

# Кинетика электронного переноса во встроенном в органическую матрицу нанодимере в стохастическом подходе

О. В. Ялтыченко, Е. Ю. Канаровский

*Институт прикладной физики АН Молдовы,  
ул. Академией, 5, г. Кишинев, MD-2028, Республика Молдова, e-mail: [oialt@mail.ru](mailto:oialt@mail.ru)*

Представлена теоретическая модель для описания особенностей электронного переноса электронов в димерных нанокластерах, внедрённых в слабоструктурированную органическую среду окружения. В предложенной модели нанодимер рассматривается как квантово-механическая система, а её взаимодействие со средой окружения имеет стохастический характер. В приближении Хакена-Струбла рассчитана временная зависимость разности заселенностей электронов на центрах нанодимера, которая имеет релаксационный множитель, учитывающий влияние среды окружения на кинетику электронного переноса.

УДК 538.9+539.189.1

## ВВЕДЕНИЕ

Органические материалы с внедрёнными наноконструкциями (нанокластеры, наноструктуры) в последнее время стали приобретать прикладную значимость в нано- и микроэлектронике [1, 2]. Отдельный интерес представляет контроль временного поведения такого рода систем в фемтосекундном диапазоне [3–5]. В нашей работе теоретически исследовано влияние многомодового органического массива на временную динамику простейшей нанокластерной системы – димерного нанокластера с двумя электронами, который находится в органическом массиве.

При изучении малой подсистемы в термостате непосредственно термостат можно описать различными способами, в рамках которых он имеет различные физические модели, учитывающие его микроскопическую природу. В связи с этим обратим внимание на работы [6, 7]. В [6] показано, что термостат независимо от того, насколько сложно его внутреннее строение, может быть описан как линейный двухполюсник. Такая система характеризуется линейной связью между воздействием и откликом на него. Благодаря чему обобщённая восприимчивость системы однозначно связана со спектральной плотностью шумов термостата, как это и следует из теоремы Каллена-Вельтона. Важным выводом [6] является то, что термостат при его любом внутреннем устройстве эквивалентен по математическому описанию системе бесконечного числа гармонических осцилляторов. В свою очередь работа [7], в которой термостат, состоящий из осцилляторов, рассматривался на микроскопическом уровне, имеет очень важное методологическое значение, поскольку эта модель, точно решаемая на уровне обратимых микроскопических уравнений, выявляет логическую связь между различными способами описания диссипативных процессов.

Отметим также, что существуют два основных способа воздействия термостата на малую подсистему. В первом малая подсистема непосредственно взаимодействует с термостатом, а во втором опосредованно – через резервуар окружения. Термостат независимо от его модели и характера связи с взаимодействующим с ним резервуаром задает ему распределение Гиббса по энергиям. Второй способ, как нам кажется, предпочтительнее применять, когда изучаемая наносистема находится в контакте со второй системой пониженной размерности, которую и следует рассматривать как резервуар окружения. Квазидвумерным резервуаром могут служить: подложка, поверхность, мембрана, квазиодномерным – полимерная цепь, квантовая проволока, волновод, а квазинульмерным – квантовая точка или макромолекула. Таким образом, матрица, содержащая исследуемую наносистему, может рассматриваться не только как термостат, но и как резервуар окружения, описываемый равновесной матрицей плотности. Включение в рассмотрение промежуточного резервуара делает возможным последовательное изучение в нём неравновесных квантовых процессов, которые инициированы взаимодействием с малой подсистемой, а затем релаксируют из-за взаимодействия с термостатом. В качестве моделей для резервуара окружения обычно используется либо набор гармонических осцилляторов [8], либо набор двухуровневых систем [3]. Мощным экспериментальным методом, позволяющим непосредственно наблюдать флуктуации в микро- и наносистемах, является метод спектроскопии одиночных молекул, детально описанный в работе [3] (см. также [4, 5]). Метод спектроскопии одиночных молекул эффективен при комнатных температурах, что чрезвычайно важно для биологиче-

ских систем. Принципиальное отличие флуоресценции отдельной наночастицы от флуоресценции ансамбля проявляется не в спектральных характеристиках излучения, а во временном поведении флуоресценции. Теоретический расчет некоторой временной характеристики наносистемы в термостате дает усредненную по флуктуирующим реализациям характеристику, а метод спектроскопии одиночных молекул предоставляет возможность получить множество различных флуктуирующих реализаций этой характеристики. Тем самым метод позволяет детально исследовать временную динамику наночастицы, при этом анализ флуктуирующей люминесценции дает возможность уточнить микроскопическую модель исследуемого процесса.

Для рассмотрения некоторой системы с бесконечным числом степеней свободы, как термостата, необходимое условие – это равновесность. А для описания воздействия термостата на малую подсистему достаточным условием считается задание автокорреляционной функции случайного процесса, описывающего воздействие термостата на малую подсистему (или, что эквивалентно, задание его спектральной плотности шумов). Автокорреляционные функции в виде гауссиана, экспоненты или дельта-функции традиционно используются для описания процессов в неорганических материалах. Для органических материалов стали применяться также автокорреляционные функции в виде затянутой экспоненты или экспоненциально-полиномиальные функции. Именно такого вида автокорреляционные функции адекватно описывают динамику релаксационных процессов в белках и полимерах, учитывая их фрактальность и мультимасштабность. Так, в модели диффузионно-релаксационной динамики атомов  $C_\alpha$  в белке [9] используют экспоненциально-полиномиальную функцию для описания диффузионной коротковременной динамики и долговременной релаксации. Тем не менее дельтаобразная автокорреляционная функция является чрезвычайно полезным инструментом для изучения качественных особенностей относительно сложной системы. Она дает достаточно простой в расчете эталон для сравнения экспериментально наблюдаемых и расчетных временных характеристик системы, тем самым позволяя уточнять саму модель процесса. В нашей работе мы используем приближение Хакена-Стробла, в котором именно такой вид автокорреляционной функции используется и дополнительно считается, что кросс-корреляции равны нулю. Также мы используем подход редуцированной матрицы плотности (теория Рэдфилда), который начал активно применяться для описания кинетических процессов в органических материалах и биологических системах [10–12]. Для отдельных электронных состояний и для колебательного пакета [11–12] в рамках теории Рэдфилда выполнен анализ временного поведения энергии, выхода реакции и степени когерентности в зависимости от параметров термостата. Результаты приемлемы для описания ряда химических и биохимических реакций (например, переноса электрона в реакционном центре фотосинтеза, переноса энергии в фотосинтетических антеннах и реакций изомеризации в белковом окружении). Отметим также характерную особенность теории Рэдфилда – релаксация возбуждения в термостате предполагается значительно более быстрой, чем в малой подсистеме, а связь термостата и малой подсистемы считается слабой.

В рамках рассматриваемого в статье подхода предполагается, что связь между электронными состояниями нанокластера и степенями свободы органического массива можно описывать случайными переменными гауссовского типа. Таким образом, считается, что малая подсистема и термостат взаимодействуют стохастическим образом, а стохастический процесс является процессом марковского типа (белый шум) [10, 13]. При этом двухвременные корреляционные функции  $\delta$  коррелированы и не существует конечного времени корреляции. Белый шум в термостате соответствует хаотической смеси гармонических колебаний всех возможных частот в среднем с равными амплитудами. Это является вполне приемлемым для описания во времени динамических процессов в нанодимере, внедренном в органический массив (матрицу). Отметим также, что, с одной стороны, для органической матрицы характерна низкая структурированность, а с другой – многомодовость, то есть большое количество как высокочастотных, так и низкочастотных степеней свободы [3].

### МИНИМАЛЬНАЯ ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В нашей работе для димера используется модель, в которой он описывается как система “два центра, два электрона”, при этом электронная подсистема каждого центра представлена одной молекулярной орбиталью (подробнее см. [14, 15]). Отметим, что данная модель может применяться не только к димерам органических молекул (например, TTF и TCNQ), но и к димерам из наноструктур, имеющих лишь один уровень размерного квантования (например, наноточки, нанопроволоки).

В неупорядоченных органических материалах (полимеры, в том числе сопряженные и молекулярно-допированные, органические стекла и др.) транспорт носителей заряда осуществляется в ос-

новном прыжковом механизме (то есть переходы между локализованными состояниями идут путём туннелирования). Для описания проводимости и оптических свойств органических систем активно используется гамильтонианы, в которых электронная подсистема рассматривается в приближении Хаббарда [16]. В гамильтониане Хаббарда основными параметрами являются значение корреляционной энергии на одном центре димера и значение интеграла перескока между молекулярными орбиталями центров. Для многих кластеров органических молекул характерна сильная корреляция, то есть большое значение параметра  $U/F$ . Так, при расчёте и количественном анализе спектров оптической проводимости на основе гамильтониана Хаббарда, учитывающего вклад в перенос заряда димеров и тетрамеров молекул BEDT-TTF, например в работе [17], использовалось значение  $U/F \sim 1,5$ .

В качестве нулевого гамильтониана выбран гамильтониан Хаббарда, а потенциал возмущения рассматривается как случайный. Димерный нанокластер с двумя электронами может быть описан нулевым гамильтонианом:

$$H = U \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + F \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Здесь  $U$  – константа одноцентрового электрон-электронного отталкивания электронов в димере,  $F$  – константа одноэлектронного переноса электрона с центра на центр.

Собственные значения и собственные функции гамильтониана (1) имеют вид

$$E_{1,3} = \frac{1}{2}(U \pm \sqrt{(U^2 + 8F^2)}); \quad \varphi_{1,3} = \frac{2(|1 \uparrow 1 \downarrow\rangle + |2 \uparrow 2 \downarrow\rangle) + \frac{1}{2}(|1 \uparrow 2 \downarrow\rangle + |2 \uparrow 1 \downarrow\rangle)}{\sqrt{8F^2 + U^2}(\sqrt{8F^2 + U^2} \pm U)}; \quad (2)$$

$$E_2 = U; \quad \varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1 \uparrow 1 \downarrow\rangle - |2 \uparrow 2 \downarrow\rangle).$$

Исходя из того, что  $|\varphi(t)\rangle = \sum_n \exp(iE_n t) |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n | \varphi(0)\rangle$ , нетрудно рассчитать [15] среднее значение оператора разности заселенностей центров димера  $\langle \hat{n}(t) \rangle = \langle \varphi(t) | \hat{n} | \varphi(t) \rangle$ .

Матрица оказывает влияние на внедрённый в неё димер благодаря смещениям её атомов, которые могут быть описаны в рамках стохастического подхода. Случайные смещения атомов в матрице вызывают поляризацию в димере. При этом изменение локального потенциала центров приводит в основном к случайной модуляции параметра  $U$ , а изменение потенциала межцентрового барьера вызывает случайную модуляцию параметра  $F$ . Далее считаем, что взаимодействие между электронными степенями свободы нанодимера и степенями свободы органической матрицы описывается следующим образом:

$$V(t) = \delta U(t) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \delta F(t) \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Здесь –  $\delta U$ ,  $\delta F$  соответственно описывают флуктуации значений одноцентрового электрон-электронного отталкивания и переноса электрона между центрами нанодимера. Флуктуации обусловлены влиянием органической матрицы на динамические параметры исследуемой системы и являются функциями степеней свободы последнего. В нашем случае считается, что это случайные переменные гауссовского типа.

Уравнение для матрицы плотности, согласно теории Рэдфилда [11, 12] с учетом стохастического характера взаимодействия малой подсистемы с термостатом, имеет вид

$$\dot{\rho}_{st}(t) = -\frac{i}{\hbar} \text{tr}_b [V(t)_I, \rho(0)_s \rho(0)_b] - \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \text{tr}_b [V(t)_I [V(t')_I, \rho(t)_{st} \rho(0)_b]] \quad (4a)$$

или в краткой форме, используя тензор релаксации Рэдфилда, который выражается через матричные элементы  $V(t)$  [11, 12], получаем

$$\dot{\rho}_{nm}(t) = -i\omega_{nm} \rho_{nm}(t) - \sum_{QP} R_{nmQP} \rho_{QP}(t); \quad (4b)$$

$$\omega_{nm} = E_n - E_m.$$

Усреднение производится по степеням свободы органической матрицы. Для упрощения и возможности аналитического решения системы (4б), которая в нашем случае будет системой из 9 дифференциальных уравнений, воспользуемся приближением Хакена-Струобла:

$$\begin{aligned} \langle \delta U(t) \delta U \rangle &= \gamma_1 \delta(t); & \langle \delta F(t) \delta F \rangle &= \gamma_2 \delta(t); \\ \langle \delta U(t) \delta F \rangle &= \langle \delta F(t) \delta U \rangle = 0; & \langle \delta U(t) \rangle &= \langle \delta F(t) \rangle = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Это означает, что перекрёстные флуктуации пренебрежимо малы, а автокорреляционные функции –  $\delta$  коррелированы. Данная модель успешно применяется для моделирования самых разных систем. Так, например, в [13] модель Хакена-Струобла применялась для изучения переноса энергии в светособирающих системах. Для конечной одномерной цепи хромофоров с одной ловушкой (представленных как двухуровневые системы) было показано, что существует оптимальная комбинация времени захвата и времени когерентности, при которой перенос энергии на ловушку максимален. Существенно, что в рамках модели Хакена-Струобла кроме линейной топологии цепи с ловушкой просто рассчитываются и другие её геометрические топологии. Данная модель позволяет максимально упростить расчет, учитывая при этом наиболее характерные особенности системы, к тому же на связь малой подсистемы и термостата не накладывается условие малости. Модель Хакена-Струобла подразумевает пренебрежение временами корреляций, характеризующими фонные колебания термостата, и высокотемпературное приближение, что является вполне приемлемым для слабоструктурированной органической матрицы.

В нашем случае систему из девяти дифференциальных уравнений (4) приближение Хакена-Струобла сводит к системе из трех уравнений относительно диагональных элементов матрицы плотности. Для анализа кинетики электронного переноса в димерном нанокластере достаточно проанализировать временную зависимость  $\rho_{11}(t) - \rho_{33}(t)$ , поскольку именно через эту величину выражается временная зависимость среднего значения разности числа электронов на центрах димера. Решая систему (4) с учётом приближения Хакена-Струобла (5), нетрудно получить следующее аналитическое выражение:

$$\rho_{11}(t) - \rho_{33}(t) = \exp(-\gamma t)(\rho_{11} - \rho_{33}). \quad (6)$$

Таким образом, релаксационные процессы полностью определяются параметром  $\gamma$ , который обычно выражается через межцентровый темп электронной дефазировки [13]. Как известно, параметр  $\gamma$  в случае марковских процессов не зависит от частоты. Отметим, что при этом спектральная плотность термостата линейна, но для правильной асимптотики при  $\omega \rightarrow \infty$  часто дополнительно вводят характеристическую частоту термостата ( $\omega_c$ ) и соответствующий ей обрезающий множитель, так что

$$J(\omega) = \gamma \omega \exp\left(\frac{-\omega}{\omega_c}\right). \quad (7)$$

Спектральная плотность в линейном виде характеризует среды с диссипацией омического типа [8]. Отметим, что органические материалы в роли термостата вполне соответствуют данной категории сред, при этом различным по составу средам в роли термостата будут соответствовать разные значения параметра  $\gamma$ .

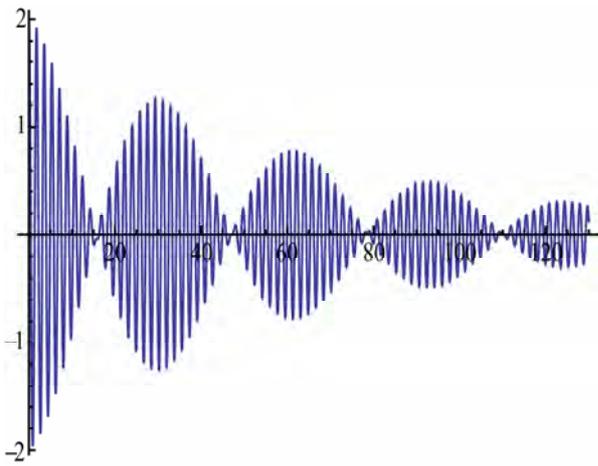
## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Окончательно для разности числа электронов на центрах нанодимера, внедрённого в органическую матрицу, в случае стохастических процессов типа «белого шума» выражение будет иметь вид

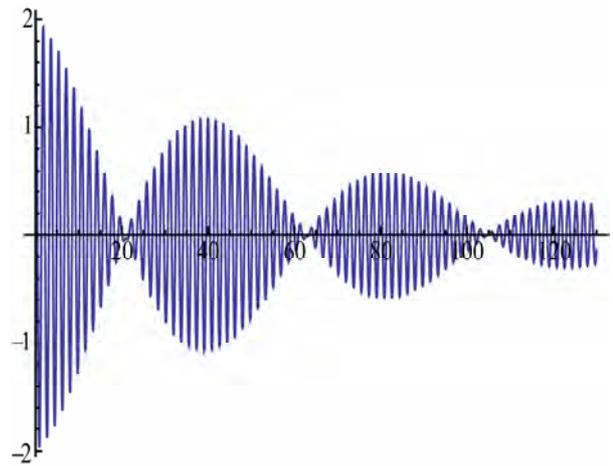
$$\langle n(t) \rangle = \frac{8F^2 \exp(-\gamma t)}{(U^2 + 8F^2)^{1/2}} \left\{ \frac{\cos\left[\frac{(U + \sqrt{U^2 + 8F^2})}{2} t\right]}{\sqrt{(U^2 + 8F^2) + U}} + \frac{\cos\left[\frac{(U - \sqrt{U^2 + 8F^2})}{2} t\right]}{\sqrt{(U^2 + 8F^2) - U}} \right\}. \quad (8)$$

Важно отметить, что величина, определённая в (7), непосредственно связана с дипольным моментом квантового димера:

$$\langle d(t) \rangle = e \langle n(t) \rangle. \quad (9)$$



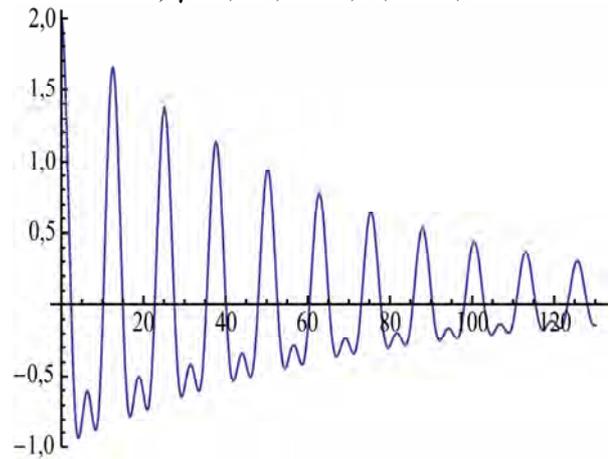
а)  $\gamma = 0,015, U = 0,2, F = 2,5$



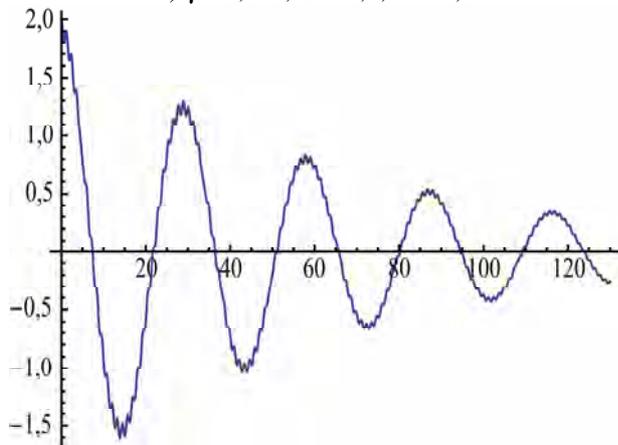
б)  $\gamma = 0,015, U = 0,15, F = 2,5$



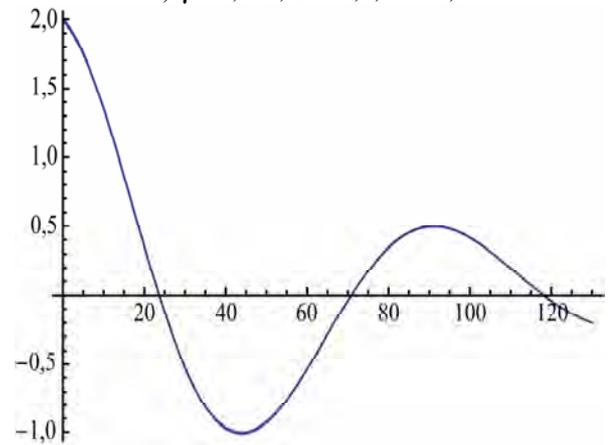
в)  $\gamma = 0,015, U = 0,2, F = 1,6$



г)  $\gamma = 0,015, U = 0,5, F = 0,5$



д)  $\gamma = 0,015, U = 5, F = 0,75$



е)  $\gamma = 0,015, U = 30, F = 1$

Временная зависимость разности числа электронов на центрах нанодимера при различных значениях параметров  $U$  и  $F$ .

В данном исследовании, поскольку нас интересуют лишь особенности временной эволюции перераспределения электронных населённостей в димере, параметр релаксации  $\gamma$  рассматривается как феноменологический, то есть без учёта его внутренней структуры. В общем случае параметр релаксации является функцией константы связи малой подсистемы с термостатом и зависит от спектральной плотности шумов термостата. Например, для частицы в двухъямном потенциале аналитическое выражение для  $\gamma$  во втором порядке теории возмущений получено в [18]. При модельном рассмотрении этого процесса мы будем считать, что значение параметра  $\gamma$  фиксировано, при этом различным численным значениям параметра релаксации  $\gamma$  будет соответствовать то, что как матрица, так и внутренняя в неё димерная наносистема с двумя электронами могут иметь самую разную физическую природу.

Из выражения (8) непосредственно следует, что в ходе временной динамики квантового димера его два электрона, первоначально локализованные на первом центре, стремятся перераспределиться по одному на каждом из центров. На рисунке приведены временные зависимости для величины разности электронных населенностей на центрах димера с параметром релаксации при фиксированном значении  $\gamma = 0,015$ . Представленную на графиках временную эволюцию следует интерпретировать как релаксацию квантового димера из дипольно-активного состояния к магнитоактивному состоянию, при этом дипольный момент димера с течением времени стремится к нулю. Таким образом, данная система эволюционирует к равновесному состоянию с равномерным распределением электронов по центрам. При этом, как следует из рисунка, ситуация, когда в течение времени в квантовом димере реализуется состояние с двумя электронами на втором центре, соответствует противоположному электронному дипольному моменту димера. Такое состояние в системе не является равновесным. В течение времени релаксации частота реализаций такого состояния в рассматриваемой системе, когда два электрона находятся на одном центре квантового димера, уменьшается. Будет ли переход квантового димера из состояния с двумя электронами, локализованными в начальный момент времени на первом центре димера, в состояние с двумя электронами на втором центре происходить очень быстро или в течение более длительного промежутка времени – это зависит от нескольких факторов.

Во-первых, от внутренних параметров квантового димера (то есть от отношения  $U$  и  $F$ ) и, во-вторых, оттого, насколько быстро идут процессы релаксации в термостате, а значит, от особенностей его структуры. В модели Хакена-Струобла предполагается, что процессы релаксации в самом термостате идут мгновенно (предел очень коротких времен корреляции в термостате). Тем не менее мы можем оценить наличие ненулевых времен корреляций в термостате, используя следующие качественные рассуждения. Для многих органических материалов характерно наличие наряду с низкочастотными колебаниями и высокочастотных дипольно-активных степеней свободы. Низкочастотные колебания локального окружения будут раскачивать межцентровую димерную моду, а высокочастотные через диполь-дипольное взаимодействие будут раскачивать колебательные моды как внутри молекулярных центров димера, так и межцентровую моду благодаря наличию у неё релаксирующего дипольного момента. Следовательно, в колебательной подсистеме димера будет запасаться энергия. Значит, можно считать, что процесс перекачки энергии из малой подсистемы в термостат будет заторможен, а это можно учесть как эффективное уменьшение параметра диссипации в рамках описанной модели. В подтверждение наших рассуждений обратим внимание на один из результатов работы [11]: для системы из двух электронных состояний, взаимодействующих с фононами на каждом центре и между собой через потенциал неадиабатичности, получено, что при сильной диссипации может происходить резкое замедление потерь энергии в колебательной подсистеме этих электронных состояний.

Как известно (см., например, в [15]), взаимодействие с внутридимерной колебательной модой и внутренними модами молекулярных центров приводит к перенормировке параметров  $U$  и  $F$ . При этом ход осцилляций разности электронных населённости соответственно изменится. Таким образом, для качественного описания и сравнения с экспериментом можно использовать выражение (8), подбирая соответствующим образом параметры  $\gamma$ ,  $U$ ,  $F$ . Отметим также, что представленную модель можно применять для разнообразных димерных систем, внедрённых в матрицы другого типа (полимерные или аморфные).

## ВЫВОДЫ

Таким образом, влияние органической матрицы в роли термостата, задающего релаксацию в режиме омической диссипации, приводит к выравниванию электронных населённости центров в димере с двумя лишними электронами. При этом внутрикластерная динамика электронов в нанодимере проявляется как эффект переключения малой подсистемы из дипольно-активного состояния в магнитоактивное состояние. Применяемый в работе стохастический подход является вполне реалистичным для моделирования кинетики и динамики электронного переноса в нанодимере, который внедрён в матрицу.

Продемонстрированный в данной работе эффект переключения, обусловленный релаксационной кинетикой электронного переноса в моделируемой системе (нанодимер с двумя электронами в слабоструктурированной органической матрице), делает такого рода системы привлекательными для применения в приборных приложениях в роли электронных переключателей, использующих внешние электрические и магнитные в качестве управляющих факторов.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Суздаев И.П. *Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов*. М.: Ком-Книга, 2006. 592 с.
2. Пул Ч., Оуэнс Ф. *Нанотехнологии*. Пер. с англ. М.: Техносфера, 2005. 336 с.
3. Осадько И.С. Флуктуирующая флуоресценция одиночных молекул и полупроводниковых нанокристаллов. *Успехи физических наук*. 2006, **176**(1), 23–57.
4. Вайнер Ю.Г. Спектроскопия одиночных молекул и динамика неупорядоченных твердых тел. *Успехи физических наук*. 2004, **174**(6), 679–683.
5. Naumov A.V., Vainer Yu.G., Bauer M., Kador L. Dynamics of a Doped Polymer at Temperatures where the Two-level System Model of Glasses Fails: Study by Single-molecule Spectroscopy. *J. Chem. Phys.* 2003, **119**(12), 6296–6301.
6. Халили Ф.Я. Нулевые колебания, нулевые флуктуации и флуктуации нулевых колебаний. *УФН*. 2003, **173**(3), 301–316.
7. Татарский В.И. Пример описания диссипативных процессов на основе обратимых динамических уравнений и некоторые замечания относительно флуктуационно-диссипационной теоремы. *Успехи физических наук*. 1987, **151**(2), 273–307.
8. Голышев В.Ю. Динамика квантового гармонического осциллятора в диссипативном окружении. *Письма в ЖТФ*. 2002, **28**(2), 50–55.
9. Kneller G.R., Hinsen K., Calligari P. A Minimal Model for the Diffusion-Relaxation Backbone Dynamics of Proteins. *J. Chem. Phys.* 2012, **136**, 191101 (4 pages).
10. Silbey R. Description of Quantum Effects in the Condensed Phase. *Procedia Chemistry*. 2011, **3**(1), 188–197.
11. Глебов И.О., Еремин В.В. Влияние диссипации на колебательную динамику в системе двух взаимодействующих электронных состояний. *Журнал физической химии*. 2008, **82**(4), 684–689.
12. Еремин В.В., Глебов И.О. Скорость потери энергии и когерентности в одномерной колебательной системе, взаимодействующей с термостатом. *Теоретическая и математическая физика*. 2007, **153**(1), 130–144.
13. Gaab K.M., Bardeen C.J. The Effects of Connectivity, Coherence, and Trapping on Energy Transfer in Simple Light-Harvesting Systems Studied Using the Haken-Strobl Model with Diagonal Disorder. *J. Chem. Phys.* 2004, **121**(16), 7813–7820.
14. Pilot R., Bozio R. Nonlinear Infrared and Optical Responses of a Holstein-Peirls-Hubbard Dimmer. *J. Phys. Chem. B*. 2005, **109**(41), 19082–19089.
15. Yaltychenko O.V., Kanarovskii E.Yu. Electron-Vibrational Model for an Organic Dimer Based on Cation Radicals TTF<sup>+</sup> and Anion Radicals TCNQ<sup>-</sup>. *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*. 2011, **47**(6), 549–554.
16. Изюмов Ю.А. Модель Хаббарда в режиме сильных корреляций. *УФН*. 1995, **165**(4), 403–427.
17. Власова Р.М., Петров Б.В., Семкин В.Н. Оптические исследования межмолекулярных электронных взаимодействий и “свободных носителей” заряда в квазидвумерных органических проводниках и сверхпроводниках группы  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]Br<sub>x</sub>Cl<sub>1-x</sub>. *ФТТ*. 2011, **53**(9), 1691–1698.
18. Ovchinnikov Yu.N. Dynamics of a Particle in a Two-Well Potential. *Sov. Phys. JETP*. 1988, **67**(5), 1074–1079.

Поступила 09.04.12

### Summary

This paper presents a theoretical model to describe the features of the electronic transfer in the dimer nano-clusters embedded in a weak-structured organic environment. In the proposed model, the nanodimer is considered to be a quantum mechanical system. its interaction with environment having a stochastic character. In the Haken-Strobl approximation the time dependence of the difference in the populations of electrons on the nanodimer centers is calculated, which has a relaxation factor that takes into account the effect of environment on the kinetics of electron transfer.