspricht der aufgetragene Wert in dieser Abbildung nicht dem Sättigungswert nach Gleichung (7.2), sondern stellt den Verteilungsmittelwert dar, nachdem die Pre-Puls-Amplitude ihren Sättigungswert erreicht hat. Entsprechend kann keine Aussage zum Wert  $B_x^\infty$  getroffen werden. Trotzdem ist auffällig, dass bei den Werten für  $B_{min}^n$  eine Verschiebung der Overhauserfeldverteilung in  $x$ -Richtung nicht stattfindet, während dies bei allen anderen Werten von  $B_{ext}$  der Fall ist. Vielmehr markieren diese Feldstärken eine Nullstelle des Verteilungsmittelwerts, bei dem sich die Richtung, in die sich die  $x$ -Komponente des Overhauserfeldes verschiebt, umdreht. Die geringe Abweichung des ersten Minimums von der Nullstelle ist auf die Diskretisierung zurückzuführen, die in Schritten von  $\Delta B_{ext} = 0,2$  T erfolgt. Das Minimum liegt hier



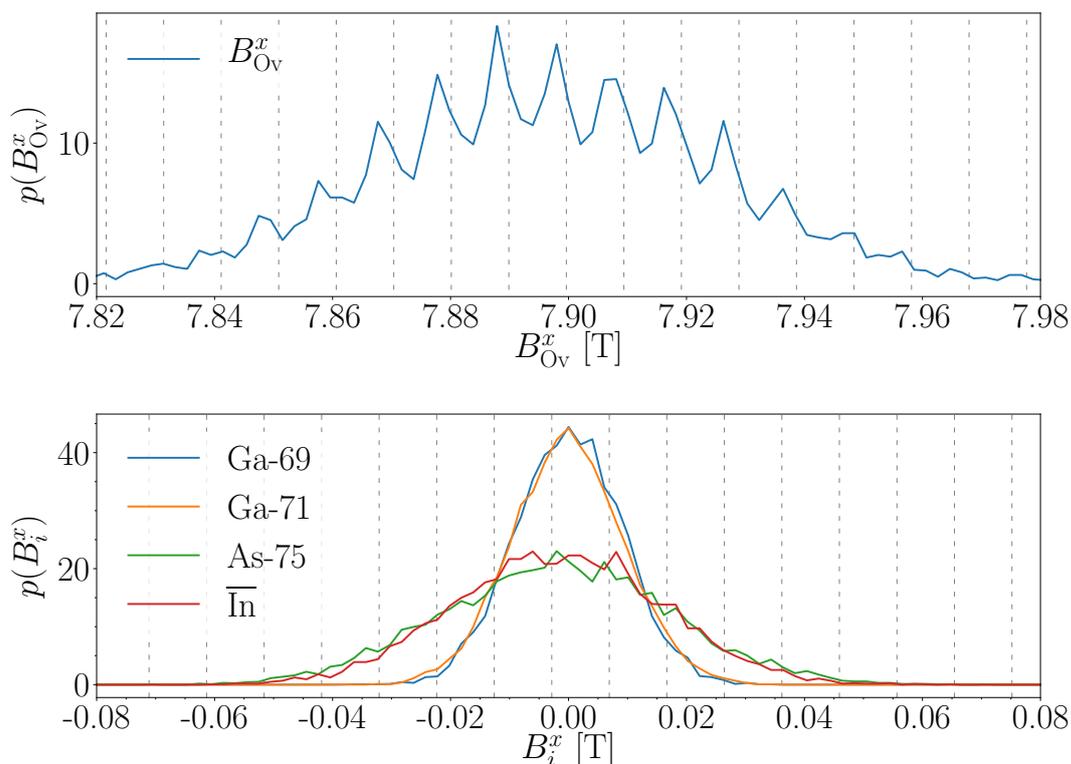
**Abbildung 7.3:** Verschiebung des Verteilungsmittelwerts der  $x$ -Komponente des Overhauserfeldes in Abhängigkeit vom jeweiligen externen Magnetfeld, sobald die Pre-Puls-Amplitude einen Sättigungswert erreicht hat sowie der Betrag der jeweiligen Verschiebung. Die Badgröße ist durch  $N = 200$  Spins gegeben, der Landéfaktor des Elektrons durch  $g_e = 0,555$ . Die grau gestrichelten Linien markieren die theoretischen Minima, die nach Gleichung (6.7) gelten.

bei  $B_{\text{min}}^{n=1} \approx 3,9$  T, sodass dieser Wert nicht erfasst werden kann.

Bei der Betrachtung der Betragskurve ist weiterhin auffällig, dass diese eine Ähnlichkeit zu der blauen Kurve in Abbildung 6.5 aufweist. Die physikalischen Parameter werden dabei gleich gewählt. Inwiefern diese Verschiebung Einfluss auf den Wert  $\mu(B_{\text{Ov}}^x)$  hat, kann an dieser Stelle jedoch nicht beurteilt werden, da das Erreichen dieses Wertes und das Erreichen von  $S_{\text{lim}}$  auf verschiedenen Zeitskalen stattfindet. Trotzdem unterstreicht dieser Kurvenvergleich, dass der nukleare Zeemann-Effekt einen bedeutenden Einfluss auf das System hat und ein Verständnis dafür, wie dieser das System beeinflusst, unabdingbar für die Simulation von Quantenpunkten ist. Eine Analyse solcher Kurven für Quantenpunkte bestehend aus mehreren Isotopen ist für die weitere Forschung von Interesse. Es ist fraglich, ob auch hier eine Vergleichbarkeit mit Kurven aus zum Beispiel Abbildung ?? möglich ist.

## 7.2 Berücksichtigung mehrerer Isotope

Bei der Erweiterung des Quantenpunktmodells auf mehrere Isotope zeigt sich bei Betrachtung der Werte  $S_{\text{lim}}$ , dass sich theoretisch berechnete Werte für Minima  $B_{\text{min}}^n$  aufgrund von Überlagerungseffekten nicht zwangsläufig ausbilden. Entsprechend ist es auch im Hinblick auf die Overhauserfeldentwicklung interessant zu wissen, wie diese durch das periodische Pulsen beeinflusst wird und wie sich die einzelnen Teilfelder, die durch ihren Erwartungswert und ihre Varianz nach Gleichung (3.20c) definiert sind, entwickeln.



**Abbildung 7.4:** Entwicklung der  $x$ -Komponenten des Overhauserfeldes (oben) und der Subfelder (unten) nach  $n_p = 50\,000$  Pulsen bei einem externen Magnetfeld von  $B_{\text{ext}} = 7,9$  T, einer Badgröße  $N = 100$  und einer Dephasierungszeit von  $T_2^* = 1$  ns. Die Pulszeit beträgt  $T_R = 13,2$  ns und bestimmt die Resonanzen nach Gleichung (4.5), die mit den getsichelten Linien kenntlich gemacht sind.

In Abbildung 7.4 wird für den Fall von  $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$  sowohl die Wahrscheinlichkeitsdichte der  $x$ -Komponente des Gesamtverhauserfeldes als auch die der Subfelder  $B_i^x$  gezeigt, die von den einzelnen Isotopen herrühren. Die Kernbotschaft dieser Abbil-

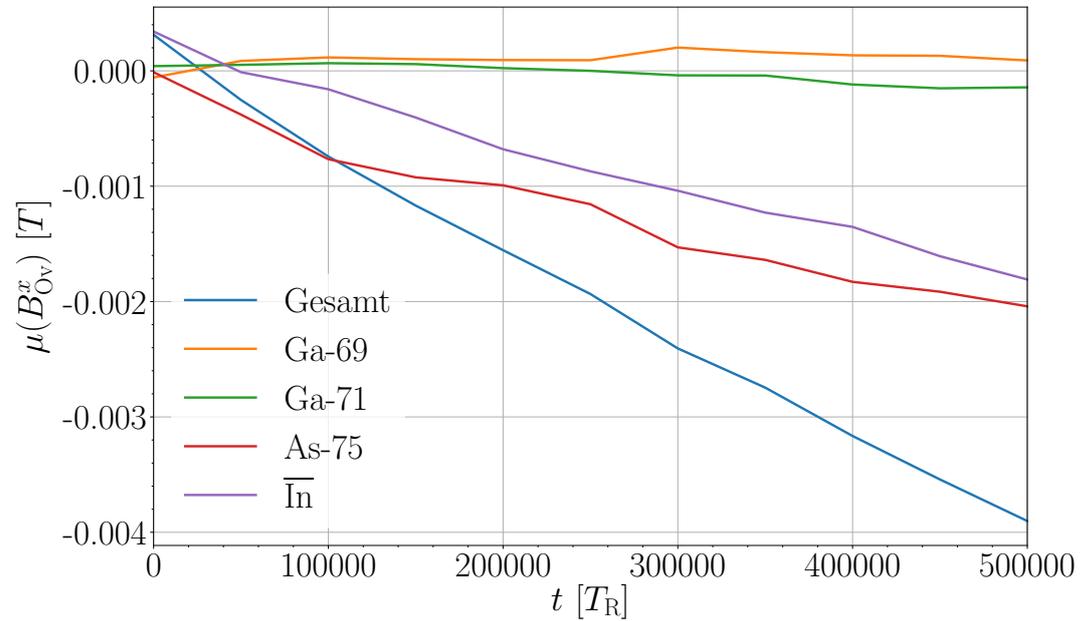
dung ist, dass die einzelnen Subfelder durch das Pulsen keine Feldstärken bevorzugen und entsprechend keine Peaks ausbilden. Das ist nur für die Gesamtkomponente  $B_{\text{Ov}}^x$  der Fall. Zur Erklärung wird die Resonanzbedingung (4.5) betrachtet und das resultierende Feld  $\vec{B}_{\text{res}}$  als Zusammensetzung der einzelnen Subfelder aufgefasst. Entsprechend kann der Betrag des resultierenden Feldes durch

$$\left| \vec{B}_{\text{res}} \right| = \left| \vec{B}_{\text{ext}} + \vec{B}_{\text{Ga-69}} + \vec{B}_{\text{Ga-71}} + \vec{B}_{\text{As-75}} + \vec{B}_{\text{In}} \right| \quad (7.3)$$

ausgedrückt werden. Hierdurch lässt sich begründen, warum die  $x$ -Komponenten der einzelnen Subfelder keine Resonanzen ausbilden: Diese sind durch den Betrag des gesamten resultierenden Feldes bestimmt.

Auch über die Dynamik des Zentralspins kann dies begründet werden: Das Ausbilden der Resonanzen beruht auf dem Effekt, dass der Zentralspin eine ganzzahlige Anzahl an Präzessionen innerhalb der Zeit  $T_{\text{R}}$  durchführt. An diesen koppeln jedoch alle Badspins und nicht bloß die eines Isotops. Eine Ausprägung von Peaks in einem Subfeld wäre allerdings gleichbedeutend mit dem Fall, dass lediglich ein Isotop die Dynamik des Zentralspins beeinflusst, was allein schon die Modellbildung ausschließt. Ein weiterer Punkt, der bei der Analyse der Subfelder von Interesse ist, ist ihre Untersuchung im Hinblick auf die Verschiebung des Verteilungsmittelwerts. In Abbildung 7.5 wird die Verschiebung der  $x$ -Komponente des Overhauserfeldes und der einzelnen Subfelder für  $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$  bei einem externen Magnetfeld von  $B_{\text{ext}} = 7,9 \text{ T}$  gezeigt. Es stellt sich heraus, dass die Verschiebung des Verteilungsmittelwerts der einzelnen Subfelder unterschiedlich stark ausfällt: Während die Isotope  $\overline{\text{In}}$  und As-75 deutliche Verschiebungen aufweisen, so sind bei Ga-69 und Ga-71 fast gar keine zu beobachten. Da in Kapitel 7.1 dieser Verschiebungseffekt durch den nuklearen Zeemann-Effekt begründet wird, ist es zunächst naheliegend, den möglichen Kurvenverlauf auf die Spinlänge  $S_i$  und den nuklearen Landéfaktor  $z_i$  zurückzuführen. Dies erklärt die deutliche Steigung der  $\overline{\text{In}}$ -Kurve, da die Spinquantenzahl mit  $S = 9/2$  die der anderen Isotope um einen Faktor drei übertrifft. Bei quantitativen Untersuchungen müssen jedoch mögliche Minima nach Gleichung (6.7) berücksichtigt werden, da bei diesen Werten keine Verschiebung des Verteilungsmittelwerts zu erwarten ist, wie auch schon in Abbildung 7.3 gezeigt wurde.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass sich die Verteilung der Komponente des Overhauserfeldes durch das periodische Pulsen in die Richtung des externen Magnetfeldes verschiebt. Dies ist auf den nuklearen Zeemann-Effekt zurückzuführen. Nach einer hinreichenden Anzahl an Pulsen läuft diese Verschiebung in einen Sättigungswert hinein. Dieser Verschiebungseffekt definiert eine neue Zeitskala. Die Untersuchung der Subfelder zeigt, dass diese keine Resonanzen ausbilden, sondern nur das Gesamt-overhauserfeld.



**Abbildung 7.5:** Verschiebung des Verteilungsmittelwerts der  $x$ -Komponente der einzelnen Subfelder sowie der daraus resultierenden Overhauserfeldkomponente. Dabei besteht das Bad aus  $N = 100$  Spins bei einer Dephasierungszeit von  $T_2^* = 1$  ns. Das externe Magnetfeld beträgt  $B_{\text{ext}} = 7,9$  T, die Indiumkonzentration  $x = 0,2$ .



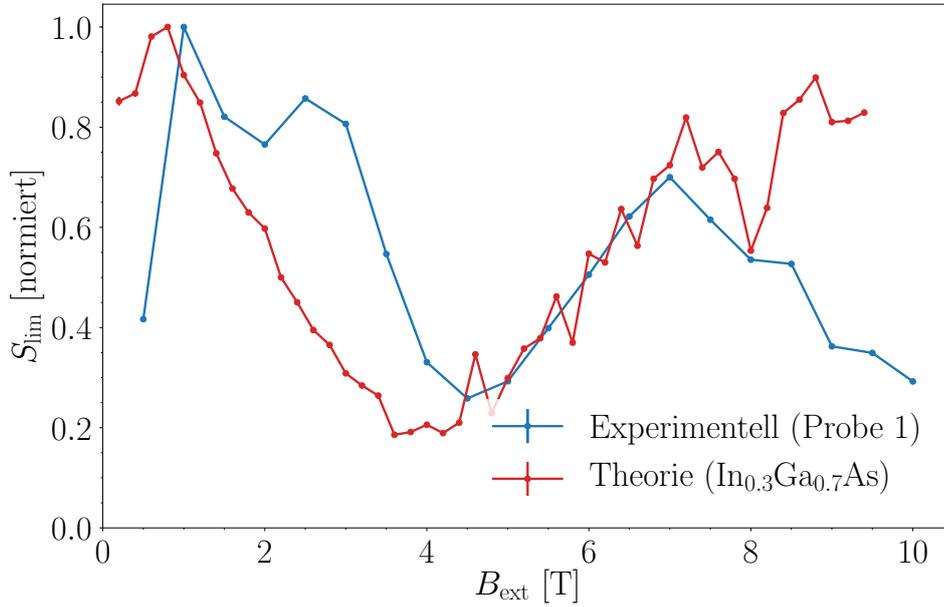
## 8 Diskussion und Fazit

Ziel dieser Arbeit war es, eine Erweiterung des Modells für Quantenpunkte zu erarbeiten, sodass die Effekte des periodischen Pulsens numerisch effizienter gelöst werden können. Dies geschah vor dem Hintergrund, dass der Verlauf der Messdaten, die in verschiedenen Pulsexperimenten aufgenommen wurden, theoretisch reproduziert werden kann. Auch sollte der Einfluss der verschiedenen physikalischen Parameter auf die Systemdynamik untersucht werden, um auf dessen Grundlage Systematiken herauszuarbeiten, die eine effiziente, aber umfassendere Beschreibung des Quantenpunktsystems ermöglichen.

### 8.1 Vergleich von Theorie und Experiment

Eine naheliegende Möglichkeit, die Vollständigkeit und Korrektheit des in dieser Arbeit erweiterten, periodisch getriebenen Quantenpunktmodells zu überprüfen, ist der Vergleich der simulierten Daten mit experimentellen Ergebnissen. Dieser ist in Abbildung 8.1 gegeben. In der theoretischen Simulation wurde eine Indiumkonzentration von  $x = 0,3$  angenommen, während diese bei der Messung auf etwa  $x \approx 0,3$  abgeschätzt werden kann, sodass die Daten vergleichbar sind. Dabei wurden beide Kurven auf ihren Maximalwert normiert, um eine Vergleichbarkeit aufgrund der willkürlichen Einheiten der experimentellen Ergebnisse zu ermöglichen. Ähnlichkeiten sind insbesondere in dem Bereich von  $B_{\text{ext}} \approx 4 - 5 \text{ T}$  zu beobachten, da hier sowohl die experimentelle als auch die theoretische Kurve ein Minimum aufweisen. Auch der Anstieg bis circa  $B_{\text{ext}} \approx 7 \text{ T}$  lässt eine gewisse Ähnlichkeit erkennen, wobei die Theoriekurve deutlich stärker schwankt. Unterschiede hingegen fallen insbesondere bei größeren Feldern auf: Hier steigt der Wert  $S_{\text{lim}}$  der Theoriekurve mit zunehmender Feldstärke an, während hingegen die experimentelle Kurve bei circa  $B_{\text{ext}} \approx 7 \text{ T}$  ein Maximum markiert und anschließend abfällt. Das scharfe Minimum, welches in der theoretischen Kurve bei  $B_{\text{ext}} = 8 \text{ T}$  vorzufinden ist, kann experimentell nicht nachgewiesen werden.

Begründbar sind diese deutlichen Unterschiede des Kurvenverlaufs mit drei Argumenten: Zunächst ist zu beachten, dass die theoretische Simulation eine Diskretisierung von  $\Delta B_{\text{ext}} = 0,2 \text{ T}$  aufweist. Diese verhältnismäßig feine Diskretisierung ist notwendig, da die sich ausprägenden Minima teilweise sehr scharf sind und durch eine zu



**Abbildung 8.1:** Vergleich der  $\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ -Kurve aus Abbildung 6.6 mit den experimentell aufgenommenen Sättigungswerten der Pre-Puls-Amplituden in Abhängigkeit vom externen Magnetfeld. Die Kurven sind auf die Maximalwerte der jeweiligen Kurven normiert.

grobe Diskretisierung nicht gut erfasst werden können. Dies wurde unter anderem in Kapitel 6.3 in Abbildung 6.7 gezeigt. Bei den in Artikel [17] durchgeführten Messungen der Sättigungswerte wurde allerdings eine Diskretisierung von  $\Delta B_{\text{ext}} = 0,5 \text{ T}$  gewählt, welche auf Grundlage der Simulationsergebnisse zu grob ist, um sicher alle Minima zu beobachten. Entsprechend ist aus experimenteller Sicht eine feinere Diskretisierung notwendig, um scharf ausgeprägte Minima messen zu können.

Weiterhin ist anzumerken, dass die Kopplung von etwa  $N \simeq 10^4 - 10^6$  Spins an den Elektronenspin berücksichtigt werden müssen. Bei der in dieser Arbeit durchgeführten Simulation werden allerdings nur  $N = 100$  Spins in der Rechnung betrachtet, was auf die hohe Programmlaufzeit zurückzuführen ist. Wie allerdings in Kapitel 6.4 gezeigt wurde, kann eine Extrapolation für hinreichend große Bäder auch mit Daten durchgeführt werden, die auf der Grundlage mittlerer Badgrößen beruhen. Ebenfalls ist hier auch zu erkennen, dass sich die Sättigungswerte  $S_{\text{lim}}$  je nach Badgröße deutlich unterscheiden, sodass dies in weiteren theoretischen Simulationen in jedem Fall zu berücksichtigen ist, sofern die Ergebnisse mit experimentellen Daten verglichen werden sollen.

Im Rahmen der Modellbildung werden außerdem diverse physikalische Effekte nicht mit einbezogen oder vereinfacht, sodass eine Vergleichbarkeit zwischen Theorie und

Experiment erschwert wird. Wie in Kapitel 3.3 betrachtet, werden verschiedene Wechselwirkungen der Badspins untereinander nicht betrachtet, die sich insbesondere in der Langzeitdynamik bemerkbar machen. Auch das instantane Pulsmodell (4.1) ist bloß eine Näherung sowie der Fall, dass die Anregung und der Zerfall des Trions nicht berücksichtigt wird. Beides hat jedoch einen Einfluss auf die Systemdynamik, insbesondere auch auf kurzen Zeitskalen. Eine bessere Einbindung dieser Effekte in das Modell könnte die Werte wesentlich beeinflussen.

## 8.2 Zusammenfassung

Zur theoretischen Beschreibung von Quantenpunkten wird in Kapitel 3 das Zentralspinmodell herangezogen, dessen Bewegungsgleichungen mittels eines klassischen Ansatzes gelöst werden. Quantenmechanische Effekte können hier durch eine Mittelung über hinreichend viele Konfigurationen  $N_C$  simuliert werden. Auf Grundlage dieses Modells wird eine Erweiterung durchgeführt, die berücksichtigt, dass das Spinbad aus unterschiedlichen Isotopen besteht. Um die Rechnungen numerisch möglichst effizient zu gestalten, wird die Kopplungskonstantenverteilung diskutiert und lediglich eine Kopplungskonstante pro Isotop betrachtet, was auch als *Box-Modell* bezeichnet wird. Die Dimension des zu lösenden Gleichungssystems reduziert sich dabei drastisch von  $d \simeq 10^5$  auf  $d = 15$ , ohne dass der physikalische Einfluss der einzelnen Isotope durch Mittelung vernachlässigt wird.

Anschließend wird in Kapitel 4 ein Modell eingeführt, durch das die Anregung des Zentralspins durch Laserpulse beschrieben wird. Durch periodisches Pulsen stellt sich heraus, dass der Zentralspin nicht mehr komplett dephasiert und der Dynamik der Laserpulse, die durch die Wiederholungsrate  $T_R$  bestimmt ist, folgt. Dieser nicht dephasierte Anteil ist zeitabhängig und wird als  $S_{\text{pre}}(t)$  bezeichnet. Weiterhin wird das Overhauserfeld durch die Dynamik des Zentralspins so beeinflusst, dass es bestimmte Feldstärken (4.5) bevorzugt. Nach einer bestimmten Anzahl an Pulsen befindet sich das System schließlich in einem quasistatischen Zustand, der sehr stabil ist und erst einige Minuten nach Abschalten der Laserpulse zerfallen ist. Die Dephasierung des Zentralspins wurde dabei so stark wie möglich unterdrückt, sodass  $S_{\text{pre}}(t)$  einen Sättigungswert  $S_{\text{lim}}$  erreicht.

Die Größe  $S_{\text{pre}}(t)$  dient in Kapitel 5 dazu, das zuvor eingeführte Modell auf seine Stabilität zu untersuchen und eine Fehleranalyse durchzuführen, abhängig von den verschiedenen physikalischen Parametern. Nur so kann gewährleistet werden, dass die Ergebnisse innerhalb einer bestimmten Fehlertoleranz liegen, die Simulationen aber relevante physikalische Ergebnisse bei hinreichend kurzer Programmlaufzeit liefern. Die Festlegung des relativen Fehlers auf  $\epsilon_{\text{rel}} \approx 0,5\%$  stellt dabei eine gute Toleranzschwelle dar.

Schließlich wird in Kapitel 6 herausgefunden, dass der zeitliche Verlauf von  $S_{\text{pre}}(t)$  gut durch die Ausgleichsfunktion (6.1) gefittet werden kann, sodass sich daraus der Wert  $S_{\text{lim}}$  extrahieren lässt. Auf dieser Grundlage wird die Skalierung von  $S_{\text{pre}}(t)$  im Hinblick auf die Dephasierungszeit  $T_2^*$ , das externe Magnetfeld  $B_{\text{ext}}$  und die Badgröße  $N$  untersucht. Dies dient zur Abschätzung, nach wie vielen Pulsen  $n_p$  die Kurve  $S_{\text{pre}}(t)$  einen Sättigungswert  $S_{\text{lim}}$  erreicht hat. Dabei zeigt sich, dass zuvor in Artikel [39] beobachtete Skalierungsgesetze auch für das Box-Modell näherungsweise gültig sind. Ebenfalls ist zu beobachten, dass die Werte  $S_{\text{lim}}$  von der Wahl der Parameter  $T_2^*$ ,  $B_{\text{ext}}$  und  $N$  abhängen.

Darauf aufbauend wird die Abhängigkeit von  $S_{\text{lim}}$  vom externen Magnetfeld  $B_{\text{ext}}$  für Bäder bestehend aus einem Isotop analysiert. Es wird festgestellt, dass der Kurvenverlauf  $S_{\text{lim}}(B_{\text{ext}})$  qualitativ mit zuvor in Artikel [17] veröffentlichten Ergebnissen übereinstimmt. Insbesondere die Positionen der Minima sind gleich, die mit Hilfe von Gleichung (6.7) berechnet werden können. Die Badspins führen in diesem Fall innerhalb der Zeit  $T_R$  das Vielfache einer halbzahligen Präzessionsbewegung aus. Anschließend wird das Modell so erweitert, dass Bäder bestehend aus mehreren Isotopen betrachtet werden. Aufgrund der Vielzahl physikalischer Parameter lassen sich viele theoretische Minima nach Gleichung (6.7) berechnen, die sich jedoch nicht alle ausbilden. Zurückzuführen ist dies auf mögliche Überlagerungseffekte der einzelnen Isotope, sodass sich nicht jedes Minimum ausbilden kann. Weiterhin wird beobachtet, dass der Wert  $S_{\text{lim}}$  umso niedriger ausfällt, je mehr unterschiedliche Isotope an den Badspin koppeln. Die Dephasierung wird entsprechend schwächer unterdrückt. Destruktive Interferenzeffekte sind hierfür eine Erklärung.

Um die Simulationsergebnisse besser mit Messergebnissen vergleichbar zu machen, ist die Simulation von Badgrößen erforderlich, die sich in der Größenordnung  $N \simeq 10^4 - 10^6$  befinden. Die Rechenzeit hierfür ist allerdings zu lang, sodass eine Extrapolation der Größe  $S_{\text{lim}}$  für solche Badgrößen erforderlich ist. Es stellt sich heraus, dass eine Auftragung der Werte  $S_{\text{lim}}$  gegen die Kopplungskonstante  $J \propto y = 1/(\sqrt{N} \cdot T_2^*)$  einen nahezu perfekten linearen Zusammenhang liefert, sodass über eine lineare Ausgleichsrechnung (6.10) der Sättigungswert  $S_{\text{lim}}^\infty$  für relevante Badgrößen gut abgeschätzt werden kann. Die Ergebnisse liefern außerdem Indizien dafür, dass die Dephasierungszeit  $T_2^*$  für Bäder  $N \rightarrow \infty$  keinen Einfluss auf die Systemdynamik mehr hat und der Sättigungswert  $S_{\text{lim}}^\infty$  unabhängig von ihr ist.

Neben der Zeitskala, die durch den Parameter  $\lambda$  in Gleichung (6.1) bestimmt ist und das Erreichen eines Sättigungswertes von  $S_{\text{pre}}(t)$  beschreibt, existiert noch eine andere, längere Zeitskala, die durch den Parameter  $\beta$  in Gleichung (7.1) gegeben ist. Auf dieser finden Verschiebungseffekte der Overhauserfeldverteilung in Richtung des externen Magnetfeldes statt. Zurückzuführen sind diese Effekte auf den nuklearen Zeemann-Effekt, wie in Kapitel 7 gezeigt wird. Interessant ist auch, dass diese Verschiebungen unterdrückt werden, sobald das externe Feld die Bedingung zum Ausbilden von Minima (6.7) erfüllt.

Eine Analyse der Overhauserfeldverteilung für Quantenpunkte bestehend aus mehreren Isotopen zeigt weiterhin, dass die Teilfelder der einzelnen Isotope keine Feldstärken bevorzugen. Dies ist lediglich für das Gesamtverhauserfeld der Fall, was über die Erweiterung der Resonanzbedingung (4.5) durch (7.3) gezeigt werden kann: Alle Badspins beeinflussen die Dynamik des Zentralspins. Lediglich die Verschiebung der Overhauserfelder in Richtung des externen Feldes lässt sich in allen Subfeldern beobachten, wobei diese unterschiedlich stark ausfällt. Da die Verschiebung durch den nuklearen Zeemann-Effekt begründet ist, fällt diese umso stärker aus, je größer die Spinquantenzahl  $S$  ist sowie wenn keine Resonanzen nach (6.7) für das jeweilige Isotop erfüllt sind.

### 8.3 Ausblick

Bei dem Vergleich der Theoriekurven mit den experimentellen Daten in Kapitel 8.1 wird diskutiert, warum die Kurven stark voneinander abweichen, was die Grundlage für weitere Untersuchungen darstellt. Insbesondere die Simulation von kleinen Bädern  $N \approx 100$  erschwert einen Vergleich von experimentellen Daten und Messdaten. Entsprechend ist das in Kapitel 6.4 festgestellte Skalierungsverhalten eine Erkenntnis, auf deren Grundlage weitere Rechnungen aufgebaut werden können. Die Simulation einer Kurve  $S_{\text{lim}}(B_{\text{ext}})$  für  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  Quantenpunkte nach Abbildung 6.6, indem Badgrößen  $N \simeq 10^4 - 10^6$  gemäß dieser Skalierungsgesetze extrapoliert werden, erhöht die Vergleichbarkeit von Theorie- und Experimentaldaten. Dabei ist darauf zu achten, dass die Fehler der Extrapolation unter Berücksichtigung der Rechenzeit nicht zu groß sind.

Hier lohnt es sich ebenfalls, den Einfluss der Dephasierungszeit  $T_2^*$  auf die Werte  $S_{\text{lim}}^\infty$  weiter zu untersuchen. Stellt sich heraus, dass diese tatsächlich für große Bäder unwesentlich ist, so kann  $T_2^*$  in der Simulation möglichst klein gewählt werden. Dies verkürzt die Rechenzeit stark, da in Kapitel 6.1.2 festgestellt wird, dass die Anzahl der nötigen Pulse  $n_p$  bis zum Erreichen des Sättigungswertes  $S_{\text{lim}}$  kubisch mit  $T_2^*$  zunimmt.

Ist es an diesem Punkt weiterhin der Fall, dass Theorie- und Experimentaldaten stark voneinander abweichen, so sollte zunächst die Parametrisierung der Kopplungskonstantenverteilung betrachtet werden. In Kapitel 2 wird nämlich festgestellt, dass die Beschaffenheit der  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  Quantenpunkte stark von Diffusionsprozessen geprägt ist und die Indiumkonzentration in den Quantenpunkten nicht an jeder Stelle gleich ist. Auch zeigt Kapitel 3.2, dass die Kopplungskonstante im Allgemeinen von der relativen Position des Kernspins zum Elektronenspin abhängig ist und entsprechend das Box-Modell bloß die erste Form einer Realisierung der Kopplungen darstellt. Eine wesentlich bessere Übereinstimmung von Theorie- und Experimental-

daten nach einer solchen Abänderung zeigt, dass die Kopplungskonstantenverteilung nicht unwesentlich ist und bei der theoretischen Betrachtung von Quantenpunkten berücksichtigt werden muss.

Liegt hier immer noch keine gute Übereinstimmung der Daten vor, so sollten die in Kapitel 8.1 dargestellten vernachlässigten physikalischen Effekte nach und nach in die Modellbildung eingebunden werden. Zunächst einmal sollte der Einfluss der Dipol-Dipol-Wechselwirkung sowie der des Puls-Modells analysiert werden. Bei nicht ausreichender Übereinstimmung können der Trion-Zerfall und die quadrupolare Wechselwirkung ebenfalls hinzugezogen werden. Eine systematische Analyse der Einflüsse der jeweiligen Effekte ist hier erforderlich, um ein Verständnis dafür zu entwickeln, wie genau sich die jeweiligen Effekte in der Systemdynamik niederschlagen. Die Beobachtung, dass sich die Overhauserfeldverteilung in Richtung des externen Magnetfeldes verschiebt, kann zunächst nur auf den nuklearen Zeemann-Effekt zurückgeführt werden. Da diese Verschiebung allerdings auch in einen Sättigungswert läuft, ist es zunächst interessant zu wissen, inwiefern dieser von der externen Magnetfeldstärke abhängt. Weiterhin ist anzunehmen, dass es aufgrund der Sättigungseffekte eine bis jetzt unbekannte physikalische Größe gibt, die durch das Pulsen optimiert wird. Eine systematische Analyse des Systems kann zeigen, um welche Größe es sich hierbei handelt.

Darauf aufbauend kann der Einfluss des nuklearen Landéfaktors  $z_i$  und der Spinquantenzahl  $S_i$  auf die Stärke der Verschiebung untersucht werden, um quantitative Ergebnisse zu erhalten, die möglicherweise eine Verallgemeinerung ermöglichen.

## A Anhang

### A.1 Zeitentwicklung im Box-Modell

Als Ausgangspunkt für die Zeitentwicklung des Overhauserfeldes wird Gleichung (3.6) mit  $n = 1$  gewählt, sodass sich

$$\frac{d}{dt} \vec{B}_{\text{ov}} = \vec{S}_0 \times \sum_{k=1}^N J_k^2 \cdot \vec{S}_k \quad (\text{A.1})$$

$$= \vec{S}_0 \times J^2 \cdot \sum_{k=1}^N \vec{S}_k \quad (\text{A.2})$$

$$= J \cdot \left( \vec{S}_0 \times \sum_{k=1}^N J \cdot \vec{S}_k \right) \quad (\text{A.3})$$

$$= J \cdot \left( \vec{S}_0 \times \vec{B}_{\text{ov}} \right) \quad (\text{A.4})$$

ergibt. Dabei wird in (A.2) ausgenutzt, dass die Kopplungen im Box-Modell  $J_k = J = \text{const}$  sind und in (A.4) wieder die Definition des Overhauserfeldes eingesetzt.

### A.2 Rechnungen zum Rotationsansatz

Zunächst wird die Relation (5.5) gezeigt. Dazu berechnen wir zunächst die linke Seite der Gleichung:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{D}}{dt}(t) \cdot \vec{Z}(t) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -h \sin(ht) & h \cos(ht) \\ 0 & -h \cos(ht) & -h \sin(ht) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Z_x \\ Z_y \\ Z_z \end{pmatrix} \\ &= -h \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ Z_y \sin(ht) - Z_z \cos(ht) \\ Z_z \sin(ht) + Z_y \cos(ht) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Bei Berechnung der rechten Seite der Gleichung unter Verwendung der Geometrie  $\vec{h} = h \cdot \vec{e}_x$  ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \vec{h} \times \vec{S}_0(t) &= \vec{h} \times \mathbf{D}(t) \cdot \vec{Z}(t) \\
 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h \\ 0 & -h & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Z_x \\ Z_y \cos(ht) + Z_z \sin(ht) \\ -Z_y \sin(ht) + Z_z \cos(ht) \end{pmatrix} \\
 &= -h \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ Z_y \sin(ht) - Z_z \cos(ht) \\ Z_z \sin(ht) + Z_y \cos(ht) \end{pmatrix}. \tag{A.6}
 \end{aligned}$$

Da (A.5) = (A.6) ist, gilt die Relation als gezeigt.

Um Gleichung (5.7) zu zeigen, wird zunächst die inverse Matrix

$$\mathbf{D}^{-1}(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(ht) & -\sin(ht) \\ 0 & \sin(ht) & \cos(ht) \end{pmatrix} \tag{A.7}$$

berechnet. Ebenfalls wird das Kreuzprodukt in Gleichung (5.6) berechnet und (A.7) in diese Gleichung eingesetzt, sodass sich durch ausmultiplizieren

$$\begin{aligned}
 \frac{d\vec{Z}}{dt}(t) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(ht) & -\sin(ht) \\ 0 & \sin(ht) & \cos(ht) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_y \cdot S_z - B_z \cdot S_y \\ B_z \cdot S_x - B_x \cdot S_z \\ B_x \cdot S_y - B_y \cdot S_x \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} B_y \cdot S_z - B_z \cdot S_y \\ S_x \cdot (B_z \cos(ht) + B_y \sin(ht)) - B_x \cdot (S_z \cos(ht) + S_y \sin(ht)) \\ S_x \cdot (B_z \sin(ht) - B_y \cos(ht)) - B_x \cdot (S_z \sin(ht) - S_y \sin(ht)) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} B_y \cdot S_z - B_z \cdot S_y \\ S_x \cdot (B_z \cos(ht) + B_y \sin(ht)) - B_x \cdot Z_z \\ S_x \cdot (B_z \sin(ht) - B_y \cos(ht)) + B_x \cdot Z_y \end{pmatrix} \tag{A.8}
 \end{aligned}$$

ergibt. Zu beachten ist hier, dass die Definitionen von  $Z_y$  und  $Z_z$  gemäß  $\vec{Z}(t) = \mathbf{D}^{-1}(t) \cdot \vec{S}_0(t)$  eingesetzt wurden. Zu beachten bei den Rechnungen ist, dass die verwendeten Größen zeitabhängig sind; es gilt also  $B_i \rightarrow B_i(t)$ ,  $S_i \rightarrow S_i(t)$  und  $Z_i \rightarrow Z_i(t)$ .

### A.3 Quantitative Analyse der Skalierung

In den hier aufgeführten Tabellen ist der Parameter  $\lambda$  nach der Ausgleichsrechnung (6.1) für die Variation der verschiedenen Skalierungsparameter  $x_{\text{skal}}$  nach (6.4) aufgeführt. Auch wird der entsprechende skalierte Parameter  $\bar{\lambda}$  berechnet.

**Tabelle A.1:** Fitparameter  $\lambda$  für verschiedene Dephasierungszeiten  $T_2^*$  und der daraus resultierende skalierte Parameter  $\bar{\lambda}$  bei einer Badgröße  $N = 200$  und einer externen Magnetfeldstärke von  $B_{\text{ext}} = 2,0 \text{ T}$  im Hinblick auf Abbildung 6.2.

| $T_2^* / \text{ns}$         | $\lambda / T_{\text{R}}^{-1}$ | $\bar{\lambda} / T_{\text{R}}^{-1} \cdot \text{ns}^{-3}$ |
|-----------------------------|-------------------------------|--|
| $0,7071 \approx 1/\sqrt{2}$ | $2,3441 \cdot 10^{-4}$        | $8,2876 \cdot 10^{-5}$                                   |
| 1,0                         | $7,5922 \cdot 10^{-5}$        | $7,5922 \cdot 10^{-5}$                                   |
| $1,4142 \approx \sqrt{2}$   | $1,8826 \cdot 10^{-5}$        | $5,3247 \cdot 10^{-5}$                                   |
| 2,0                         | $5,4729 \cdot 10^{-6}$        | $4,3783 \cdot 10^{-5}$                                   |

**Tabelle A.2:** Fitparameter  $\lambda$  für verschiedene Badgrößen  $N$  und der daraus resultierende skalierte Parameter  $\bar{\lambda}$  bei einer externen Magnetfeldstärke  $B_{\text{ext}} = 2,0 \text{ T}$  und einer Dephasierungszeit von  $T_2^* = 1,0 \text{ ns}$  im Hinblick auf Abbildung 6.3.

| $N$  | $\lambda / T_{\text{R}}^{-1}$ | $\bar{\lambda}_N / T_{\text{R}}^{-1}$ |
|------|-------------------------------|---------------------------------------|
| 100  | $1,2957 \cdot 10^{-4}$        | $1,2957 \cdot 10^{-2}$                |
| 200  | $7,5922 \cdot 10^{-5}$        | $1,5184 \cdot 10^{-2}$                |
| 500  | $2,8413 \cdot 10^{-5}$        | $1,4207 \cdot 10^{-2}$                |
| 1000 | $1,4741 \cdot 10^{-5}$        | $1,4741 \cdot 10^{-2}$                |

**Tabelle A.3:** Fitparameter  $\lambda$  für verschiedene externe Magnetfelder  $B_{\text{ext}}$  und der daraus resultierende skalierte Parameter  $\bar{\lambda}$  bei einer Badgröße  $N = 200$  und einer Dephasierungszeit  $T_2^* = 1,0 \text{ ns}$  im Hinblick auf Abbildung 6.4.

| $B_{\text{ext}} / \text{T}$ | $\lambda / T_{\text{R}}^{-1}$ | $\bar{\lambda}_B / T_{\text{R}}^{-1} \cdot \text{T}^2$ |
|-----------------------------|-------------------------------|--|
| 1,0                         | $4,6657 \cdot 10^{-4}$        | $4,6657 \cdot 10^{-4}$                                 |
| 2,0                         | $7,5922 \cdot 10^{-5}$        | $3,0369 \cdot 10^{-4}$                                 |
| 5,0                         | $1,0282 \cdot 10^{-5}$        | $2,5705 \cdot 10^{-4}$                                 |



## Literatur

- [1] P. W. Shor, „Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring“, Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science, 123 (1994).
- [2] P. W. Shor, „Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer“, SIAM Journal on Computing **26**, 1484 (1997).
- [3] L. K. Grover, „Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack“, Physical Review Letters **79**, 325 (1997).
- [4] F. Arute et. al., „Quantum supremacy using a programmable superconducting processor“, Nature **574**, 505 (2019).
- [5] D. P. DiVincenzo, „The physical implementation of quantum computation“, Fortschritte der Physik **48**, 771 (2000).
- [6] J. Cirac und P. Zoller, „Quantum computations with cold trapped ions“, Physical Review Letters **74**, 4091 (1995).
- [7] C. Monroe, D. M. Meekhof, B. E. King, W. M. Itano und D. J. Wineland, „Demonstration of a fundamental quantum logic gate“, Physical Review Letters **75**, 4714 (1995).
- [8] Q. A. Turchette, C. J. Hood, W. Lange, H. Mabuchi und H. J. Kimble, „Measurement of conditional phase shifts for quantum logic“, Physical Review Letters **75**, 4710 (1995).
- [9] M. A. Nielsen und I. L. Chuang, *Quantum computation and quantum information* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [10] J. Schliemann, A. Khaetskii und D. Loss, „Electron spin dynamics in quantum dots and related nanostructures due to hyperfine interaction with nuclei“, Journal of Physics: Condensed Matter **15**, R1809 (2003).
- [11] I. A. Merkulov, A. L. Efros und M. Rosen, „Electron spin relaxation by nuclei in semiconductor quantum dots“, Physical Review B **56**, 205309 (2002).
- [12] A. V. Khatetskii, D. Loss und L. Glazman, „Electron spin decoherence in quantum dots due to interaction with nuclei“, Physical Review Letters **88**, 186802 (2002).

- [13] A. C. Johnson, J. R. Petta, J. M. Taylor, Y. A., M. D. Lukin, C. M. Marcus, M. P. Hanson und A. C. Gossard, „Triplet-singlet spin relaxation via nuclei in a double quantum dot“, *Nature* **435**, 925 (2005).
- [14] A. Greilich, R. Oulton, E. A. Zhukov, I. A. Yugova, D. R. Yakovlev, M. Bayer, A. Shabaev, A. L. Efros, I. A. Merkulov, V. Stavarache, D. Reuter und A. Wieck, „Optical control of spin coherence in singly charged (In,Ga)As/GaAs quantum dots“, *Physical Review Letters* **96**, 227401 (2006).
- [15] A. Greilich, A. Shabaev, D. R. Yakovlev, A. L. Efros, I. A. Yugova, D. Reuter, A. D. Wieck und M. Bayer, „Nuclei-induced frequency focusing of electron spin coherence“, *Science* **317**, 1896 (2007).
- [16] A. Greilich, D. R. Yakovlev, A. Shabaev, A. L. Efros, I. A. Yugova, R. Oulton, V. Stavarache, D. Reuter, A. Wieck und M. Bayer, „Mode locking of electron spin coherence in singly charged quantum dots“, *Science* **33**, 341 (2006).
- [17] I. Kleinjohann, E. Evers, P. Schering, A. Greilich, G. S. Uhrig, M. Bayer und F. B. Anders, „Magnetic field dependence of the electron spin revival amplitude in periodically pulsed quantum dots“, *Physical Review B* **98**, 155318 (2018).
- [18] M. Y. Petrov, I. V. Ignatiev, S. V. Poltavtsev, A. Greilich, A. Bauschulte, D. R. Yakovlev und M. Bayer, „Effect of thermal annealing on the hyperfine interaction in InAs/GaAs quantum dots“, *Physical Review B* **78**, 045315 (2008).
- [19] P. S. Sokolov, M. Y. Petrov, T. Mehrstens, K. Müller-Caspary, R. A., D. Reuter und A. D. Wieck, „Reconstruction of nuclear quadrupole interaction in (In,Ga)As/GaAs quantum dots observed by transmission electron microscopy“, *Physical Review B* **93**, 045301 (2016).
- [20] M. Gaudin, „La fonction d’onde de bethe“, Masson, Paris (Masson, Paris, 1983).
- [21] J. Hackmann und F. B. Anders, „Spin noise in the anisotropic central spin model“, *Physical Review B* **89**, 045317 (2014).
- [22] H. Tal-Ezer und R. Kosloff, „An accurate and efficient scheme for propagating the time dependent schrödinger equation“, *The Journal of Chemical Physics* **81**, 3967 (2003).
- [23] R. Kosloff, „Propagation methods for quantum molecular dynamics“, *Annual Review of Physical Chemistry* **45**, 145 (1994).
- [24] A. Weiße, G. Wellein, A. Alvermann und H. Fehske, „The kernal polynomial method“, *Review of Modern Physics* **78**, 275 (2006).
- [25] K. G. Wilson, „The renormalization group: critical phenomena and the kondo problem“, *Review of Modern Physics* **47**, 773 (1975).

- 
- [26] S. R. White, „Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups“, *Physical Review B* **48**, 10345 (1993).
- [27] D. Stanek, C. Raas und G. S. Uhrig, „Dynamics and decoherence in the central spin model in the low-field limit“, *Physical Review B* **88**, 155305 (2013).
- [28] L. B. Gravert, P. Lorenz, C. Nase, J. Stolze und G. S. Uhrig, „Increased coherence time in narrowed bath states in quantum dots“, *Physical Review B* **94**, 094416 (2016).
- [29] D. Stanek, C. Raas und G. S. Uhrig, „From quantum-mechanical to classical dynamics in the central-spin model“, *Physical Review* **90**, 064301 (2014).
- [30] B. Fauseweh, P. Schering, J. Hüdepohl und G. S. Uhrig, „Efficient algorithms for the dynamic of large and infinite classical central spin models“, *Physical Review B* **96**, 054415 (2017).
- [31] I. A. Yugova, M. M. Glazov, E. L. Ivchenko und A. L. Efros, „Pump-probe faraday rotation and ellipticity in an ensemble of singly charged quantum dots“, *Physical Review B* **80**, 104436 (2009).
- [32] J. Fischer, W. A. Coisch, D. V. Bulaev und D. Loss, „Spin decoherence of a heavy hole coupled to nuclear spins in a quantum dot“, *Physical Review B* **78**, 155329 (2008).
- [33] S. Lee, P. von Allem, F. Oyafuso, G. Klimeck und K. B. Whaley, „Effect of electron-nuclear spin interactions for electron-spin qubits in InGaAs self-assembled quantum dots“, *Journal of Applied Physics* **97**, 043706 (2005).
- [34] W. A. Coish und J. Baugh, „Nuclear spins in nanostructures“, *Physica Status Solidi B* **246**, 2203 (2009).
- [35] J. Hackmann, P. Glasenapp, A. Greilich, M. Bayer und F. B. Anders, „Influence of the nuclear electric quadrupolar interaction on the coherence time of hole and electron spins confined in semiconductor quantum dots“, *Physical Review Letters* **115**, 207401 (2015).
- [36] L. Lombez, P.-F. Braun, X. Marie, P. Renucci, B. Urbaszek, T. Amand, O. Krebs und P. Voisin, „Electron spin quantum beats in positively charged quantum dots: nuclear field effects“, *Physical Review B* **75**, 195314 (2007).
- [37] U. B., X. Marie, A. Thierry, O. Krebs, P. Voisin, P. Maletinsky, A. Högele und A. Imamoglu, „Nuclear spin physics in quantum dots: an optical investigation“, *Reviews of Modern Physics* **85**, 79 (2013).
- [38] I. A. Yugova, A. Greilich, E. A. Zhukov, Y. D. R., M. Bayer, D. Reuter und A. D. Wieck, „Exciton fine structure in InGaAs/GaAs quantum dots revisited by pump-probe faraday rotation“, *Physical Review B* **75**, 195325 (2007).

- [39] P. Schering, J. Hüdepohl, G. S. Uhrig und B. Fauseweh, „Nuclear frequency focusing in periodically pulsed semiconductor quantum dots described by infinite classical central spin models“, *Physical Review B* **98**, 024305 (2018).
- [40] N. Jäschke, A. Fischer, E. Evers, V. V. Belykh, A. Greilich, M. Bayer und F. B. Anders, „Nonequilibrium nuclear spin distribution function in quantum dots subject to periodic pulses“, *Physical Review B* **96**, 205419 (2017).
- [41] J. R. Dormand und P. J. Prince, „A family of embedded Runge-Kutta formulae“, *Journal of Computational and Applied Mathematics* **6**, 19 (1980).
- [42] G. S. Uhrig, „Quantum coherence from periodic driving with laser pulses and decay“, (2019) [arXiv:1906.04283](https://arxiv.org/abs/1906.04283).

## Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich zunächst einmal bei Götz Uhrig für die Bereitstellung des Themas sowie die intensive Betreuung während der Bearbeitungszeit bedanken. Mein Dank gilt auch Ute Löw, die sich dazu bereit erklärt hat, als Zweitgutachterin zu fungieren. Ebenfalls möchte ich mich bei Alex Greilich für die Bereitstellung der in dieser Arbeit verwendeten Experimentaldaten bedanken.

Besonderen Dank möchte ich auch an meinen Bürokollegen Philipp Schering richten, der mir während der ganzen Bearbeitungszeit zu jeder Zeit seine Unterstützung angeboten und seinen Programmcode als Grundlage für diese Arbeit zur Verfügung gestellt hat. Die vielen Diskussionen über das Thema und auch das Korrekturlesen gegen Ende waren eine sehr große Hilfe. Fernab davon habe ich die Zeit am Lehrstuhl T1a sehr genossen und möchte mich bei allen Gruppenmitgliedern für die gegenseitige Unterstützung bedanken. Die Coffee-Breaks haben durchaus geholfen, sich noch einmal motivierter an die Arbeit zu setzen.

Mein besonderer Dank gilt natürlich auch meiner Familie, meiner Mitbewohnerin Hannah und meinen guten Freunden Lena, Leon, Leonie und Maria, die mich während der kompletten Bearbeitungszeit moralisch unterstützt haben und meine Höhen und Tiefen aushalten "durften und mussten". Auch bei Jonas möchte ich mich bedanken, der mich insbesondere in der Schlussphase der Arbeit auf positive Gedanken bringen konnte.



# Eidesstattliche Versicherung (Affidavit)

Name, Vorname  
(Last name, first name)

Matrikelnr.  
(Enrollment number)

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit/Masterarbeit\* mit dem folgenden Titel selbstständig und ohne unzulässige fremde Hilfe erbracht habe. Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie wörtliche und sinngemäße Zitate kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

I declare in lieu of oath that I have completed the present Bachelor's/Master's\* thesis with the following title independently and without any unauthorized assistance. I have not used any other sources or aids than the ones listed and have documented quotations and paraphrases as such. The thesis in its current or similar version has not been submitted to an auditing institution.

Titel der Bachelor-/Masterarbeit\*:  
(Title of the Bachelor's/ Master's\* thesis):

\*Nichtzutreffendes bitte streichen  
(Please choose the appropriate)

Ort, Datum  
(Place, date)

Unterschrift  
(Signature)

## Belehrung:

Wer vorsätzlich gegen eine die Täuschung über Prüfungsleistungen betreffende Regelung einer Hochschulprüfungsordnung verstößt, handelt ordnungswidrig. Die Ordnungswidrigkeit kann mit einer Geldbuße von bis zu 50.000,00 € geahndet werden. Zuständige Verwaltungsbehörde für die Verfolgung und Ahndung von Ordnungswidrigkeiten ist der Kanzler/die Kanzlerin der Technischen Universität Dortmund. Im Falle eines mehrfachen oder sonstigen schwerwiegenden Täuschungsversuches kann der Prüfling zudem exmatrikuliert werden. (§ 63 Abs. 5 Hochschulgesetz - HG - ).

Die Abgabe einer falschen Versicherung an Eides statt wird mit Freiheitsstrafe bis zu 3 Jahren oder mit Geldstrafe bestraft.

Die Technische Universität Dortmund wird gfls. elektronische Vergleichswerkzeuge (wie z.B. die Software „turnitin“) zur Überprüfung von Ordnungswidrigkeiten in Prüfungsverfahren nutzen.

Die oben stehende Belehrung habe ich zur Kenntnis genommen:

## Official notification:

Any person who intentionally breaches any regulation of university examination regulations relating to deception in examination performance is acting improperly. This offense can be punished with a fine of up to €50,000.00. The competent administrative authority for the pursuit and prosecution of offenses of this type is the chancellor of TU Dortmund University. In the case of multiple or other serious attempts at deception, the examinee can also be unenrolled, section 63, subsection 5 of the North Rhine-Westphalia Higher Education Act (*Hochschulgesetz*).

The submission of a false affidavit will be punished with a prison sentence of up to three years or a fine.

As may be necessary, TU Dortmund will make use of electronic plagiarism-prevention tools (e.g. the "turnitin" service) in order to monitor violations during the examination procedures.

I have taken note of the above official notification:\*\*

Ort, Datum  
(Place, date)

Unterschrift  
(Signature)

**\*\*Please be aware that solely the German version of the affidavit ("Eidesstattliche Versicherung") for the Bachelor's/ Master's thesis is the official and legally binding version.**