

НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

МОДЕЛЬ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СИЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ СО СПИН-КРОССОВЕРНОЙ СИСТЕМОЙ

Н.С. Буйнов, Н.А. Клиндухов
Витебск, ВГУ

Первое изучение LIESST-эффекта было сделано в работе Декуртинса в 1984 [1]. В статье авторы сообщили, что облучение кристаллов $[\text{Fe}(\text{ptz})_6](\text{BF}_4)_2$ электромагнитной волной в 530 нм в низкоспиновом состоянии при низкой температуре (20 К) позволяло перевести в возбужденное состояние со временем жизни свыше 10^6 сек. Это метастабильное состояние было отождествлено высокоспиновому состоянию $^5\text{T}_2$. В 1986 Хаузер доказал, что этот процесс может быть обратным (reverse-LIESST или обратный LIESST).

Предложенный McGarvey [2] механизм фотовозбуждения для $[\text{Fe}(\text{ptz})_6](\text{BF}_4)_2$, иллюстрированный на Рисунке 1, включает два последовательных этапа.

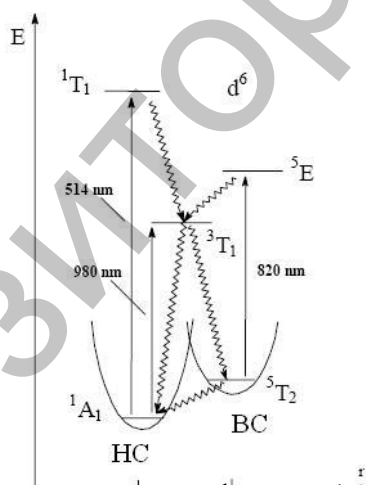


Рисунок 1. Диаграмма переходов при фотовозбуждении для $[\text{Fe}(\text{ptz})_6](\text{BF}_4)_2$

Облучение в полосе поглощения на длине 530 нм низкоспинового состояния $^1\text{A}_1$ переводит молекулярную систему на возбужденный уровень $^1\text{T}_1$. Далее система безизлучательно релаксирует к промежуточному состоянию $^3\text{T}_1$. Затем это состояние-посредник быстро и опять же безизлучательно переходит к метастабильному высокоспиновому состоянию $^5\text{T}_2$. Кроме того, возможен вариант более простой схемы перехода без посредников типа $^1\text{A}_1 \rightarrow ^3\text{T}_1 \rightarrow ^5\text{T}_2$ на длине волны 980 нм.

В итоге упрощенно влияние внешнего электромагнитного излучения на частоте поглощения спин-кроссоверной системы можно представить как изменение разницы в уровне энергии между высокоспиновым и низкоспиновым состояниями. Математически это можно описать с помощью гамильтониана «продольного» взаимодействия или так называемого драйвинга

$$H_{\text{int}} = -\varepsilon \cos wt \sum_l \sigma_l^z, \quad (1)$$

где матрицы Паули σ^z описывают высокоспиновые и низкоспиновые состояния отдельных молекул. Величина ε представляет собой амплитуду колебаний расстояний между уровнями и пропорциональна интенсивности внешнего излучения, w есть частота внешней электромагнитной волны.

Далее добавим гамильтониан, учитывающий взаимодействие спин-активной и фононной подсистем, полученный в предыдущих работах:

$$H' = -\Delta(T) \sum_l \sigma_l^z + \Omega_\sigma \sum_l \sigma_l^x + \sum_q \omega_q b_q^+ b_q + \sum_{lq} \gamma_{ql}^\sigma \sigma_l^z (b_q^+ + b_q), \quad (2)$$

Здесь $\Delta(T) = \Delta_0 - \frac{kT}{2} \ln g_{HS} / g_{LS}$ представляет собой зависящее от температуры расстояние между уровнями, которое содержит энергию поля лигандов Δ_0 и энтропийный член $(T/2) \ln(g_{HS}/g_{LS})$, где g_{LS} и g_{HS} эффективное вырождение низкоспинового и высокоспинового состояния соответственно; Ω – константа туннелирования, b_q и b_q^+ – обычные операторы рождения и уничтожения, ω_q представляет частоту q-ой нормальной моды, γ_{ql} – константы спин-решеточной связи. В итоге полный зависящий от времени гамильтониан примет вид:

$$\begin{aligned} H &= H' + H_{\text{int}} = \\ &= -(\Delta(T) + \varepsilon \cos wt) \sum_l \sigma_l^z + \Omega \sum_l \sigma_l^x + \sum_q \omega_q b_q^+ b_q + \sum_{lq} \gamma_{ql} \sigma_l^z (b_q^+ + b_q). \end{aligned} \quad (3)$$

В Марковском приближении и приближении нулевой гармоники для диагональных элементов матрицы плотности спиновой подсистемы $\langle \sigma_1 \dots \sigma_N / \rho(t) / \sigma_1 \dots \sigma_N \rangle = P(\{\sigma\}, t)$ получим основное кинетическое уравнение Глауберского типа:

$$\dot{P}(\{\sigma\}, t) = -P(\{\sigma\}, t) \sum_l \bar{W}_l(\sigma_l) + \sum_l \bar{W}_l(-\sigma_l) P(\sigma_1 \dots -\sigma_l \dots \sigma_N, t). \quad (4)$$

Здесь величина $\bar{W}_l(\sigma_l)$ представляет собой частоту перехода для l-того вседоспинового флипа спин-активной подсистемы со значения σ_l в $-\sigma_l$, в то время как остальные значения остаются неизменными. При этом частота перехода имеет вид бесконечного ряда:

$$\bar{W}_l(\sigma_l) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n^2 \left(\frac{A}{w} \right) W_l(E_l \sigma_l + nw), \quad (5)$$

где $J_n(x)$ – функция Бесселя 1-го рода, а

$$W_l(E_l \sigma_l + nw) = \Omega^2 \exp \left[-\frac{E_l \sigma_l + nw}{T} \right] \exp \left(-\sum_q \frac{4\gamma_{ql}^2}{\omega_q^2} \coth \left(\frac{\omega_q}{2T} \right) \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \exp [-2i\tau E_l \sigma_l - 2i\tau nw] \left\{ \exp \left[\sum_q \frac{4\gamma_{ql}^2}{\omega_q^2} \frac{\cos(\omega_q \tau)}{\sinh \left(\frac{\omega_q}{2T} \right)} \right] - 1 \right\} \right) \quad (6)$$

представляет собой по форме частоту перехода в отсутствие внешнего поля, однако, с заменой локального поля E_l

$$E_l = \Delta(T) + \sum_{l \neq m} J_{lm} \sigma_m$$

на $E_l + nw$.

В области низких температур частоту перехода можно переписать как

$$\overline{W}_l(E_l, \sigma_l) = \frac{J_0^2 \left(\frac{A}{w} \right) \Omega^2}{\omega_1^4} e^{\frac{-\omega_1}{T}} \sum_q \gamma_{ql}^4 \left[\cosh \left(\frac{E_l}{T} \right) - \sigma_l \sinh \left(\frac{E_l}{T} \right) \right] + b, \quad (7)$$

где $\omega_1 = \omega(q_1)$ соответствует частоте фононов, при которой спин-фононная связь максимальна, а константа b связана исключительно с влиянием внешнего излучения.

Подобные результаты были получены Букхеддаденым и коллегами [3] феноменологически.

В данной работе предложено описание взаимодействия внешней электромагнитной волны со спин-кроссоверной системой. За основу брался Изингоподобный гамильтониан для двухуровневой системы псевдо-спинов спин-активной части, включающий туннельные эффекты, фононы, взаимодействие между фононами и псевдоспинами, а также «продольное» взаимодействие с внешним полем. На основе предположения о слабости туннельных эффектов было получено основное кинетическое уравнение Глауберовского типа. Для области низких температур было получено выражение для частоты перехода.

ЛИТЕРАТУРА

1. Decurtins, S. Light-induced excited-spin-state trapping in iron(II) spin-crossover systems. Optical spectroscopic and magnetic susceptibility study / S. Decurtins, P. Gülich, K.M., Hasselbach, A. Hauser // *Inorg. Chem.* – 1985. – № 24. – P. 2174–2178
2. McGarvey, J.J. Photochemically-induced perturbation of the 1A ↔ 5T equilibrium in Fe11 complexes by pulsed laser irradiation in the metal-to-ligand charge-transfer absorption band / J.J. McGarvey, I. Lawthers // *J. Chem. Soc., Chem. Comm.* – 1982. – P. 906–907.
3. Boukheddaden, K. Dynamical model for spin-crossover solids. II. Static and dynamic effects of light in the mean-field approach / K. Boukheddaden, I. Shteto, B. Hôo, F. Varret // *Phys. Rev. B.* – 2000. – Vol. 62, № 22. – P. 14806–14817.

ПЕРЕХОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ЦЕПЯХ

В.И. Жидкевич

Витебск, ВГУ

Процессы, возникающие в различных физических системах (электрических, механических, тепловых и др.) при переходе от одного установившегося режима к другому, называются переходными, или неустановившимися, процессами.

В электрической цепи переходный процесс возникает при изменении режима ее работы: включение или отключение цепи, изменение параметров элементов r , L или C . Указанные действия, вызывающие переходные процессы в электрических цепях, получили название коммутации [1, 2].

Можно считать, что коммутация цепи производится мгновенно, т.е. на включение, выключение или переключение цепи время не расходуется. Тем не менее, переход от исходного режима работы цепи к последующему установившемуся процессу происходит не мгновенно, а в течение некоторого времени. Объясняется это тем, что каждому состоянию цепи, обладающей индуктивностью L и