

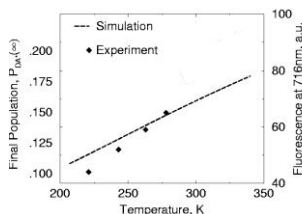
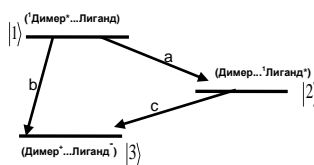
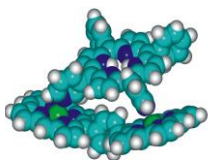
Теоретический анализ фотоиндуцированных релаксационных процессов в самоорганизованных триадах порфиринов

Зенькевич Э.И.¹, Сакевич Л.А.¹, Килин Д.²

¹Белорусский национальный технический университет,

²Университет Южной Дакоты, 57069 Вермилион СД, США

Органические наноструктуры с управляемыми физико-химическими и функциональными свойствами представляют интерес для потенциальных применений в нанoeлектронике, нанотехнологиях и нанобиомедицине [1]. В работе представлены результаты теоретического исследования (модель Хакена-Штробла-Рейнекера) процессов тушения возбужденных электронных состояний в самособирающихся триадах на основе порфиринов при вариации температуры и полярности растворителя.



В рамках этой модели динамика возбужденных состояний $|1\rangle = |^1\text{Димер}^* \dots \text{Лиганд}\rangle$, $|2\rangle = |^1\text{Димер} \dots \text{Лиганд}^*\rangle$ описывается уравнением движения для соответствующей редуцированной матрицы плотности без учета колебательной структуры электронных состояний.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \sigma_{\kappa\lambda} = & -\frac{i}{\hbar} ([H_S, \sigma])_{\kappa\lambda} + 2\delta_{\kappa\lambda} \{ \Gamma_{\mu\kappa} [n(\omega_{\mu\kappa}) + 1] + \Gamma_{\kappa\mu} n(\omega_{\kappa\mu}) \} \sigma_{\mu\mu} \\ & - \sum_{\mu} \{ \Gamma_{\mu\kappa} [n(\omega_{\mu\kappa}) + 1] + \Gamma_{\kappa\mu} n(\omega_{\kappa\mu}) + \Gamma_{\mu\lambda} [n(\omega_{\mu\lambda}) + 1] + \Gamma_{\lambda\mu} n(\omega_{\lambda\mu}) \} \sigma_{\kappa\lambda} \\ & + \{ \Gamma_{\lambda\kappa} [2n(\omega_{\lambda\kappa}) + 1] + \Gamma_{\kappa\lambda} [2n(\omega_{\kappa\lambda}) + 1] \} \sigma_{\lambda\kappa}. \end{aligned}$$

Показано, что тушение обусловлено конкуренцией процессов переноса энергии и фотоиндуцированного разделения заряда, реализующихся в пикосекундном диапазоне времен. С учетом статических и динамических характеристик среды проведено количественное сопоставление экспериментальных результатов по вероятностям переноса энергии и электрона с теоретическими расчетами.

Финансовая поддержка работы: ГПНИ («Конвергенция 3.2.08»), грант БРФФИ № 14P-032.

Литература:

1. E.I. Zenkevich, Christian von Borczyskowski. J. Porphyrins and Phthalocyanines. 2014, 18, 1–19.