

Параметрический Электронный Переключатель на Базе Нанодимерного Комплекса

Квазирегулярные и Хаотические Режимы

Ялтыченко О.В., Канаровский Е.Ю.

Лаборатория Оптоэлектроники,
Институт Прикладной Физики АН РМ,
Ул. Академическая 5, Кишинёв, MD-2028, Молдова
oialt@mail.ru, kanarovskii@gmail.com

Abstract — In this paper the regimes of the regular and chaotic behavior in nanodimer complex with the nonlinear dynamics of electron transfer is theoretically investigated. Such kind of the systems can be used as the functional elements of the nanoelectronic and nanoelectronic devices. It is shown, that the variation of parameters and initial conditions in the given system leads to a switching between the regimes of electronic localization. Also, the regimes combining the regular and chaotic behavior of the studied system are analyzed.

Keywords — electron transfer, nanodimer, parametric switching, nonlinearity, haos, quasiregularity.

I. ВВЕДЕНИЕ

Материалы на основе нелинейных динамических систем чрезвычайно перспективны в нано- и оптоэлектронике, материаловедении синтетических материалов [1]. Потребность в материалах для нано- и оптоэлектроники с новыми свойствами идёт по пути модификации различных видов уже изученных материалов. При этом является актуальным широкое внедрение в известные материалы наноструктур с выраженными нелинейными свойствами. В частности, исследования кинетических свойств материалов, содержащих димерные нанокластеры [2], требуют более детального теоретического анализа и новых подходов в моделировании.

Особенностью нелинейных динамических систем является возможность реализации в них различных режимов функционирования и смена этих режимов в зависимости от начальных условий, параметров системы и внешних воздействий. Кроме того, свойства нелинейных систем могут быть существенно улучшены при учёте стохастических процессов за счёт явлений стохастического резонанса и синхронизации. Создание математической модели динамической системы подразумевает, прежде всего, введение формальных параметров, моделирующих изучаемую систему, для определения закона эволюции кинетических характеристик, который может быть как детерминированным, так и вероятностным в зависимости от сложности изучаемой системы. Исследование реальных динамических систем основано на изучении ряда

математических моделей, их совершенствовании на основе анализа экспериментальных данных и сопоставления этих данных с результатами моделирования. В нелинейных динамических системах возможны режимы поведения, которые по своему характеру близки к случайным процессам, что является проявлением фундаментального явления – детерминированного хаоса [3].

II. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В данной работе изучена нелинейная динамика электронного переноса в димерном кластере с одним мигрирующим электроном и одной колебательной модой. Для теоретического описания димерного кластера воспользуемся модельным гамильтонианом:

$$H = v\sigma_x + gq\sigma_z + \frac{1}{2}(p^2 + q^2),$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

Здесь $\sigma_x, \sigma_z, \sigma_y, p, q$ – соответственно, матрицы Паули, описывающие состояния электронной подсистемы, импульс и координата колебательной моды, взаимодействующей с туннелирующим между центрами димера электроном. Параметры данной системы v, g взяты в энергетических единицах $\hbar\omega$ и отвечают, соответственно, за межцентровый перенос электрона и электронно-колебательное взаимодействие на каждом из его центров.

Далее, используя приближение среднего поля и квантово-механические уравнения движения Гейзенберга для средних значений вышеуказанных величин, получим систему нелинейных дифференциальных уравнений для них. Данная система состоит из связанных подсистем, описывающих электронную и колебательную динамику.

Подсистема дифференциальных уравнений, описывающая колебательную динамику нанодимера:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle q(t) \rangle &= \langle p(t) \rangle + \gamma \langle q(t) \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle p(t) \rangle &= -\langle p(t) \rangle - g \langle \sigma_z(t) \rangle \end{aligned} \quad (2)$$

Подсистема дифференциальных уравнений, описывающая электронную динамику нанодимера:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \sigma_z(t) \rangle &= 2\nu \langle \sigma_y(t) \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \sigma_y(t) \rangle &= 2\nu \langle \sigma_z(t) \rangle + 2g \langle q(t) \rangle \langle \sigma_x(t) \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \sigma_x(t) \rangle &= -2g \langle q(t) \rangle \langle \sigma_y(t) \rangle \end{aligned} \quad (3)$$

III. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Численное решение системы дифференциальных уравнений (2) для определённых значений параметров и начальных условий системы приведены графически на Рис. 1-3.

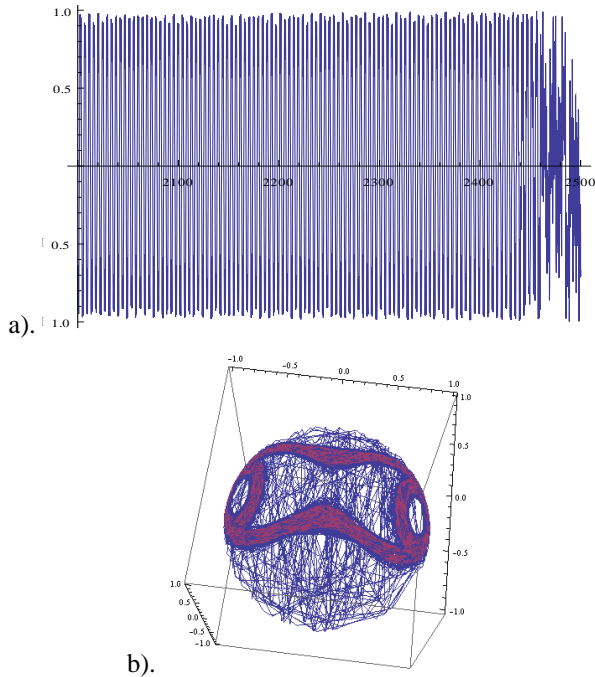


Рис. 1. Временная зависимость разности электронных населенностей центров нанодимера $\langle \sigma_z(t) \rangle$ и фазовый портрет в пространстве

$$\langle \sigma_z(t) \rangle, \langle \sigma_y(t) \rangle, \langle \sigma_x(t) \rangle, \text{ при } \nu = 2.09, g = 1.9, \gamma = 0.00005, q(0) = 1.55, p(0) = 1.15, \text{ соответственно, а) и б).}$$

На рис. 1 показан случай, когда параметры системы $\nu = 2.09, g = 1.9$ близки по своим значениям. Анализируя данный случай (квазипериодический режим

переключения населённости), можно заметить, что в квазипериодической временной зависимости среднего значения разности электронных населённости центров нанодимера на временах порядка 2500 (относительных единиц) начинают активно проявлять себя стохастические (хаотические) процессы, порождаемые самой системой по причине её нелинейности. Замечено, что изменения параметра от значения $\gamma = 0.00005$ до $\gamma = 0.0008$, существенно влияет как на степень хаотизации в поведении временных зависимостей, так и временной интервал на котором наблюдается квазирегулярное поведение в системе (ближайшие фазовые траектории имеют перемешивание в пределах симметричной области, отображённой на рис. 1 и наглядно показывающей бистабильность в системе). Подобные режимы квазирегулярного поведения могут быть выявлены и при других значениях модельных параметров. Такого рода поведение может быть интерпретировано как перемежающийся хаос в исследуемой системе [3].

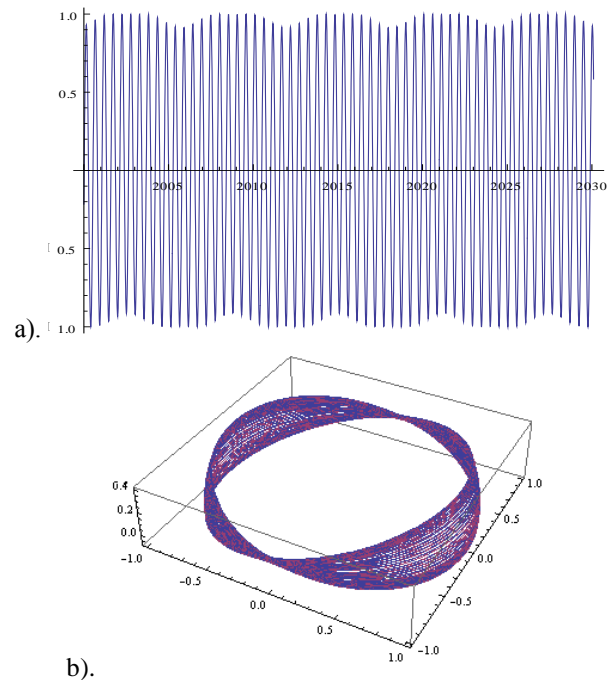


Рис. 2. Временная зависимость разности электронных населенностей центров нанодимера $\langle \sigma_z(t) \rangle$ и фазовый портрет в пространстве

$$\langle \sigma_z(t) \rangle, \langle \sigma_y(t) \rangle, \langle \sigma_x(t) \rangle \text{ при } \nu = 5.9, g = 1.0, \gamma = 0.0, q(0) = 1.0, p(0) = 1.15, \text{ соответственно, а) и б).}$$

Режим, представленный на рис. 2. соответствует случаю, когда константа тунnelирования электрона с центра на центр нанодимера существенно выше константы электрон-колебательного взаимодействия. В этом случае эффект нелинейности системы не так сильно проявляет себя, как в предыдущем случае, и на достаточном больших временах поведение системы остаётся в рамках квазирегулярного.

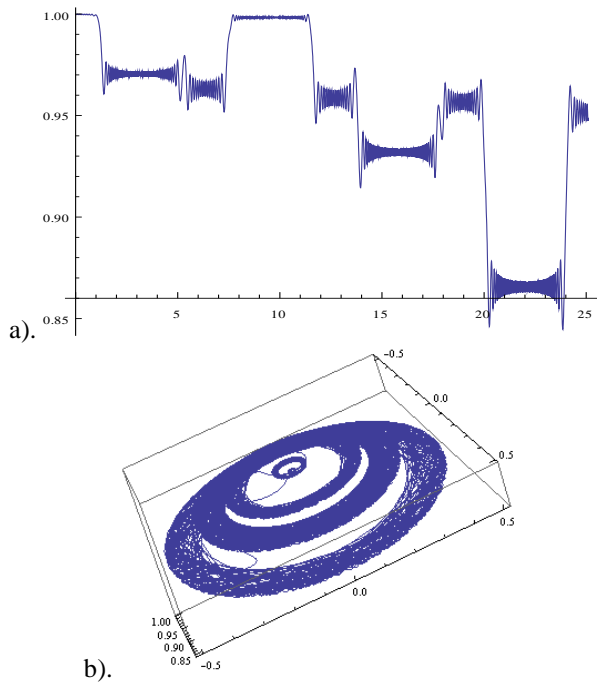


Рис. 3. Временная зависимость разности электронных населенностей центров нанодимера $\langle \sigma_z(t) \rangle$ и фазовый портрет в пространстве $(\langle \sigma_z(t) \rangle, \langle \sigma_y(t) \rangle, \langle \sigma_x(t) \rangle)$ при $\nu = 0.5$, $g = 5.5$, $\gamma = 0.0$, $q(0) = 6.5$, $p(0) = 1.15$, соответственно, а) и б).

Данный режим поведения временной зависимости разности населенностей центров нанодимера (рис. 3) соответствует случаю сильной нелинейности, когда константа электрон-колебательного взаимодействия на порядок выше константы межцентрового туннелирования электрона в нанодимере. В этом случае полная хаотизация наступает значительно быстрее (квазирегулярность имеет место лишь на малых временах) чем в случаях, представленных на рис. 1 и 2. Перемешивание близких траекторий в фазовом пространстве уже на малых временах приводит к зарождению областей сильной стохастичности, в которых отсутствует квазирегулярное

поведение системы. При некоторых значениях параметров системы с течением времени возможно расхождение близких траекторий без перемешивания и возобновление квазирегулярного поведения в системе. Интересно отметить, что нахождение траекторий в областях фазового пространства, где имеет место квазирегулярный режим поведения системы, значительно меньше по продолжительности, чем в случае на рис. 1 и 2.

IV. ВЫВОДЫ

В данной работе теоретически исследованы режимы квазирегулярного и хаотического поведения в нанодимерном комплексе с учетом нелинейной динамики электронного переноса. Проанализированы режимы, сочетающие квазирегулярное и хаотическое поведение в системе. Показано, что вариация параметров и начальных условий в исследуемой системе приводит к различным режимам локализации электрона, при этом существует возможность параметрического переключения между этими режимами, а также и параметрического управления степенью хаотичности поведения системы.

Предложенная математическая модель является достаточно простой и, тем не менее, может быть успешно использована для описания процессов электронного переноса, выявляя возможности параметрического контроля и переключения режимов. Системы такого рода могут быть реализованы в качестве функциональных элементов нанoeлектронных и оптоэлектронных приборов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] J. M. Martinez-Duart, F. Aquillo-Rueda and R. J. Martin-Palma, *Nanotechnology for Microelectronics and Optoelectronics*. Elsevier: Amsterdam, 2006.
- [2] O. V. Yaltychenko and E. Yu. Kanarovskii, “Electron-vibrational Model for an Organic Dimer Based on Cation Radicals TTF⁺ and Anion Radicals TCNQ⁻”, *Surface Engineering and Applied Electrochemistry* vol. 47(6), pp. 549–554, 2011.
- [3] Г. М. Заславский. *Стохастичность динамических систем*. Москва: Наука, 1984.