Новосибирский государственный университет
*НАСТОЯЩАЯ НАУКА

Перенос заряда в переменном электрическом поле вдоль одномерной цепи

Четвериков Артём Олегович

Студент 1 курса магистратуры кафедры ХиБФ ФФ НГУ

Инженер-исследователь лаборатории быстропротекающих процессов ИХКГ СО РАН

Научный руководитель

Боровков Всеволод Игоревич

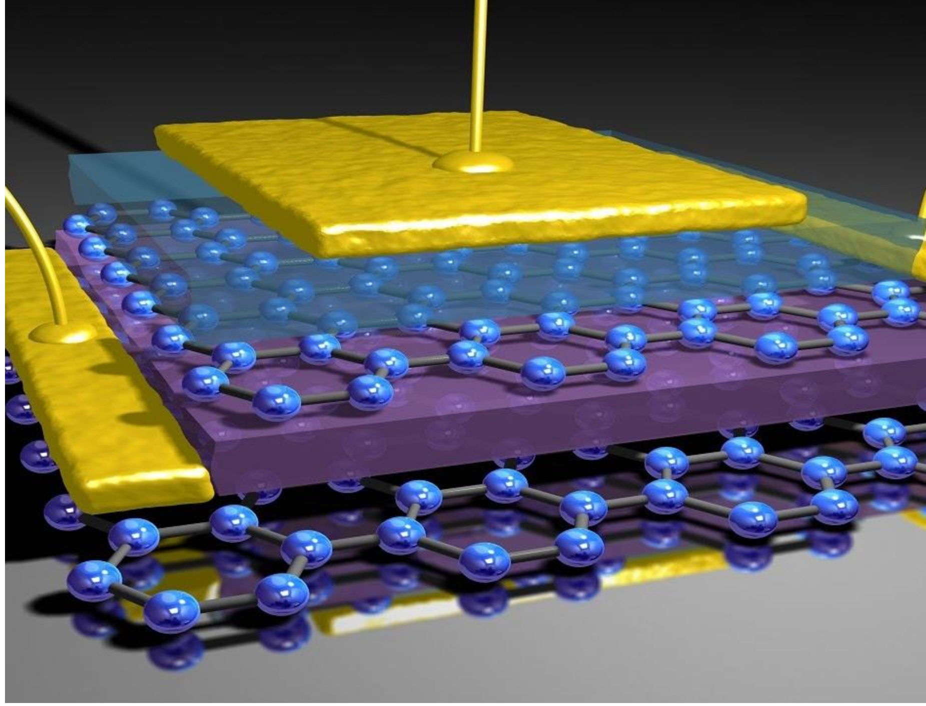
д. ф.-м. н., профессор РАН

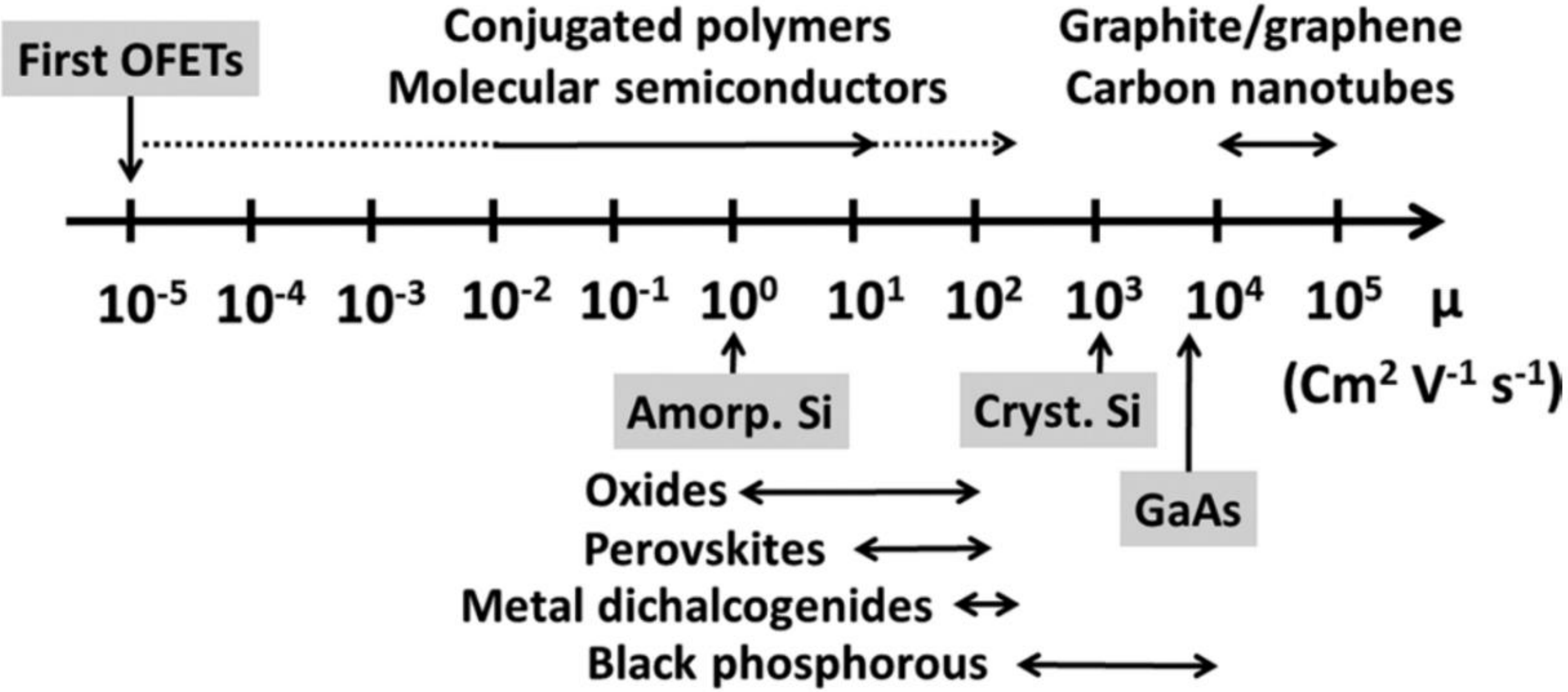
Содержание доклада

- Введение в проблему переноса электрона в полимерах
- Основные уравнения
- Некоторые результаты, полученные в ходе работы
- Анализ полученных выражений

Области применения органической электроники

- Гибкие OLED экраны
- Солнечные панели
- Процессоры

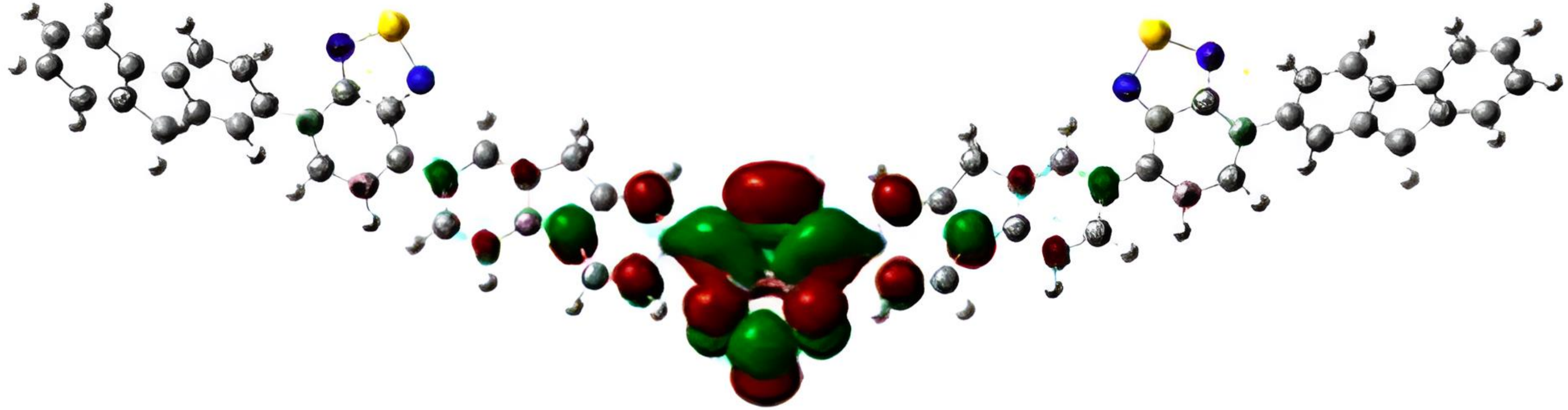




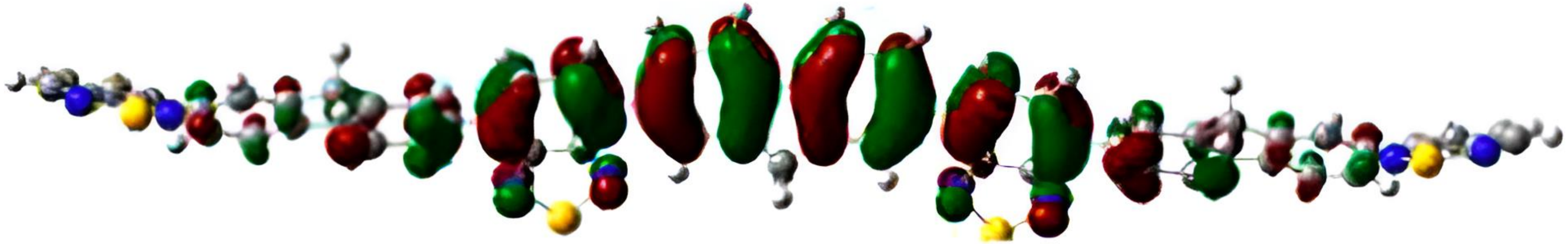
Schweicher G. и др. Molecular Semiconductors for Logic Operations: Dead-End or Bright Future? // Advanced Materials. 2020.

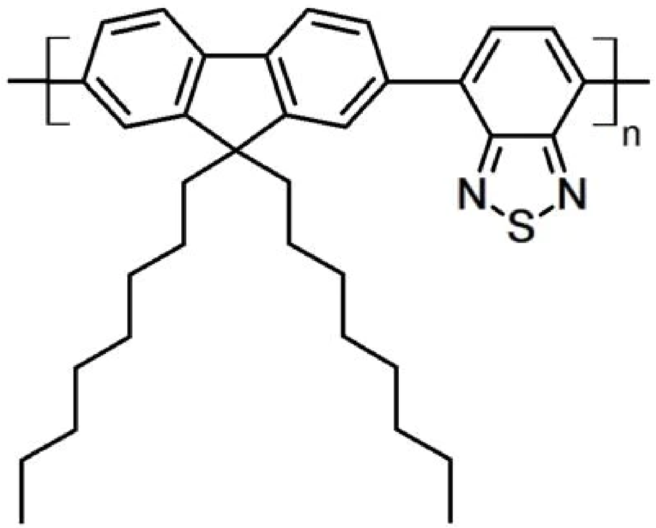
Сопряжённые полимеры как молекулярные проводники

F8BT анион радикал



F8BT катион радикал



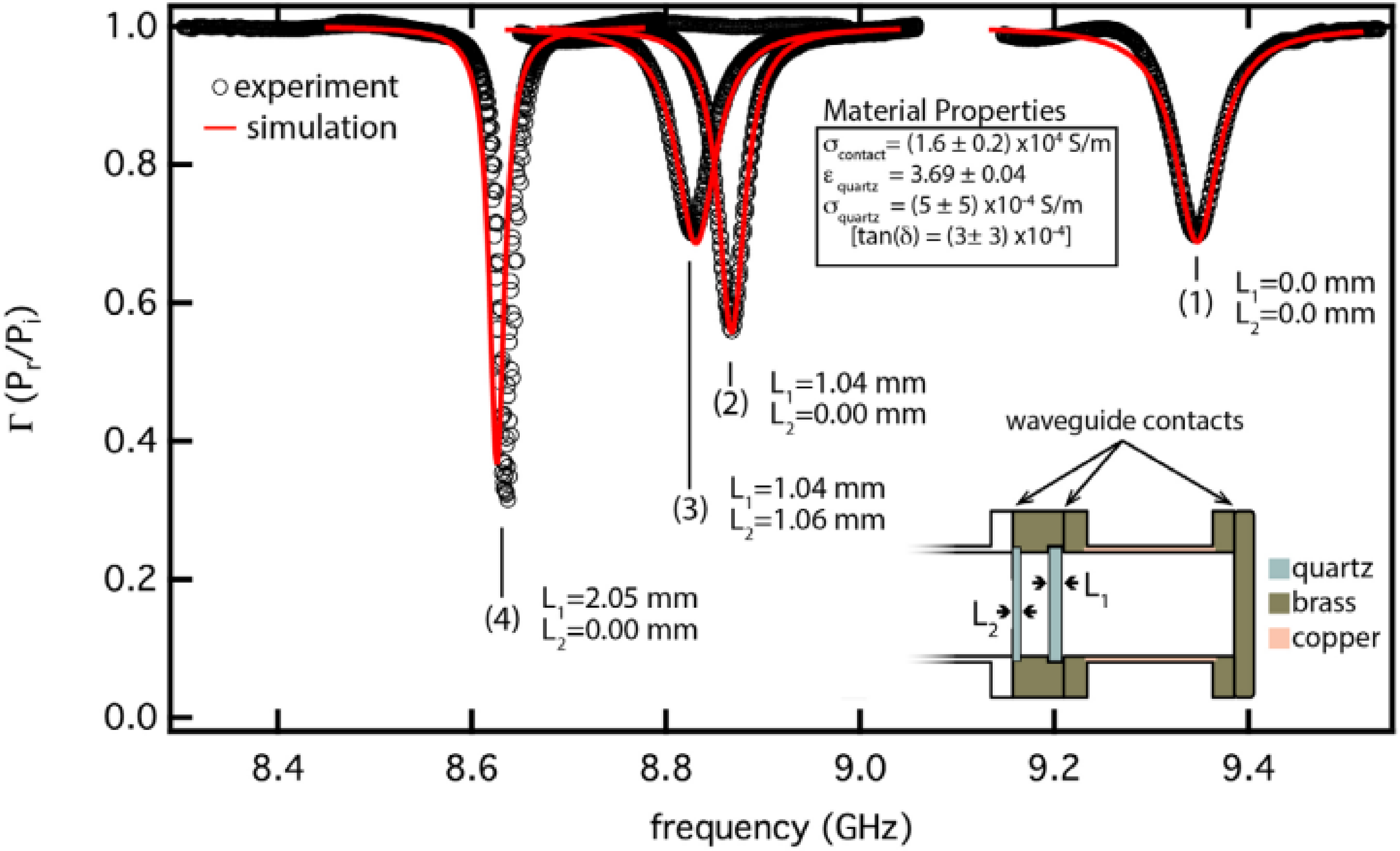


Структура поли(9,9-диоктил-2,7-флуоренил-альт-2,1,3-бензотиадиазол-4,7-диила) (F8BT)

Локализованная электронная плотность → Прыжковый транспорт

Bird M. J. и др. Fast holes, slow electrons, and medium control of polaron size and mobility in the da polymer F8BT // Journal of Physical Chemistry C. 2017.

Метод измерения микроволновой проводимости (TRMC)



Miller J. R. и др. Electron and Exciton Transport to Appended Traps // Charge and Exciton Transport through Molecular Wires. : Wiley-VCH, 2011.

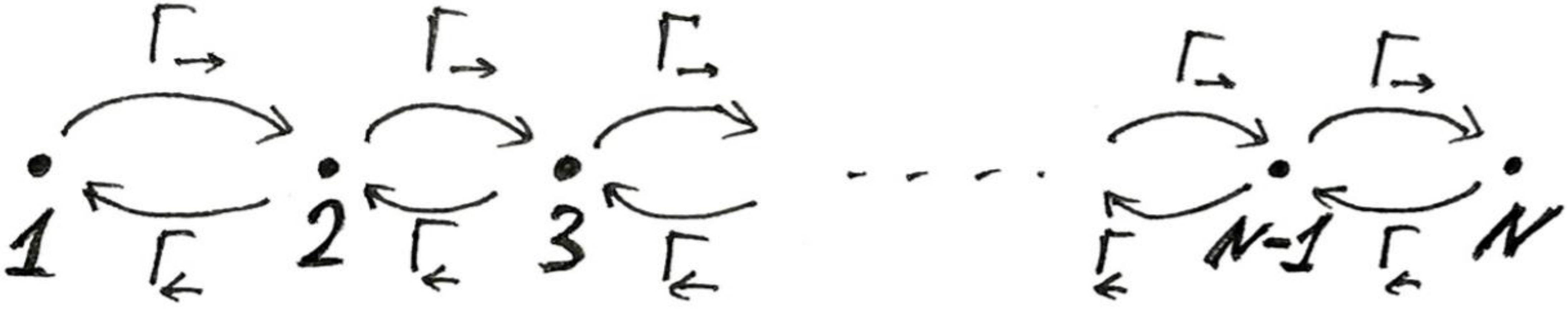
Основные уравнения

$$E = E_0\cos(\omega_0 t + \phi),\ W = \frac{qE_0}{T}\int_0^T \frac{d\langle x\rangle}{dt}\cos(\omega_0 t + \phi)dt = \frac{\omega_0 q E_0}{T}\int_0^T \langle x\rangle \sin(\omega_0 t + \phi)dt$$

Средняя за период T поглощаемая частицей мощность *W* на цепочке с *N* звеньями и расстоянием между мономерами *a*

$$\langle x\rangle = \sum_{k=1}^{N} k a P_k$$

P_k – вероятность найти частицу на k позиции

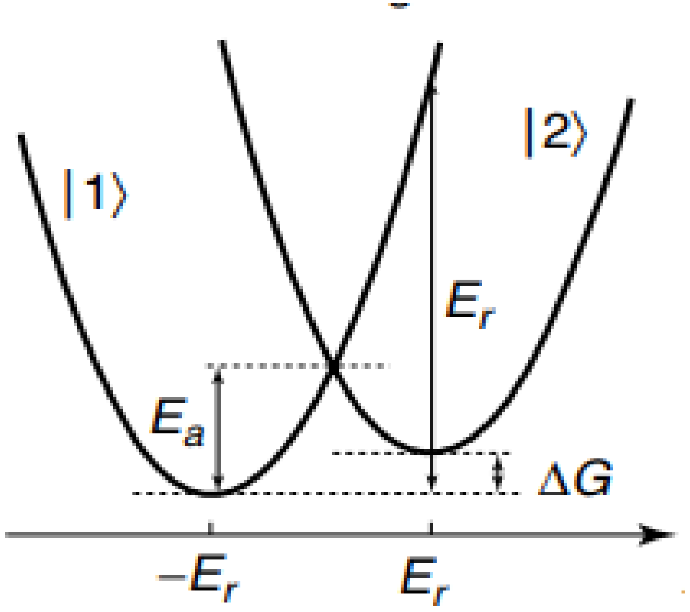


Основные уравнения

$$\mathcal{H} = \hbar \sum_{l=1}^{\infty} \omega_l b_l^+ b_l + \sigma_z \sum_{l=1}^{\infty} u_l (b_l^+ + b_l) - \sigma_z p E(t) - \hbar \sigma_x V$$

$b_{l,} b_l^+$ фононные операторы, $p = qa$ дипольный момент,
V матричный элемент взаимодействия двух термов

$E_r = \int_0^\infty J(\omega) \frac{d\omega}{\omega}$ энергия реорганизации,
$J(\omega)$ плотность колебательных состояний.



$$\frac{d\boldsymbol{P}}{dt} = -\int_0^t \mathrm{M}(t,t')\boldsymbol{P}(t')dt'$$

$$\mathrm{M} = \begin{pmatrix} g_\rightarrow & -g_\leftarrow & 0 & & \\ -g_\rightarrow & g_\rightarrow + g_\leftarrow & -g_\leftarrow & \cdots & 0 \\ 0 & -g_\rightarrow & g_\rightarrow + g_\leftarrow & & \\ & \vdots & & \ddots & \vdots \\ & 0 & & \cdots & g_\leftarrow \end{pmatrix}$$

$$g_\leftrightarrows = e^{-\frac{2E_r k_B T}{\pi\hbar^2}(t-t')^2} \cos\left(\frac{E_r(t-t')}{\pi\hbar}\right) \cos\big(2F(t) \pm 2F(t')\big), \qquad F(t) = p\int_0^t E(t'')dt''$$

$$\frac{d\boldsymbol{P}}{dt} = -\mathrm{M}(t)\boldsymbol{P}, \quad \mathrm{M}(t) \text{ T периодична} \Longrightarrow \boldsymbol{P} = D(t)\exp(-\mathrm{B}t)\boldsymbol{P}(0)$$

B матрица монодромии, в нашем случае можно считать её единичной

$$D(t) \approx \exp\left(-\int_0^t \mathrm{M}(t')dt' + \frac{t}{T}\int_0^T \mathrm{M}(t')dt'\right) \quad \text{T периодична}$$

Зависимость элементов матрицы от электрического поля задаётся выражениями:

$$\Gamma_{\leftrightarrows} = \Gamma_0 e^{\pm\Delta G}, \qquad \Delta G = \frac{qaE_0}{k_B T}\cos(\omega_0 t + \phi) = s\cos(\omega_0 t + \phi)$$

$$\mathrm{M}(t) = \begin{pmatrix} \Gamma_\rightarrow & -\Gamma_\leftarrow & 0 & & \\ -\Gamma_\rightarrow & \Gamma_\rightarrow + \Gamma_\leftarrow & -\Gamma_\leftarrow & \cdots & 0 \\ 0 & -\Gamma_\rightarrow & \Gamma_\rightarrow + \Gamma_\leftarrow & & \\ & \vdots & & \ddots & \vdots \\ & 0 & & \cdots & \Gamma_\leftarrow \end{pmatrix}$$

$$\boxed{P_k = \sum_{m=1}^{N} C_m(0)e^{\lambda_m} p_{m,k}}$$

$$\lambda_m = \Gamma_\rightarrow + \Gamma_\leftarrow + 2\sqrt{\Gamma_\leftarrow \Gamma_\rightarrow}\cos(\varphi_m), \qquad \varphi_m = \frac{m\pi}{N}, \qquad m \in \{1, N-1\}$$

$$p_{m,k} = \left(-\frac{\Gamma_\rightarrow}{\sqrt{\Gamma_\leftarrow \Gamma_\rightarrow}}\right)^{k-1} \frac{\left[\sqrt{\Gamma_\leftarrow \Gamma_\rightarrow}\sin\big((N+1-k)\varphi_m\big) + \Gamma_\rightarrow \sin\big((N-k)\varphi_m\big)\right]}{\Gamma_\rightarrow \sin\big((N-1)\varphi_m\big)}$$

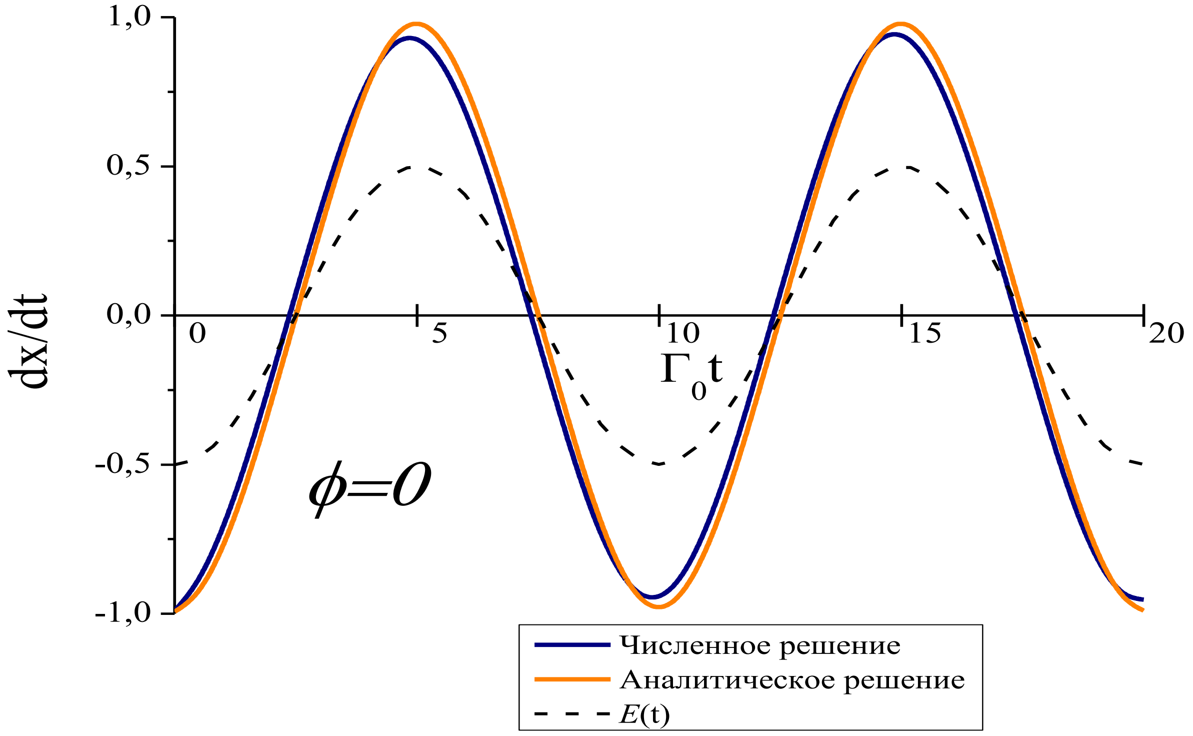
Стационарное состояние системы отвечает $\lambda_N = 0,\ p_{N,k} = \left(\frac{\Gamma_\rightarrow}{\Gamma_\leftarrow}\right)^{k-1}$

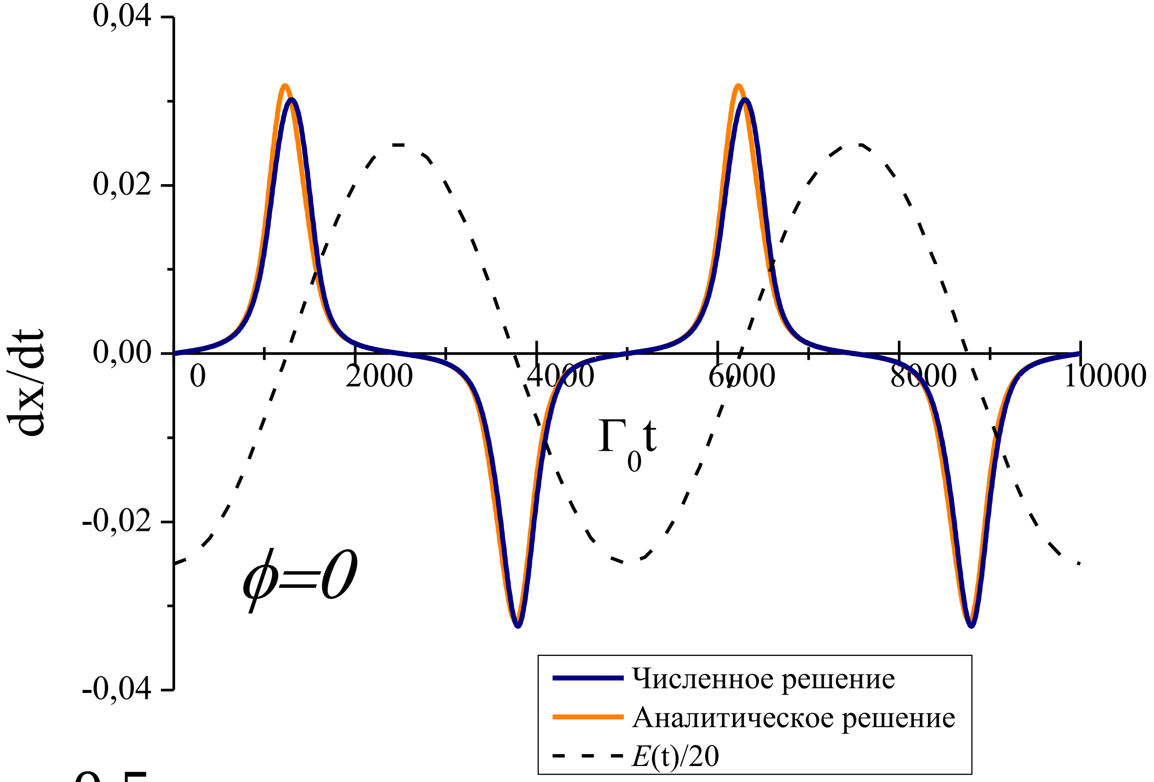
Введём скалярное произведение с весовой функцией

$$(\boldsymbol{p}_i, \boldsymbol{p}_j)_h = \sum_{k=1}^{N} \left(\frac{\Gamma_\leftarrow}{\Gamma_\rightarrow}\right)^{k-1} p_{i,k} p_{j,k} = ({p_i}^2)_h \delta_{ij}, \qquad C_m(0) = \frac{(\boldsymbol{P}(0), \boldsymbol{p}_m)_h}{({p_m}^2)_h}$$

$$\boxed{P_k = \sum_{m=1}^{N} C_m(0) e^{\lambda_m} p_{m,k}}$$

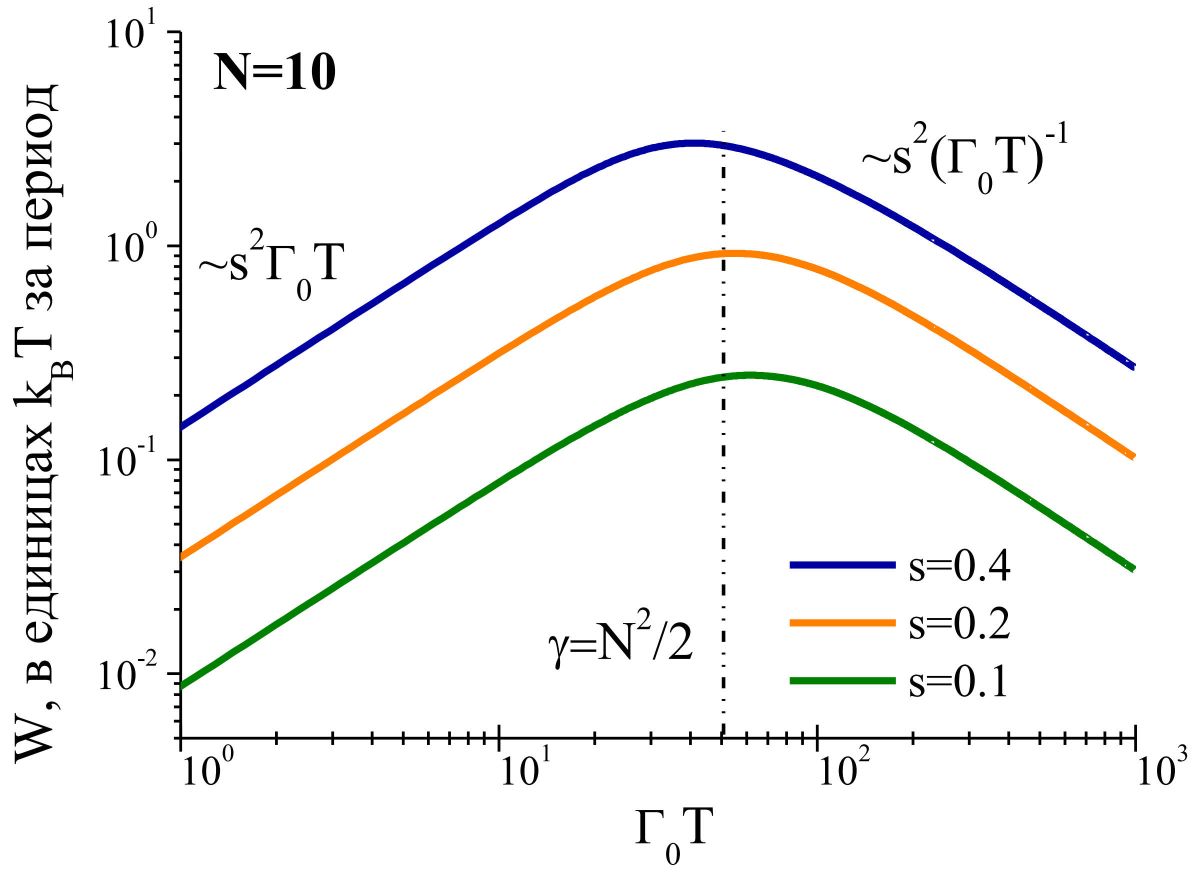
$$\langle x\rangle = a\left(\sum_{m=1}^{N-1}\frac{2\Gamma_{\leftarrow}\Gamma_{\rightarrow}(\Gamma_{\rightarrow}-\Gamma_{\leftarrow})\left(\left[\left(\frac{\Gamma_{\leftarrow}}{\Gamma_{\rightarrow}}\right)^{N/2}+\left(\frac{\Gamma_{\rightarrow}}{\Gamma_{\leftarrow}}\right)^{N/2}\right]\cos(N\varphi_m)-2\right)\sin^2(\varphi_m)}{N^2{\lambda_m}^3}e^{\lambda_m}+\frac{1}{1-\frac{\Gamma_{\rightarrow}}{\Gamma_{\leftarrow}}}+\frac{N}{1-\left(\frac{\Gamma_{\leftarrow}}{\Gamma_{\rightarrow}}\right)^N}\right)$$

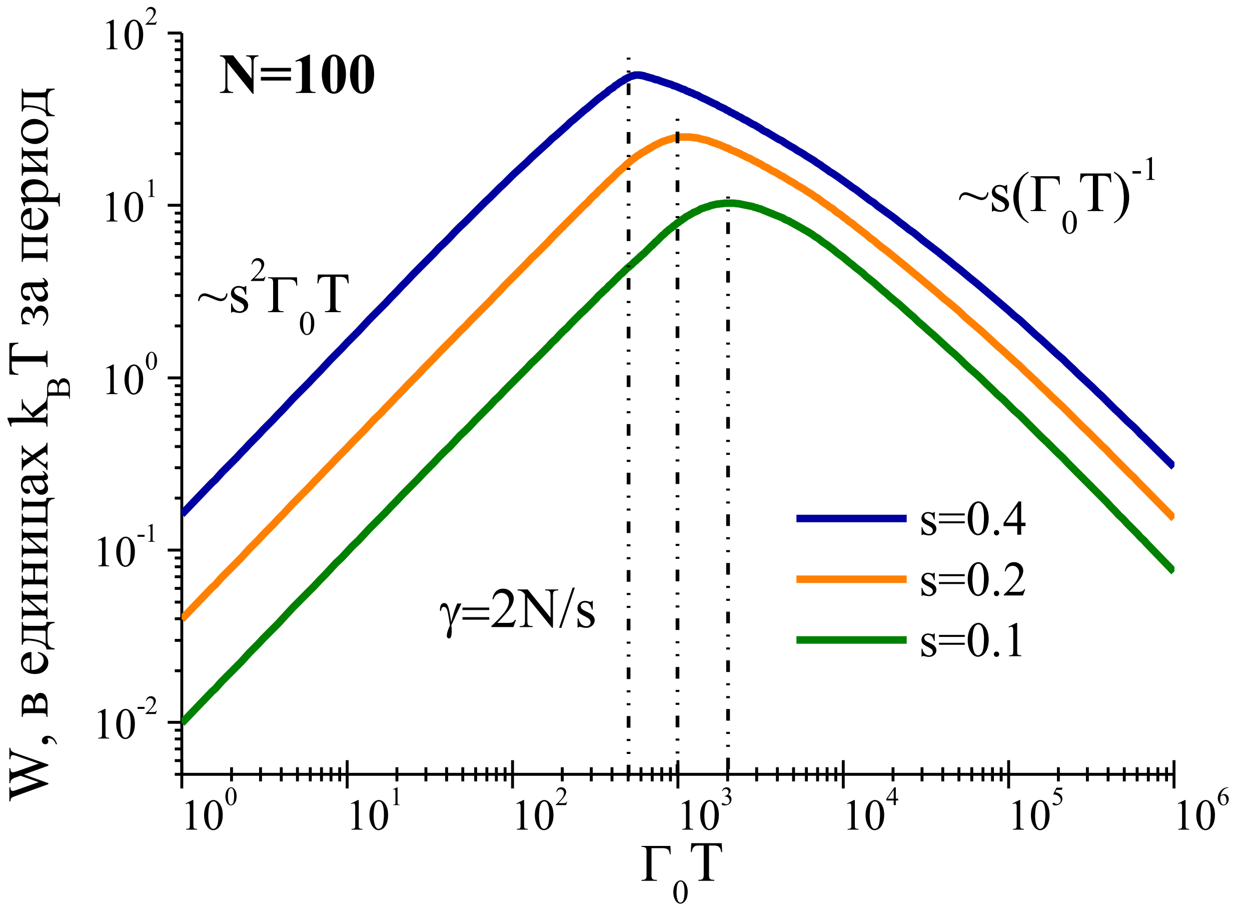




N=20; s=0.5

$$W = \frac{s^2}{T}\left[1 - \sqrt{2\Gamma_0 T N}\,\frac{\sin\left(\frac{1}{\sqrt{2\Gamma_0 T N}}\right) + \sinh\left(\frac{1}{\sqrt{2\Gamma_0 T N}}\right)}{\cos\left(\frac{1}{\sqrt{2\Gamma_0 T N}}\right) + \cosh\left(\frac{1}{\sqrt{2\Gamma_0 T N}}\right)}\right]$$





Заключение

В рамках рассматриваемой модели был получен закон движения частицы на полимерной цепи в переменном электрическом поле. Таким образом, если переходить к ансамблю полимерных цепей, можно говорить о временной эволюции электронной плотности на молекуле. Это позволяет напрямую связать характеристику собственной подвижности носителя заряда Γ_0 с наблюдаемыми величинами, которые могут быть измерены экспериментально.