

УДК 538.9+539.189.1

ЭФФЕКТ ДИНАМИЧЕСКОЙ ЛОКАЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОНА В ДИМЕРНОМ НАНОКЛАСТЕРЕ

О. В. Ялтыченко

Институт прикладной физики АН Республики Молдова,
5, ул. Академическая, г. Кишинев, MD-2028, Республика Молдова
E-mail: oialt@mail.ru

ЭФФЕКТ ДИНАМИЧЕСКОЙ ЛОКАЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОНА В ДИМЕРНОМ НАНОКЛАСТЕРЕ

О. В. Ялтыченко

Аннотация. Предложена квантово-механическая модель описывающая локализационные свойства электрона в димерном нанокластере, находящемся во внешнем постоянном электрическом поле и взаимодействующем со средой окружения, имеющей диссипативные свойства “омического типа”, которая учтена как колебательный термостат. Показано, что внешнее постоянное электрическое поле усиливает локализационные свойства системы, а взаимодействие со средой окружения, в приближении гармонического термостата позволяет параметрически менять степень локализации электрона в системе. Выявлены режимы локализации и делокализации электрона и условия переключения между ними. Используемая модель позволяет описать локализационные свойства электрона в димерном нанокластере в зависимости от соотношения основных параметров системы, а также указывает способы параметрического управления этими свойствами, что имеет несомненный интерес для молекулярной и сенсорной электроники.

Ключевые слова: димерный нанокластер, локализация электрона, колебательный термостат, электрическое поле

ЕФЕКТ ДИНАМІЧНОЇ ЛОКАЛІЗАЦІЇ ЕЛЕКТРОНА В ДІМЕРНОМУ НАНОКЛАСТЕРІ

О. В. Ялтыченко

Анотація. Запропонована квантово-механічна модель описує локалізаційні властивості електрона в димерному нанокластері, що знаходиться в зовнішньому постійному електричному полі і що взаємодіє з середовищем оточення, яке має дисипативні властивості “омічного типу”, яка врахована як коливальний термостат. Показано, що зовнішнє постійне електричне поле підсилює локалізаційні властивості системи, а взаємодія з середовищем оточення в наближенні гармонійного термостата дозволяє параметрично міняти міру локалізації електрона в системі. Виявлені режими локалізації і делокалізації електрона і умови перемикання між ними. Запропонована модель дозволяє описати локалізаційні властивості електрона в димерному нанокластері залежно від співвідношення основних параметрів системи, а також вказує способи параметричного управління цими властивостями, що має безперечний інтерес для молекулярної і сенсорної електроніки.

Ключові слова: димерний нанокластер, локалізація електрона, коливальний термостат, електричне поле

DYNAMIC LOCALIZATION EFFECT OF THE ELECTRON IN THE DIMER'S NANOCUSTER

O. V. Yaltychenko

Abstract. The quantum-mechanical model, which describes localized properties of the electron in the dimer's nanocluster was studied. In this consideration the dimer has been placed in an external constant electric field and was interacting with an environment having dissipative properties of "ohmic type" which is taken into account as vibrational bath. It is shown, that external constant electric field only strengthens localized properties of system, but the interaction with vibrational bath, in approach of harmonic bath allows parametrically to change the degree of the electron localization in the system. The regimes of the electron localization and delocalization and conditions of the switching between them are revealed. The used model allows to describe the localized properties of the electron in the dimer's nanocluster for different parameters of the system, and also specifies ways of parametrical management by these properties that have doubtless interest for the molecular and sensors electronics.

Keywords: dimer's nanocluster, electron's localization, vibrational bath, electric field

Введение

Изучение явления электронной локализации-делокализации вообще, и в частности в молекулярных кластерных системах является одной из центральных проблем квантовой химии, молекулярной и сенсорной электроники и тесно связано с созданием на их основе приборов, таких как сенсоры, молекулярные выпрямители, ключи и др. [1-3]. Весьма перспективными, в этом смысле, являются кластеры смешанной валентности, металлоорганические нанокластеры, простейший представитель которых — димерный нанокластер [4,5,6]. При наличии двух или более идентичных центров в нанокластерах локализация электрона на одном из центров может приводить к конформационной перестройке окружения, тем самым, затрудняя перенос электрона на другие центры. Проблема локализации-делокализации лишнего электрона и электронно-колебательное взаимодействие в молекулярных кластерных системах тесно взаимосвязаны и степень локализации-делокализации электрона сильно зависит от соотношения между параметрами электрон-колебательного взаимодействия, величины расщепления энергии электронных состояний центров и других параметров системы. Наряду с полной локализацией электрона на одном из центров системы, обязанной электронно-колебательному взаимодействию, возможна также частичная делокализация электрона. Чем больше конформационная перестройка, производимая дополнительным электроном на данном центре, тем глубже по-

тенциальная яма, которую сам себе создает этот электрон и меньше вероятность перехода его на другой центр, т.е. делокализация электрона. Известно, что молекулярная система может осуществлять перенос электронов, если она легко принимает и отдает электроны. Для этого электрон должен быть не локализованным на одном центре, а делокализоваться по возможно большему числу центров, при этом, сильно не поднимая энергию системы. Такая способность системы характеризуется параметром, называемым электронной емкостью системы, равной отношению величины заряда перенесенного в систему к величине энергии на которую изменилась энергия в системе [7]. Другими словами, большая электронная емкость в системе это способность системы к существенной делокализации электрона. Именно по этой причине металлоорганические комплексы, в которых ионы металла встроены в полимерную матрицу, характеризующуюся π -электронным сопряжением, а значит и высокой степенью делокализации электрона, полученного от иона металла являются хорошей транспортной средой и находят своё применение в молекулярной и сенсорной электронике [8]. Известно, что наложение внешних электрических полей существенным образом влияет на свойства молекулярных систем [9], меняя в частности их транспортные свойства, изменяя степень локализации электрона в них [10,11].

Динамика нестационарного состояния электрона в димерном нанокластере, изучена в [11]. Цель данной работы теоретически исследовать перенос электрона в димерном нанокласте-

ре, взаимодействующем со средой окружения, которая учтена как колебательный термостат, имеющий диссипативные свойства “омического типа” и учесть взаимодействие с постоянным электрическим полем.

На основе метода квантово-механических уравнений движения в приближении самосогласованного поля реализована схема расчета временных зависимостей средних значений физических величин, описывающих кинетику переноса электрона в димерном нанокластере.

Описание модели

Рассмотрим димерный кластер, состоящий из двух эквивалентных центров с одним “лишним” электроном. Система приготовлена так, что электрон в начальный момент времени локализован на первом центре. Предполагаем, что электрон, находясь на каждом из центров димера, взаимодействует только с полносимметричным колебанием $Q_i (i=1,2)$ ближайшего окружения и может туннелировать с центра на центр.

Введем нормальные координаты:

$$Q = (Q_1 + Q_2) / \sqrt{2}, \quad q = (Q_1 - Q_2) / \sqrt{2}. \quad (1)$$

Первая из двух нормальных координат исключена из рассмотрения как полносимметричная координата, умноженная на единичную электронную матрицу. Исходя из сделанных допущений, кинетические свойства димерного нанокластера могут быть описаны с помощью модельного гамильтониана двухуровневой электронной системы, находящейся в постоянном электрическом поле, в котором вибронная мода взаимодействует с модами колебательно-го термостата. Модельный гамильтониан может быть представлен в виде:

$$\begin{aligned} H = & (p^2 + q^2) / 2 + v(a_1^+ a_2 + a_1 a_2^+) + \\ & + gq(a_1^+ a_1 - a_2^+ a_2) + \frac{1}{\hbar\omega} \times \\ & \times \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2 x_j^2}{2} + c_j x_j q \right\} + \\ & + (\vec{d}\vec{\varepsilon})(a_1^+ a_1 - a_2^+ a_2) + \bar{\mu}(q)\bar{\varepsilon}(a_1^+ a_1 - a_2^+ a_2), \quad (2) \end{aligned}$$

где a_i, a_i^+ — операторы рождения и уничтожения электрона на i -ом центре, p, q — операторы канонически сопряженных импульса и координаты локальной вибронной моды q ,

константы v и g — константы туннелирования электрона с центра на центр в димере и электронно-колебательного взаимодействия, соответственно. Для колебательного термостата использована модель типа Калдейра-Леггета [12], при этом величины $p_j, x_j, m_j, \omega_j, c_j$ — соответственно, импульс, координата, масса, частота и константа связи с выделенной кластерной модой для j -ой моды термостата. Два последних слагаемых в гамильтониане описывают взаимодействие димерного кластера с постоянным электрическим полем $\vec{\varepsilon}$, направленным вдоль оси димера. Предполагается, что локализуясь на каждом из двух центров димера, электрон создаёт ненулевой дипольный момент в системе, так что $(\vec{d}_1\vec{\varepsilon}) = -(\vec{d}_2\vec{\varepsilon}) = (\vec{d}\vec{\varepsilon})$. Более того, присутствие постоянного электрического поля наводит (индуцирует) дополнительный дипольный момент, координатная зависимость которого может быть линейной, квадратичной в зависимости от типа локальной симметрии в системе. Выберем эту зависимость линейной $\mu(q) = \mu_1 q + \dots$, поскольку учёт квадратичного члена лишь несущественным образом переопределит собственную частоту системы. Наведенный электрическим полем дипольный момент, прежде всего связан с поляризацией среды окружения (последнее слагаемое в (2)). Все параметры в гамильтониане (2) представлены в единицах $\hbar\omega$, где $\hbar\omega$ — квант энергии колебательной кластерной моды. Важно отметить, что в гамильтониане (2) третье слагаемое, отвечающее за электронно-колебательное взаимодействие в системе и последнее слагаемое — за взаимодействие наведенного в системе дипольного момента с постоянным электрическим полем могут быть объединены. Это приводит к переопределению константы электронно-колебательного взаимодействия. Связь вибронной моды со степенями свободы термостата предполагается линейной. Для большей наглядности используемой модели, обсудим вид адиабатических потенциалов двухуровневой электронной системы, смешиваемой одним неполносимметричным колебанием, которые могут быть представлены следующим выражением $\varepsilon_{\pm}(q) = q^2 / 2 \pm \sqrt{v^2 + [(g + \mu_1)q + (\vec{d}\vec{\varepsilon})]^2}$.

Случай сильного и слабого электронно-колебательного взаимодействия в отсутствие электрического поля подробно обсуждаются в [11]. В случае, представленном на рис.1,

который соответствует учёту взаимодействия димерного кластера с постоянным электрическим полем двухъямный лист адиабатического потенциала несимметричен и в системе два устойчивых положения равновесия (минимумы на адиабатическом потенциале), только неэквивалентные в отличие от случая сильного электронно-колебательного взаимодействия в отсутствие внешнего электрического поля.

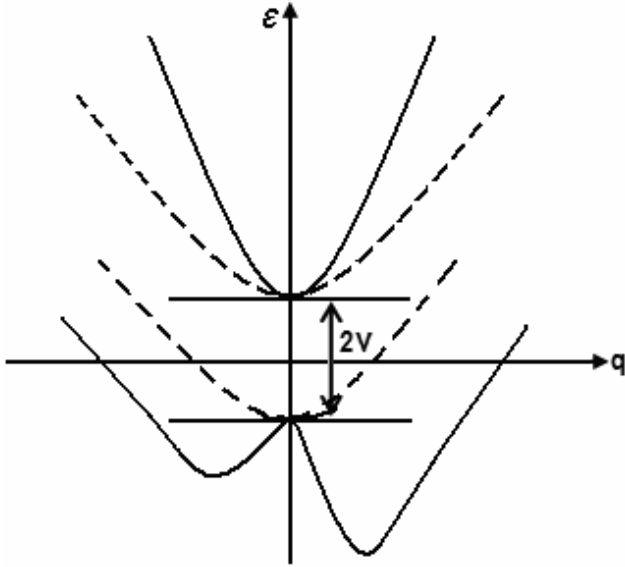


Рис. 1. Схематическое изображение адиабатических потенциалов двухуровневой вибронной системы для случая $g/v > 1$ в присутствии электрического поля

Для удобства дальнейших рассуждений перейдём от представления операторов вторичного квантования к представлению матриц Паули $\sigma_z, \sigma_x, \sigma_y$, что вполне оправдано для двухуровневых электронных систем. Тогда гамильтониан (2) может быть переписан в следующем виде

$$H = (p^2 + q^2) / 2 + v\sigma_x + gq\sigma_z + \frac{1}{\hbar\omega} \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j\omega_j^2 x_j^2}{2} + c_j x_j q \right\} + (\bar{d}\bar{\varepsilon})\sigma_z + \bar{\mu}(q)\bar{\varepsilon}\sigma_z. \quad (3)$$

Используя уравнения движения Гейзенберга для средних значений физических величин

$$\frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} = i\langle [H, A] \rangle, \quad (4)$$

и принимая во внимание, что система приготовлена так, что в начальный момент времени

электрон локализован на первом из двух центров, а колебательная подсистема имеет вид смещенного на величину g осциллятора:

$$\psi(0) = a_1^+ |0\rangle |n\rangle_g \quad (5)$$

получена система зацепляющихся дифференциальных уравнений относительно средних значений физических величин в приближении самосогласованного поля:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \sigma_z(t) \rangle}{dt} &= 2v\langle \sigma_y(t) \rangle \\ \frac{d\langle \sigma_y(t) \rangle}{dt} &= -2v\langle \sigma_z(t) \rangle + \\ &+ 2(g + \mu_1 \varepsilon)\langle q(t) \rangle \langle \sigma_x(t) \rangle + 2(\bar{d}\bar{\varepsilon})\langle \sigma_x(t) \rangle \\ \frac{d\langle \sigma_x(t) \rangle}{dt} &= -2(g + \mu_1 \varepsilon)\langle q(t) \rangle \langle \sigma_y(t) \rangle - \\ &- 2(\bar{d}\bar{\varepsilon})\langle \sigma_y(t) \rangle \\ \frac{d\langle q(t) \rangle}{dt} &= \langle p(t) \rangle \\ \frac{d\langle p(t) \rangle}{dt} &= -\langle q(t) \rangle - (g + \mu_1 \varepsilon)\langle \sigma_z(t) \rangle - \\ &- \frac{1}{\hbar\omega} \sum_{j=1}^N c_j \langle x_j(t) \rangle \end{aligned} \quad (6)$$

с начальными условиями

$$\begin{aligned} \langle \sigma_z(0) \rangle &= 1, \langle \sigma_x(0) \rangle = 0, \langle \sigma_y(0) \rangle = 0, \\ \langle q(0) \rangle &= g, \langle p(0) \rangle = 0. \end{aligned}$$

Здесь $\langle \sigma_z(t) \rangle, \langle \sigma_x(t) \rangle, \langle \sigma_y(t) \rangle$ — средние значения матриц Паули $\sigma_{z,x,y}(t) = e^{-i\hat{H}t} \sigma_{z,x,y} e^{i\hat{H}t}$, а $\langle q(t) \rangle, \langle p(t) \rangle$ — средние значения координаты и импульса выделенной колебательной моды, $\langle x_j(t) \rangle$ — среднее значение координаты j -ой колебательной моды гармонического термостата.

Для того чтобы исключить из системы (6) переменные, связанные со степенями свободы колебательного термостата воспользуемся решением уравнения для гармонического осциллятора с вынуждающей силой [13-14]:

$$\begin{aligned} x_j(t) &= x_j(0) \cos(\omega_j t) + p_j(0) \sin(\omega_j t) - \\ &- \frac{c_j}{m_j \omega_j} \int_0^t d\tau \sin(\omega_j(t-\tau)) q(\tau). \end{aligned} \quad (7)$$

Взяв интеграл в (7) по частям и сделав далее приближение Маркова $\dot{q}(\tau) \rightarrow \dot{q}(t)$, получим следующее выражение:

$$\langle x_j(t) \rangle = -\frac{c_j}{m_j \omega_j} \langle q(t) \rangle - q(0) \cos(\omega_j t) - \frac{c_j}{m_j \omega_j^2} \langle p(t) \rangle \sin(\omega_j t). \quad (8)$$

Далее воспользуемся следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N \frac{c_j^2}{m_j \omega_j} \langle q(t) \rangle - q(0) \cos(\omega_j t) &= \\ = \int_0^{\omega_m} d\omega' I(\omega') / (\pi \omega') (q(t) - q(0) \cos(\omega' t)), \\ \sum_{j=1}^N \frac{c_j^2}{m_j \omega_j^2} \sin(\omega_j t) &= \int_0^{\omega_m} d\omega' I(\omega') / (\pi \omega'^2) \sin(\omega' t) \quad (9) \\ I(\omega') &= \pi \sum_{j=1}^N c_j^2 \delta(\omega' - \omega_j) / m_j. \end{aligned}$$

Случай, когда $I(\omega') = \gamma \omega'$ соответствует линейной спектральной плотности в колебательном термостате. Это соответствует учёту взаимодействия вибронной кластерной моды только с низкочастотными акустическими фонами термостата. Взаимодействие с колебательным термостатом такого типа позволяет учесть диссипативные свойства сред с так называемым “омическим типом сопротивления” [14].

Тогда:

$$\sum_{j=1}^N c_j \langle x_j(t) \rangle = \gamma \langle q(t) \rangle + \gamma \langle p(t) \rangle Si(\omega_m), \quad (10)$$

где $Si(z) = \int_0^z \frac{\sin t}{t} dt$.

Подстановка (10) в последнее уравнение системы (6) позволяет исключить степени свободы колебательного термостата. Сделав такую подстановку в (6) и рассмотрев последние два уравнения в системе (6), можно записать уравнение движения для выделенной кластерной моды в виде:

$$\begin{aligned} \langle q(t) \rangle'' + (1 + \gamma) \langle q(t) \rangle + \gamma Si(\omega_m) \langle q(t) \rangle' &= \\ = -(g + \mu_1 \varepsilon) \langle \sigma_z(t) \rangle. \quad (11) \end{aligned}$$

Из сравнения (11) с уравнением для гармонического осциллятора с затуханием и зависящей от времени вынуждающей силой следует, что параметр γ , появившийся после исключения колебательных степеней свободы термостата определяет константу затухания в уравнении движения выделенной кластерной моды

и несколько переопределяет её собственную частоту. Изменения собственной частоты кластерной моды в дальнейшем будем считать не существенными. Параметры электронно-колебательного взаимодействия и взаимодействия с внешним электрическим полем входят в правую часть (11), т.е. определяют вынуждающую силу в уравнении для выделенной кластерной моды.

Используя метод Рунге-Кутты, система (6) численно решена для некоторых значений параметров модельной системы, которые представлены в единицах $\hbar\omega$, где $\hbar\omega$ — квант энергии колебательной кластерной моды. Для изучения кинетики переноса электрона, первоначально локализованного на первом из центров димера, исследуем временные зависимости вероятности обнаружения электрона на первом и втором центрах, которые имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} P_1(t) &= (1 + \langle \sigma_z(t) \rangle) / 2; \\ P_2(t) &= (1 - \langle \sigma_z(t) \rangle) / 2. \end{aligned} \quad (11)$$

Обсуждение результатов и выводы

На рисунках 2-4 представлена временная зависимость вероятности обнаружения электрона на первом центре нанодимера $P_1(t)$ для различных значений параметров системы. Параметры модельной системы $(\vec{d}\vec{\varepsilon}) = 0.7; 1.7; 4.7$, $\mu_1 \varepsilon = 0.15$ выбраны таким образом, что для дипольных моментов порядка $d \approx 1D$ и частоте выделенной кластерной моды соответствующей длинноволновому акустическому фону напряженность внешнего электрического поля находится в диапазоне $\sim 10^3 - 10^4$ В/см. Значения констант туннелирования электрона с центра на центр и электронно-колебательного взаимодействия выбраны также в единицах $\hbar\omega$. В зависимости от соотношения этих двух параметров выделяются три наиболее важных случая: сильного, промежуточного и слабого электронно-колебательного взаимодействия.

Временные зависимости вероятности обнаружения электрона на первом центре нанодимера $P_1(t)$, представленные на рисунках 2а) и 2б), соответствуют случаю слабого электронно-колебательного взаимодействия, когда $g / v < 1$. Из сравнения рисунков 2а) и 2б), которые приведены для константы связи со степенями свободы термостата $\gamma = 0; 0.25$ при прочих одинаковых параметрах системы, можно сделать выводы:

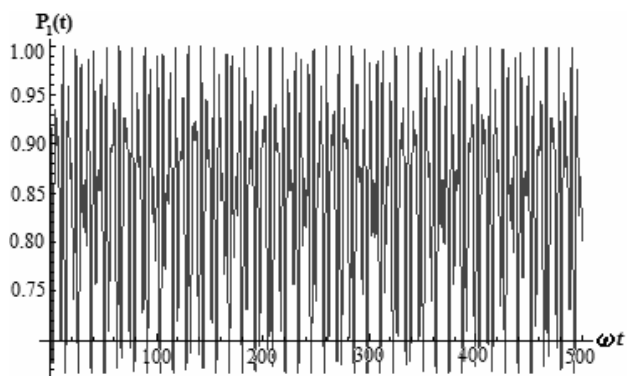


Рис.2.а). Временная зависимость вероятности обнаружения электрона на первом центре димерного кластера $P_1(t)$ для $g = 0.25$, $\nu = 0.5$, $(\bar{d}\bar{\epsilon}) = 0.7$, $\mu_1\epsilon = 0.15$ и $\gamma = 0$

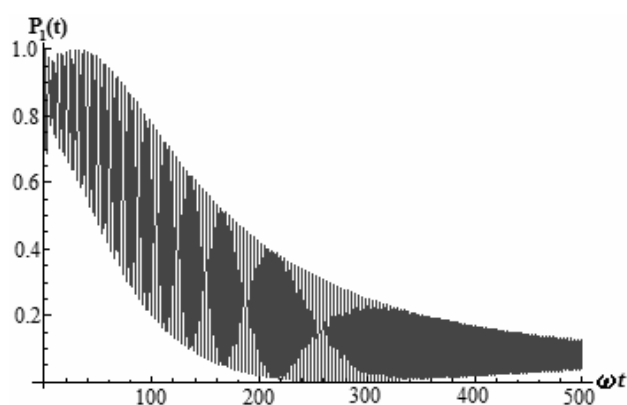


Рис.2.б). Временная зависимость вероятности обнаружения электрона на первом центре димерного кластера $P_1(t)$ для $g = 0.25$, $\nu = 0.5$, $(\bar{d}\bar{\epsilon}) = 0.7$, $\mu_1\epsilon = 0.15$ и $\gamma = 0.25$

1) так уже в случае слабого электронно-колебательного взаимодействия влияние постоянного электрического поля существенным образом локализует электрон (рисунок 2а)), что в отсутствие электрического поля возможно только для сильного электрон-колебательного взаимодействия. Вероятность обнаружить электрон на первом центре осциллирует около значения 0.85;

2) учет влияния среды окружения (случай $\gamma = 0.25$) на временное поведение электрона в нанодимере, в присутствии электрического поля и тех же значениях остальных параметров системы переводит систему из состояния локализации на первом центре димера к состоянию локализации на втором центре, что следует из рисунка 2б).

На рисунке 3а)-3б) представлена та же временная зависимость для случая промежуточного значения электрон-колебательного взаимодействия и различных значений величины $(\bar{d}\bar{\epsilon})$,

характеризующей энергию взаимодействия электронной подсистемы с внешним постоянным электрическим полем, при фиксированных значениях остальных параметров системы. Из сравнения рисунков 3а) и 3б) следует, что изменение величины энергии взаимодействия с постоянным электрическим полем $(\bar{d}\bar{\epsilon})$ от значения 0.7 к значению 1.7, может перевести систему из режима локализации электрона на втором центре в режим локализации на первом центре.

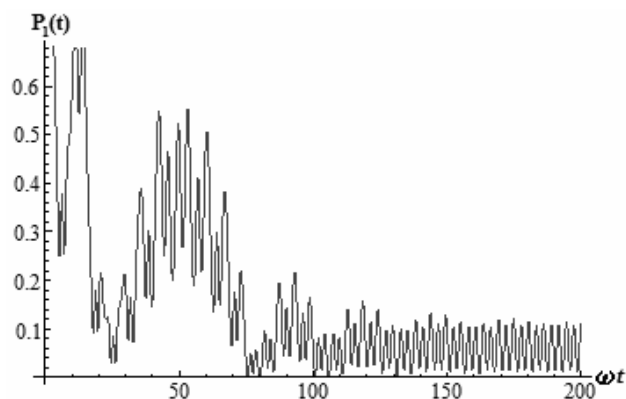


Рис.3.а). Временная зависимость вероятности обнаружения электрона на первом центре димерного кластера $P_1(t)$ для $g = 0.52$, $\nu = 0.25$, $(\bar{d}\bar{\epsilon}) = 0.7$, $\mu_1\epsilon = 0.15$ и $\gamma = 0.025$

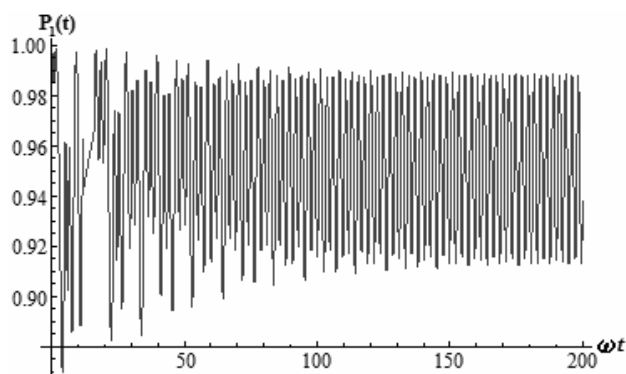


Рис.3.б). Временная зависимость вероятности обнаружения электрона на первом центре димерного кластера $P_1(t)$ для $g = 0.52$, $\nu = 0.25$, $(\bar{d}\bar{\epsilon}) = 1.7$, $\mu_1\epsilon = 0.15$ и $\gamma = 0.025$

Временные зависимости вероятности обнаружения электрона на первом центре нанодимера, приведенные на рисунке 4 демонстрируют реализации возможных режимов локализации-делокализации электрона в системе, в случае сильного электронно-колебательного взаимодействия $g/\nu > 1$ в зависимости от соотношения параметров $(\bar{d}\bar{\epsilon}) = 0.7; 1.7; 4.7$ и $\gamma = 0; 0.025$. Рисунок 4а), показывает, что в отсутствие вза-

имодействия с колебательным термостатом электрическое поле просто запирает электрон, первоначально локализованный на первом центре. Из рисунков 4б) -4г) следует, что учёт взаимодействия со степенями свободы термостата в присутствии электрического поля меняет степень локализации электрона. Согласованное изменение обоих параметров, отвечающих как за взаимодействие системы с электрическим полем, так и за взаимодействие с колебательным термостатом позволяет навязать системе требуемые локализационные свойства.

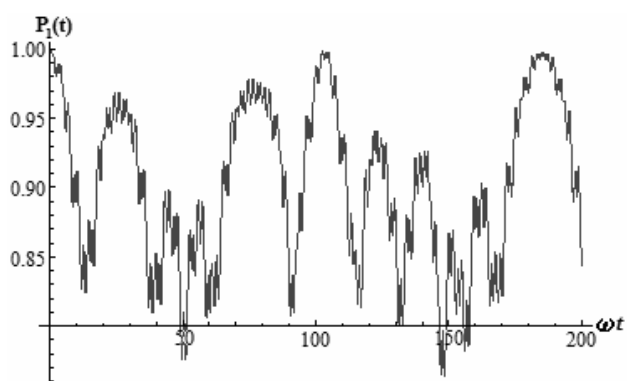


Рис.4.а). Временная зависимость вероятности обнаружения электрона на первом центре димерного кластера $P_1(t)$ для $g = 1.01$, $\nu = 0.1$, $(\bar{d}\bar{\epsilon}) = 0.7$, $\mu_1\epsilon = 0.15$ и $\gamma = 0$

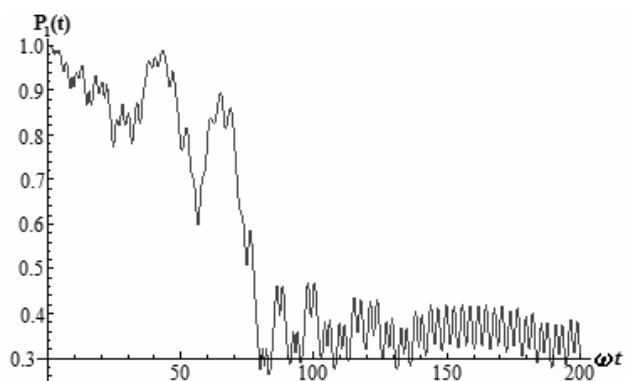


Рис.4.б). Временная зависимость вероятности обнаружения электрона на первом центре димерного кластера $P_1(t)$ для $g = 1.01$, $\nu = 0.1$, $(\bar{d}\bar{\epsilon}) = 0.7$, $\mu_1\epsilon = 0.15$ и $\gamma = 0.025$

Из работ [4,11] следует, что в случае сильного электронно-колебательного взаимодействия в отсутствие электрического поля кинетика переноса электрона в димерном нанокластере такова, что система имеет сильные локализационные свойства, тогда как случай слабого электронно-колебательного взаимо-

действия соответствует режиму “квазисвободного электрона”. Данное рассмотрение показывает, что учёт взаимодействия со средой окружения (колебательный термостат) и внешним постоянным электрическим полем в рамках описанной модели приводит к существенным изменениям локализационных свойств димерного нанокластера. Так для случая слабого электронно-колебательного взаимодействия, представленного на рис.2.а). для параметров $g = 0.25$, $\nu = 0.5$, $(\bar{d}\bar{\epsilon}) = 0.7$, $\mu_1\epsilon = 0.15$ и $\gamma = 0$ вероятность обнаружения электрона на первом центре димерного кластера $P_1(t)$ осциллирует около значения 0.85, т.е. электрон с высокой долей вероятности локализован на первом центре. Такой режим переноса электрона свойственен системе, в отсутствие взаимодействия с электрическим полем только для случая сильного электронно-колебательного взаимодействия когда $g / \nu > 1$.

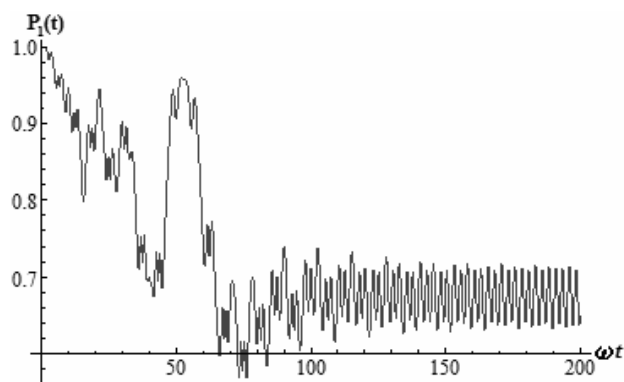


Рис.4.в). Временная зависимость вероятности обнаружения электрона на первом центре димерного кластера $P_1(t)$ для $g = 1.01$, $\nu = 0.1$, $(\bar{d}\bar{\epsilon}) = 1.7$, $\mu_1\epsilon = 0.15$ и $\gamma = 0.025$

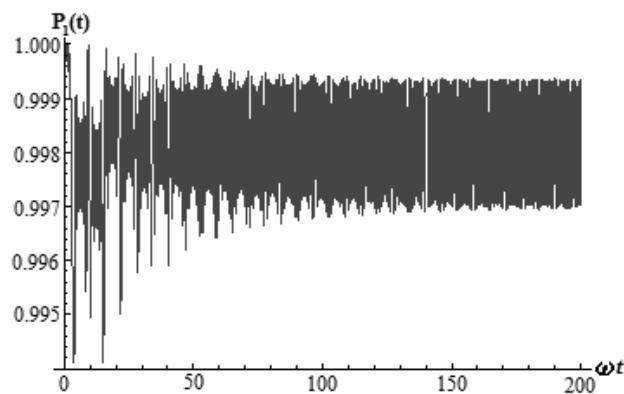


Рис.4.г). Временная зависимость вероятности обнаружения электрона на первом центре димерного кластера $P_1(t)$ для $g = 1.01$, $\nu = 0.1$, $(\bar{d}\bar{\epsilon}) = 4.7$, $\mu_1\epsilon = 0.15$ и $\gamma = 0.025$

В рамках рассмотренной двухуровневой модели учет взаимодействия димерного нанокластера с внешним постоянным электрическим полем приводит, во-первых, к переопределению константы электронно-колебательно-го взаимодействия и, во-вторых, к отстройке от резонанса локальных уровней энергии для центров димера в двухъямном потенциале. Отсутствие резонансного уровня энергии в двухъямном потенциале существенно уменьшает вероятность туннелирования электрона, состояние электрона квазистационарно. Однако понижение барьера (смотри рис.1) делает возможным надбарьерный переход с одного центра локализации на другой. Как известно, это возможно только за счёт взаимодействия с третьим телом, в данном случае с колебательным термостатом. Колебательный термостат в целом имеет диссипативные свойства, но при реализации условия резонанса жесткой кластерной моды и мягких мод термостата малая подсистема (димерный нанокластер) с определённой вероятностью может получить необходимую для надбарьерного перехода порцию энергии. Тогда электрон из состояния локализации на первом из центров димера переходит в состояние локализации на втором центре. Важно отметить, что увеличение интенсивности внешнего электрического поля увеличивает степень отстройки от резонанса локальных уровней энергии. Таким образом, взаимодействие димерного нанокластера с колебательным термостатом и внешним электрическим полем одновременно позволяет менять степень и тип локализации электрона. Например, переход от режима электрона локализованного на первом центре к режиму локализации электрона на втором центре для $g = 0.25$, $\nu = 0.5$, $(\vec{d}\vec{\epsilon}) = 0.7$, $\mu, \epsilon = 0.15$ и $\gamma = 0 \rightarrow 0.25$ (рис.2). И наоборот, переход от режима локализации электрона на втором центре нанокластера к режиму локализации на первом центре для $g = 0.52$, $\nu = 0.25$, $\mu, \epsilon = 0.15$ и $\gamma = 0.025$ и $(\vec{d}\vec{\epsilon}) = 0.7 \rightarrow 1.7$ (рис.3).

Нелинейные электронные свойства димерного нанокластера и возможность параметрически с помощью внешних параметров (взаимодействие с внешним постоянным электрическим полем, взаимодействие со средой окружения) влиять на локализационные свой-

ства системы, выделяет такого рода кластерные системы, как класс систем, которые потенциально могут быть использованы как активные элементы устройств молекулярной и сенсорной электроники.

Литература

1. Molecular Electronic Devices, Amsterdam.: ed.by Carter F.L. et al, Elsevier. — 1988.
2. Симон Ж., Андре Ж. — Ж., Молекулярные полупроводники. — М: Мир, 1988. — 344 с.
3. Шальве О., Додель Р., Мальрье Ж. — П. Локализация и делокализация в квантовой химии. Т.1 Атомы и молекулы в основном состоянии. — М: Мир, 1978. — 410с.
4. Kenkre V. and Wu H. Time evolution of the nonlinear quantum dimer // Phys.Rev.B. — 1989. — v.39, n.10. — p.6907-6913.
5. Rice M.J. Towards the experimental determination of the fundamental microscopic parameters of organic ion-radical compounds // Solid State Com. — 1979. — v.31, n.2. — p.93-98.
6. Choukroun Robert and Lorber Christian. Adventures in Vanadocene Chemistry // Eur. J.Inorg.Chem. — 2005. — v.23. — p.4683-4692.
7. Берсукер И.Б. Эффект Яна-Теллера и вибронные взаимодействия в современной химии. -М: Наука, 1987. — 344 с.
8. Yaltychenko O.V., Kanarovskii E.Yu. Electron transfer in the molecular complex of Donor-polymer-acceptor. // Analele Universitatii Bucuresti.Chimie. — 2009. — v.1. — p.9-13.
9. Глушков А.В., Атом в электромагнитном поле. — Киев: КНТ -2005. — 450 с.
10. Dunlap D.H. and Kenkre V.M. Dynamic localization a charged particle moving under influence of an electric field.// Phys.Rev.B. — 1986. — v.34. — n.6. — p.3625-3633.
11. Yaltychenko O.V., Kanarovskii E.Yu. Dynamics of the nonstationary state of an electron in a dimer nanocluster.// Surface Engineering and Applied Electrochemistry. — 2009. — v.45. — No.4. — p.55-61.
12. Nitzan A. and Silbey R. Relaxation in a simple quantum system // J. Chem. Phys. — 1974. — v.60, n.10. — p.4070-4075.
13. Бидерман В.Л. Теория механических колебаний. — М: Высшая школа, 1980. — 408с.
14. Steffen Thomas and Tanimura Yoshitaka. Two-Dimensional Spectroscopy for Harmonic Vibrational Modes with Nonlinear System-Bath Interactions // J. Phys. Soc. of Japan. — 2000. — v.69, n.9. — p.3115-3132.