

## ДЕЯКІ БАЗИСНІ МОДЕЛІ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ МАКРОМОЛЕКУЛ ДЛЯ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ ТА НАНОФОТОНІКИ. ОДНОНАПРАВЛЕНИЙ ЕКСИТОННИЙ ПРОВІДНИК

*У статті розглянуто модель функціональної макромолекули, ієрархія енергетичних рівнів ланок якої сприяє виникненню направлено руху екситонів при збудженні першої ланки. Запропоновано математичну модель цього процесу, що враховує не лише втрати кількості збуджень за рахунок їх спонтанної дезактивації, але також за рахунок зворотного екситонного струму. Представлена схема розрахунків дає можливість оцінити відносну кількість екситонів, що досягають кінцевої ланки макромолекули за одиницю часу.*

### **Вступ**

Сьогодні, коли дедалі більше стає зрозумілим, що традиційна напівпровідникова електроніка в своєму розвитку досягає насичення, спричиненого досягненням критичної межі в мініатюризації базисних елементів, дослідження в

галузі наноелектроніки стають особливо актуальними. Від піонерських напівфантастичних ідей Картера [1,2] вже зроблено значний крок до розрахунку [3], створення та експериментального вимірювання [4] реальних характеристик систем молекулярного масштабу, що мають відігравати роль базисних елементів наноелектроніки.

Поряд з напрямом зі створення наноелектронних пристроїв, що функціонують за рахунок електронних процесів та керування ними електричними та магнітними полями, розробляються ідеї використання процесів перенесення електронних збуджень, поширення яких детерміновано специфікою енергетичної структури функціональної молекулярної системи.

Аналіз проблеми подано в роботах [5-9]. Там же запропоновано модель макромолекули з однонаправленим перенесенням триплетних збуджень. Введено поняття екситонного струму. Представлено перші результати по дизайну та спектральному тестуванню функціональності таких макромолекул. У [6] отримано оцінкову формулу для величини екситонного струму в

макромолекулі 
$$I_n \sim I_0 \left( \frac{1-\alpha}{1-\beta e^{kT}} \right)$$
, де  $I_0$  - кіль-

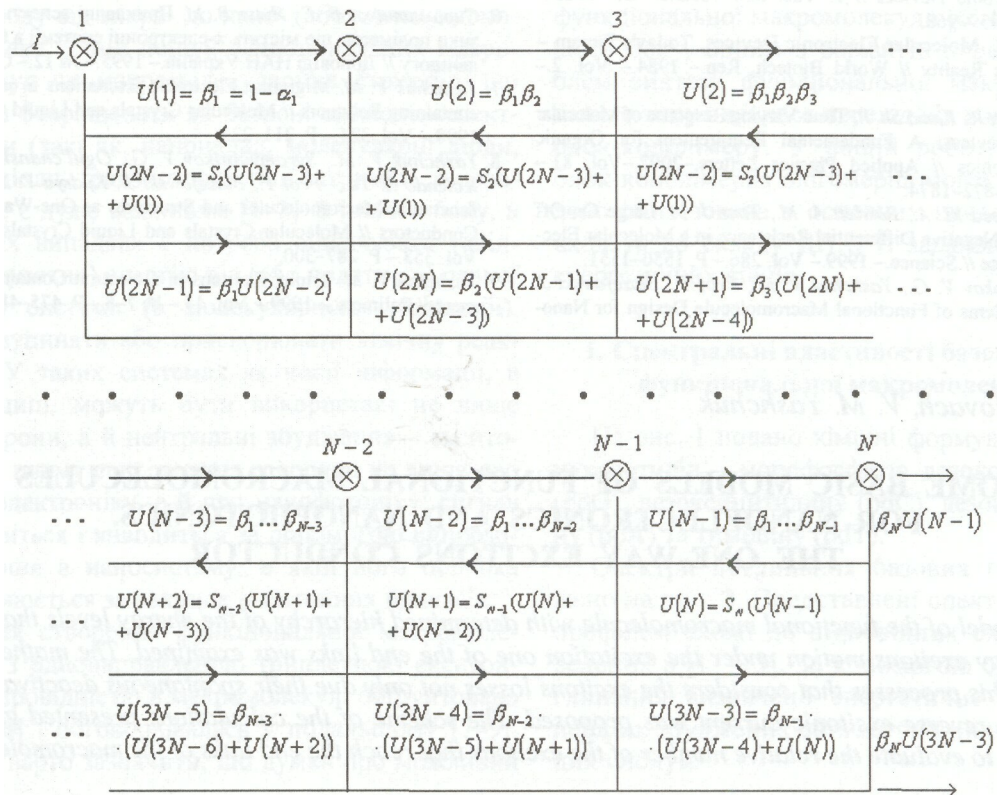
кість екситонів, що згенеровано в першій комірці в одиницю часу,  $\alpha$  - ймовірність дезактивації екситонів,  $\Delta E$  - різниця енергії триплетних рівнів між сусідніми молекулами (однакова для всіх молекул),  $\beta$  - ймовірність передачі екситону сусідній ланці,  $k$  - стала Больцмана,  $T$  - абсолютна температура. Втім, у реальних системах величини  $\Delta E$ , як правило, різні для різних молекул. Крім того, важливим є врахування зворотних струмів, що можуть бути значними, коли  $\Delta \xi \sim kT$ . Істотним також є врахування багато-

ступінчастої міграції електронних збуджень (незважаючи на енергетичну асиметрію системи). Нижче запропоновано підхід розрахунку втрат екситонного струму в моделі, близькій до реальної функціональної молекули.

### Опис поширення збуджень через довільну кількість ланок функціональної макромолекули. Постановка задачі

Нехай макромолекула містить у своєму складі  $N$  хромофорних ланок. Система енергетичних рівнів цих хромофорних груп та ймовірності квантових переходів така, що фотоном певної довжини хвилі може збудитися лише 1-ша ланка. За час життя її в збудженому стані збудження може передатися 2-й ланці з ймовірністю  $\beta_1 = 1 - \alpha_1$  або ж спонтанно зникнути (дезактивуватися) з ймовірністю  $\alpha_1$  за рахунок випромінювальних або безвипромінювальних переходів. Локалізоване на 2-й ланці збудження може бути передане 3-й ланці з ймовірністю  $\beta_2 = 1 - \alpha_2$ , однак з ймовірністю  $\alpha_2$  може повернутися назад до 1-ї ланки; крім того, збудження може спонтанно дезактивуватися з ймовірністю  $S_2$ , таким чином «виходячи з гри». Такі ж процеси відбуваються на всіх інших ланках макромолекули при збудженні.

Задача полягає у знаходженні відносної кількості збуджень (згенерованих в 1-й ланці), що доходять до кінцевої ланки макромолекули.



### Схематичний стенд поширення збуджень

Розмістимо  $N$  ланок макромолекули (на стенді вони позначені хрестиками) на одній прямій і на однаковій відстані одна від одної. Збудження поширюються зліва направо у першому рядку. Частина (порції цих збуджень) розмістимо у вікнах цього стенда й позначимо їх через  $U(K)$ . Перша частина збуджень, яка вийде з першого рядка, дорівнюватиме  $\beta_N U(N-1)$ .

Друга частина збуджень, яка вийде з другого рядка, дорівнюватиме  $\beta_N U(3N-3)$  і т. д. Процес поширення збуджень з урахуванням усіх можливих процесів у кожній ланці макромолекули представлено на стенді.

### Розрахункові формули

Кількість збуджень на виході з макромолекули можна обчислити за формулою

$$C = \beta_N \sum_{p=0}^{\infty} U(N-1+2(N-1)p).$$

Загальний член ряду, як впливає зі стенда, визначається з різницевого рівняння

$$U(n) = q_1(n)U(n-1) + q_2(n)U(2N-1+2(N-1)K-n),$$

1. Carter F. L. Molecular Level Fabrication Techniques and Molecular Electronic Devices // J. Vac. Sci. Technol. B- 1983- Vol. 1- P. 959-968.
2. Carter F. L. Molecular Electronic Devices, Today's Dream - Tomorrow's Reality // World Biotech. Rep.- 1984.- Vol. 2- P. 127-138.
3. Woo R., Pali R., Kama Sh. P. Time-Varying Response of Molecular Electron Devices: A Fundamental Requirement for Organic Nanoelectronics // Applied Physics Letters.-2002.-Vol. 81.- №10.-P. 1872-1874.
4. Chen J., Reed M. A., Rawlett A. M., Tour J. M. Large On-Off Ratios and Negative Differential Resistance in a Molecular Electronic Device//Science.- 1999.-Vol. 286.-P. 1550-1551.
5. Syromyatnikov K. G., Yashchuk K. M., Prot T., Blazejowski J. Some Problems of Functional Macromolecule Design for Nano-

де  $n$  змінюється від  $(N-1)K+N$  до  $(N-1)K+2N-2$  ( $K=0, \infty$ ). Коефіцієнти різницевого рівняння зв'язані з величинами  $\alpha_q$  та  $d_q$  таким чином:

$$\begin{aligned} q_1(N+2(N-1)l) &= S_n, \\ q_1(2N-1+(2N-2)l) &= \beta_1, \\ q_2(N+(N-1)j) &= 0, \quad (j, l = 0, \infty), \\ q_1(N+2(N-1)m+i) &= \\ &= q_2(N+2(N-1)m+i) = S_{N-1-i}, \\ q_1(2N+2(N-1)m+i) &= \\ &= q_2(2N+2(N-1)m+i) + \beta_{2+i}, \\ &(i = \overline{0, N-3}, m = \overline{0, \infty}). \end{aligned}$$

Початкові умови для різницевого рівняння мають вигляд

$$U(1) = \beta_1, \quad U(r) = \beta_r U(r-1), \quad r = \overline{2, N-1}.$$

Звідси

$$\begin{aligned} U(2) &= \beta_1 \beta_2, \quad U(3) = \beta_1 \beta_2 \beta_3, \dots, \\ U(N-1) &= \beta_1 \dots \beta_{N-1}. \end{aligned}$$

Про практичну реалізацію запропонованого методу буде повідомлено в наступних роботах.

6. Сиромятніков В. Г., Яшук В. М. Прикладні аспекти фотофізики полімерів, що містять  $\pi$ -електронні системи в боковому ланцюгу // Доповіді НАН України- 1995,-№ 12,-С. 56-59.
7. Yashchuk V. M. Migrating Electronic Excitations in  $\pi$ -electron-containing Polymers // Molecular Crystals and Liquid Crystals- 1998- Vol. 324,-P. 211-222.
8. Yashchuk V. M., Syromyatnikov V. G., Ogul'chansky T. Yu., Kolendo A. Yu., Prot T., Blazejowski J., Kudrya V. Yu. Multifunctional Macromolecules and Structures as One-Way Exciton Conductors // Molecular Crystals and Liquid Crystals.- 2000.- Vol. 353,-P. 287-300.
9. Yashchuk V. M. Triplet Excitons in  $\pi$ -electron Containing Polymers // Polimery- 1999,- Vol. 44.- № 7-8.- P. 475-480.

G. P. Golovach, V. M. Yashchuk

## SOME BASIC MODELS OF FUNCTIONAL MACROMOLECULES FOR NANOELECTRONICS AND NANOPHOTONICS. THE ONE-WAY EXCITONS CONDUCTOR

*The model of the functional macromolecule with determined hierarchy of the energy levels that favors the one-way excitons motion under the excitation one of the end links was examined. The mathematical model of this processes that considers the excitons losses not only due their spontaneous deactivation but due to the reverse excitonic current was proposed. The scheme of the calculations presented gives the possibility to evaluate the relative number of the excitons that reach the end links of the macromolecule.*