

**ПОЛИМЕРЛАР КИМЁСИ ВА ФИЗИКАСИ ИНСТИТУТИ ҲУЗУРИДАГИ
ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ DSc 02/30.12.2019.К/ФМ/Т.36.01
РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

УРҒАНЧ ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ

МАТЁҚУБОВ ҲИКМАТЖОН ШУҲРАТОВИЧ

**ЭЛЕКТР ЎТКАЗУВЧАН ПОЛИМЕРЛАРДА ЗАРЯД
ТАШУВЧИЛАР ДИНАМИКАСИНИ МОДЕЛЛАШТИРИШ**

01.04.06-Полимерлар физикаси

**ФИЗИКА - МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ БЎЙИЧА ФАЛСАФА ДОКТОРИ (PhD)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

Тошкент-2020

**Физика-математика фанлари бўйича фалсафа (PhD) доктори
диссертацияси автореферати мундарижаси**
**Оглавление автореферата диссертации доктора философии (PhD) по
физико-математическим наукам**
**Contents of dissertation abstract of doctor of philosophy (PhD) on physical –
mathematical sciences**

Матёкубов Ҳикматжон Шухратович Электр ўтказувчан полимерларда заряд ташувчилар динамикасини моделлаштириш.....	3
Матякубов Хикматжон Шухратович Моделирование динамики носителей заряда в электропроводящих полимерах.....	21
Matyokubov Khikmatjon Shukhratovich Charge carrier dynamics modeling in conducting polymers	39
Эълон қилинган ишлар рўйхати Список опубликованных работ List of published works.....	42

**ПОЛИМЕРЛАР КИМЁСИ ВА ФИЗИКАСИ ИНСТИТУТИ ҲУЗУРИДАГИ
ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ DSc 02/30.12.2019. К/ФМ/Т.36.01
РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

УРҒАНЧ ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ

МАТЁҚУБОВ ҲИКМАТЖОН ШУҲРАТОВИЧ

**ЭЛЕКТР ЎТКАЗУВЧАН ПОЛИМЕРЛАРДА ЗАРЯД
ТАШУВЧИЛАР ДИНАМИКАСИНИ МОДЕЛЛАШТИРИШ**

01.04.06-Полимерлар физикаси

**ФИЗИКА - МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ БЎЙИЧА ФАЛСАФА ДОКТОРИ (PhD)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

Тошкент-2020

**Физика – математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD) диссертацияси мавзуси
Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида
№В2019.2.PhD/FM138 рақам билан рўйхатга олинган.**

Диссертация Урганч давлат университетида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгаш веб-саҳифасида (polchemphys.uz) ҳамда «ZiyoNET» Ахборот таълим порталида (www.ziyounet.uz) жойлаштирилган.

Илмий раҳбар: **Матрасулов Даврон Уринович**
физика-математика фанлари доктори, профессор

Расмий оппонентлар: **Нурғалиев Илнар Накипович**
физика-математика фанлари доктори

Явидов Баҳрам Янгибаевич
физика-математика фанлари доктори

Етакчи ташкилот: **Самарқанд давлат университети.**

Диссертация ҳимояси Полимерлар кимёси ва физикаси институти ҳузуридаги илмий даражалар берувчи DSc 02/30.12.2019. К/ФМ/Т.36.01 рақамли Илмий кенгашнинг 2020 йил «27» ноябрь соат 10:00 даги мажлисида бўлиб ўтади. (Манзил: 100128, Тошкент шаҳри, Абдулла Қодирий кўчаси, 7^о. Тел: (+99871) 241-85-94; факс: (+99871) 241-26-61, e-mail: polymer@academy.uz).

Диссертация билан Полимерлар кимёси ва физикаси институтининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин (15 рақами билан рўйхатга олинган). (Манзил: 100128, Тошкент шаҳри, Абдулла Қодирий кўчаси, 7^о. Тел: (+99871) 241-85-94).

Диссертация автореферати 2020 йил «10» 10 куни тарқатилди.
(2020 йил «09» 10 даги 2 рақамли реестр баённомаси).



С.Ш. Рашидова
Илмий даражалар берувчи илмий кенгаш раиси, к.ф.д., профессор, академик

М.М. Усманова
Илмий даражалар берувчи илмий кенгаш котиби, к.ф.н., катта илмий ходим.

С.С. Негматов
Илмий даражалар берувчи илмий кенгаш қошидаги илмий семинар раиси, т.ф.д., профессор, академик

КИРИШ (фалсафа доктори (PhD) диссертацияси аннотацияси)

Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати. Бугунги кунда экологик ҳафвсиз технологиялар ва қайта тикланувчи энергия манбалари асосида кам - углеродли энергетикага ўтишга алоҳида эътибор берилмоқда. Бу борада самарали, эгилувчан, экологик ҳафвсиз ва рақобатбардош электрон қурилмалар, жумладан қуёш элементларининг янги авлодларини яратиш долзарб масалалардан бири ҳисобланади.

Ҳозирги кунда дунёда етакчи тадқиқотчилар томонидан диссертация мавзуси билан боғлиқ бўлган ва уларнинг долзарблиги ва заруратини белгилаб берувчи қатор илмий-тадқиқот ишлари олиб борилмоқда. Бунда полимерлар асосида яратилган органик фотовольтаик элементларга алоҳида эътибор қаратилмоқда. Бу элементларнинг фойдали иш коэффициенти юқори бўлиб уларнинг перовскитлар билан гибридларининг конверсион фойдали иш коэффициенти 20% дан ошади. Бундай полимерлар асосидаги қуёш элементларининг конверсион хусусиятларини янада ошириш кремний асосидаги қуёш элементларини қисман ёки тўлиқ алмаштириш, фотовольтаик полимерларда заряд кўчишининг реалистик моделларини яратиш каби йўналишларда мақсадли илмий изанишларни амалга ошириш муҳим вазифалардан бири ҳисобланади.

Мамлакатимизда қайта тикланувчи энергия манбаларини ривожлантиришнинг илмий - амалий тадқиқотига доир тадқиқотларга алоҳида эътибор қаратилмоқда. Жумладан, ярим ўтказгичли гетероструктуралар асосида самарадор қуёш элементлари яратиш, қуёш энергиясини кучли оптик концентраторлар ёрдамида жамлаш ва йўналтириш, мавжуд фотовольтаик конверсия технологияларини оптималлаштириш ва қайта тикланувчи энергия манбаларнинг бошқа турларини такомиллаштириш каби қатор йўналишлар бўйича муҳим натижаларга эришилди. Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича Ҳаракатлар¹ стратегиясида мамлакатимиз илм-фанини ривожлантириш ҳамда фундаментал тадқиқот натижаларини амалиётга тадбиқ қилиш вазифалари белгилаб берилган. Бу борада ресурс-тежамкор органик электроника асосини ташкил этувчи ўтказувчан полимерлардаги заряд ташиш жараёнларининг реалистик моделларини яратиш, конверсион самарадорлик нуқтаи назаридан энг оптимал тармоқланиш архитектурасини танлаш орқали заряд динамикасини самарали бошқаришга йўналтирилган илмий-амалий тадқиқотлар муҳим аҳамиятга эга.

Ушбу диссертация тадқиқоти муайян даражада Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2015 йил 5 майдаги ПҚ-2343 - сон « 2017 — 2021 йилларда қайта тикланувчи энергетикани янада ривожлантириш, иқтисодиёт тармоқлари ва ижтимоий соҳада энергия самарадорлигини ошириш чора-тадбирлари дастури тўғрисида»ги, ва 2017 йил 8 февралдаги ПФ-4947-сон «Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича Ҳаракатлар стратегияси тўғрисида» ги фармони ҳамда мазкур фаолиятга тегишли бошқа норматив-

¹ 2017 йил 07 февральдаги “Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича ҳаракатлар стратегияси тўғрисида” Ўзбекистон Республикаси Президентининг Фармони.

хуқуқий ҳужжатларда белгиланган вазифаларни амалга оширишга хизмат қилади.

Тадқиқотнинг Республика фан ва технологиялари ривожланишининг асосий устувор йўналишларига мослиги. Диссертация республикада фан ва технологиялар ривожланишининг II. «Энергетика, энергия ва ресурстежамкорлик» ва III. «Қайта тикланувчи энергия манбаларидан фойдаланиш» устувор йўналишларига доирасида бажарилган.

Муаммонинг ўрганилганлик даражаси. Дунёнинг кўпгина мамлакатларида ўтказувчан полимерларда заряд ташувчиларнинг динамикасини ўрганиш ва улардан амалиётда фойдаланиш бўйича илмий изланишлар жадал билан олиб борилмоқда. Чоп этилган нашрларнинг кўпчилигида асосан чизиқли полимерлар ўрганилган бўлиб, уларнинг тавсифланиши бир ўлчамли Су-Шиффер-Хигер панжаралари моделдан фойдаланишга асосланган. Ушбу модель асосида ўтказувчан полимерларнинг баъзи бир турларида экситонлар, поляронлар ва зарядланган солитонлар сингари турли хил заряд ташувчилари механизмларини ўрганиш бўйича илмий йўналишни ривожлантириш Н.Shirakawa, A. J. Heeger, A. G. Mac Diarmid ва бир қатор илмий мактаблар катта хисса қўшишган. Полиацетиленда экситонларнинг турли хил квант-механик моделларини яратиш урар асосида полимернинг зонавий структурасини ва бошқа электрон хоссаларини аниқлаш соҳасида S. Abe, M. J. Rice, S. Brazovskii ва бошқа олимларнинг илмий тадқиқот ишларини таъкидлаб ўтиш зарур.

Республикамизда мазкур йўналиш ривожланишига С.Ш. Рашидова, Б.Л. Оксенгендлер, Н.Н. Тураева, Н.Р. Ашуров ва бошқалар ўзларининг изланишлари билан ўтказувчан полимерлар ва органик қуёш элементларининг электрон хоссалари статистик физика, синергетика ва квант механикасига асосланган моделлар яратишда ўз хиссаларини қўшишган.

Ушбу изланишларга қадар адабиётларда ўтказувчан полимерларда, айниқса уларнинг тармоқланган турларида заряд ташувчиларнинг моделлаштириш ва уларнинг кучиш жараёнларини бошқариш масалалари кам ўрганилган. Мазкур жараёнларнинг самарали моделларини яратиш, ўтказувчан полимерларда заряд транспортини бошқариш масалаларини ечиш бундай полимерлар асосида яратилган органик электрон қурилмалар ва қуёш элементларининг самарадорлиги ва ресурс-тежамкорлигини ошириш истиқболларини яратади.

Тадқиқотнинг диссертация бажарилган илмий-тадқиқот муассасасининг илмий-тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги. Диссертация тадқиқоти Урганч давлат университети илмий тадқиқот ишлар режасининг Ф-2-003 "Қуйи ўлчамли тизимларда кўп электронли фотовольтаикали жараёнлар ва қуёш энергияси конверсияси" (2015-2017йй); М/UZ-GER-06/2016 (UZB-007) "Полимерлар асосидаги юпқа плёнкали элементларда заряд ташувчиларининг динамикаси" (2019-2021йй) фундаменталь тадқиқотлари доирасида бажарилган.

Тадқиқотнинг мақсади ўтказувчан полимерларда зарядланган солитонлар, экситонлар ва поляронлар динамикасини моделлаштириш ва ушбу жараёнларни бошқариш услубларини ишлаб чиқишдан иборат.

Тадқиқотнинг вазифалари:

тармоқланган ўтказувчан полимерларда экситон, динамикасини моделлаштириш. Полимер тармиокланиш нукталаридан экситонлар орқага кайтмасдан утиш шартларини келтириб чиқариш. Утказувчан полимерларнинг электр ўтказчанлик характеристикаларини ҳисоблаш;

Su-Schiffer-Heeger (SSH) деб аталувчи моделни умумлаштириш ёрдамида тармоқланган полимерларда поляронлар динамикасини моделлаштириш. Полимер тармиокланиш нукталаридан поляронлар орқага кайтмасдан утиш шартларини келтириб чиқариш. Тармоқланган ўтказувчан полимерларда полярон мобиллик характеристикаларини ҳисоблаш;

ўтказувчан полимерларда зарядланган солитонлар динамикасини моделлаштириш. Солитонларнинг тармоқланиш нукталаридан орқага кайтмасдан утиш шартларини келтириб чиқариш.

Тадқиқотнинг объекти — тармоқланган ўтказувчи полимерлар, зарядланган солитон, полярон ва экситон квазизарралари.

Тадқиқотнинг предмети — тармоқланган ўтказувчан полимерларда заряд ташувчиларнинг динамикаси, заряд транспортининг физик характеристикаларини ҳисоблашдан иборат.

Тадқиқотнинг усуллари. Тадқиқотларда Шредингер тенгламасини, синус-Гордон тенгламасини ва SSH моделидан келиб чиқувчи бошқа нозичли тўлқин тенгламаларни сонли ва аналитик тарзда ечиш усулларидан фойдаланилган.

Тадқиқотнинг илмий янгилиги қуйидагилардан иборат:

илк бор тармоқланган ўтказувчан полимерларда зарядланган солитонлар транспортини тавсифловчи модель таклиф қилинган;

тармоқланган ўтказувчан полимерларда зарядланган солитонларнинг мобиллик характеристикалари ҳисобланган;

полимернинг тармоқланиш нукталари орқали зарядланган солитонларнинг қайтмасдан ўтиши учун шартлар аниқланган;

тармоқланган ўтказувчан полимерларда экситонлар динамикасини тавсифловчи модель таклиф қилинган;

тармоқланиш тугунларида экситонларнинг тескари сочилишининг мавжуд эмаслигини таъминловчи шартлар олинган;

тармоқланиш тугунларида экситонларнинг мобиллик характеристикалари ҳисобланган;

тармоқланган полимерларда Су-Шиффер-Хигер моделининг умумлаштирилган тури таклиф қилинган.

Тадқиқотнинг амалий натижалари қуйидагилардан иборат:

Диссертация доирасида тармоқланган ўтказувчан полимерларда заряд ташувчилар динамикасини тавсифловчи катор моделлар таклиф қилинган. Ушбу моделлар ёрдамида органик электроникада кенг камровда жорий этилиш истикболга эга булган функционал материаллар электрон хусусиятларини

такомиллаштириш имконипайдо булади. Бундан ташқари, мазкур моделларни куллаш учинчи авлод қуёш элементларида фойдаланиладиган утказувчан полимерлар конверсион самарадорлигини энг оптимал тармоқланиш архитектурасини танлаш орқали ошириш имконини беради.

Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги. Заряд динамикасини моделлаштириш учун қўлланилган ёндашувлар ва услубият ҳар томонлама ўрганилганлиги ва синалганлиги, ҳамда графларда тўлқин динамикасини ўрганиш контекстида кенг эътироф этилганлиги билан изоҳланади. Иш бўйича ҳулосалар квант механикасининг асосий тенгламаларидан синус-Гордон ва ностационар Шредингер тенгламаларидан фойдаланилган ҳолда олинган натижалар асосида қилинди. Олинган натижаларнинг тастиғи сифатида республика ва ҳалқаро илмий конференцияларда муҳокамалар қилинган.

Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти.

Тадқиқот натижаларнинг илмий аҳамияти шундан иборатки, турли хил тармоқланиш топологиясига эга бўлган ўтказувчан полимерларда солитонлар заряд оқимининг вақтга боғлиқлиги ва тармоқланиш нуқтасида оқим сақланиш қонуни аниқланган. Тармоқланган ўтказувчан полимерларда экситонлар энергетик спектридаги қонуниятлар аниқланган. Квант графларни қўллашга асосланган ёндашувдан фойдаланиб тармоқланган полимерлар учун SSH-моделни умумлаштириш таклиф қилинган. Солитонларнинг тармоқланган полимерларда тармоқланиш нуқтасидан қайтмасдан ўтишини аниқлашга имкон берувчи зарядланган солитонларнинг бошқариладиган транспорти мавжудлиги исботланганлиги билан изоҳланади.

Тадқиқот натижаларнинг амалий аҳамияти, турли заряд ташувчилари динамикасининг компьютерда моделлаштирилиши, ҳамда заряд кўчишининг компьютер визуализацияси алгоритми ва дастури ишлаб чиқилди. Графлардаги тўлқин тенгламалар ёрдамида заряд ташувчиларнинг динамикасини моделлаштириш йўли билан тармоқланган ўтказувчи полимерлардаги электрон жараёнлар илк бора тадқиқ қилинган. Олинган натижалар органик электрон қурилмалар функционал хусусиятларини такомиллаштириш га кулланиши мумкин. Фойдаланилган ёндашув ва таклиф қилинган моделлар полимерли аралашмани чанглатганда плёнка юзасида фотоволтаик полимерларнинг тармоқланган структуралари вужудга келадиган, органик юпка плёнкали қуёш ячейкаларида заряд транспортини моделлаштириш учун ҳам қўлланилиши имкониятини беради.

Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши. Электр ўтказувчан полимерларда заряд ташувчилар динамикасини моделлаштириш бўйича олинган илмий натижалар асосида:

ишлаб чиқилган тармоқланган тизимлар SSH-моделни БФ2-022 рақамли «Тармоқланган углерод наноструктураларида квант транспорти» лойиҳаси паст ўлчамли тармоқланган углерод нанотизимларида квазизарраларнинг квант транспорти характеристикаларини ҳисоблашда қўлланилган (Ўзбекистон Республикаси Физика Жамиятининг 2020 йил 15 июндаги 3/02-10-сон маълумотномаси). Натижада ушбу модельни қўллаш паст ўлчамли

тармоқланган квант материалларида квази-зарралар транспортини бошқариш масаласини ечиш имконини берган;

тармоқланган фотовольтаик полимерларда экситон транспорти модели ўтказувчан полимерлар асосида яратилган юпқа пленкали органик қуёш элементлари конверсион самарадорлиги бўйича ҳисоблар Германиялик мутахассислар томонидан қуёш элементлари конверсион самарадорлигини ошириш ва уларнинг функционал хусусиятларини оптималлаштиришда фойдаланилган (Вуппертал университетининг 2020 йил 20 июндаги маълумотномаси). Натижада мазкур моделни қўллаш органик электрон ускуналарда ва қуёш элементларида пайдо буладиган тармоқланган полимерларда экситон транспортини бошқариш масаласини ечиш ва қуёш элементларининг конверсион самарадорлигини ошириш имкониятини берган;

ишлаб чиқилган тармоқланган полимерларда зарядланган солитонлар транспорти модели Германиялик мутахассислар томонидан органик электрон жиҳозлар ва материаллар функционал хусусиятларини оптималлаштириш орқали уларнинг ресурс-тежамикорлигини таъминлашга эришишга жорий қилиш истикболи кўрсатилган (Вьюрзбург университетининг 2020 йил 18 мартдаги маълумотномаси). Илмий натижаларнинг қўлланилиши тармоқланган Жосефсон контакларида квант процессорлари моделини экспериментал амалга ошириш имконини берган.

Тадқиқот натижаларининг апробацияси. Диссертация бўйича олинган асосий натижалар 8 та халқаро ва 6 та республика илмий-амалий анжуманларида муҳокамадан ўтказилган.

Тадқиқот натижаларининг эълон қилиниши. Диссертация мавзуси бўйича жами 19 та илмий иш чоп этилган, шулардан, Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссиясининг фалсафа докторлик (PhD) диссертациялари асосий илмий натижаларини чоп этиш тавсия этилган илмий нашрларда 5 та мақола, жумладан, 1 таси республика ва 4 таси ҳорижий журналларда нашр этилган.

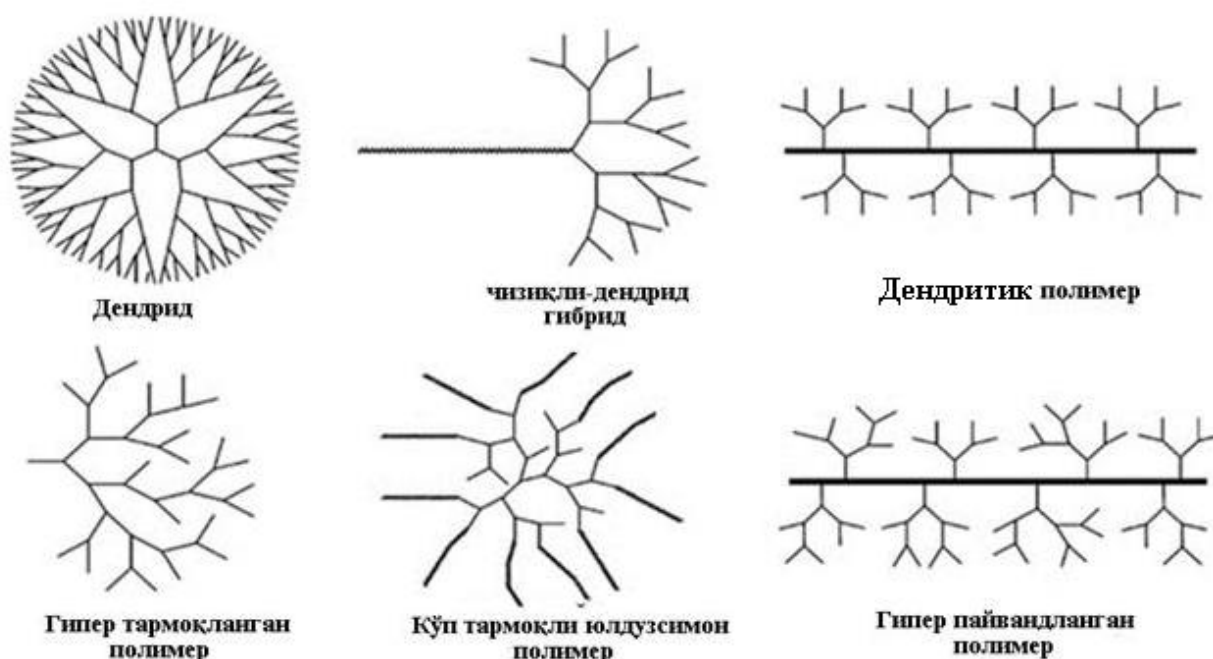
Диссертациянинг тузилиши ва ҳажми. Диссертация таркиби кириш, тўртта боб, хулоса, фойдаланилган адабиётлар рўйхати ва иловалардан иборат. Диссертациянинг ҳажми 76 бетни ташкил этади.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

Кириш қисмида диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати, тадқиқотнинг республика фан ва технологияларини ривожлантиришнинг устувор йўналишларига мос келиши асосланган. Диссертация мавзуси бўйича чет элдаги илмий тадқиқотларнинг қисқача маълумоти ва муаммонинг ўрганилганлик даражаси келтирилган, тадқиқотнинг мақсад, вазифалари шакллантирилган, унинг объекти ва предмети кўрсатилган, тадқиқотнинг амалий натижалари ва илмий янгиликлари баён қилинган, олинган натижаларнинг назарий ва амалий аҳамияти очиқ берилган, тадқиқот натижаларининг қўлланилиши, диссертация тузилиши ва нашр қилинган илмий ишлар тўғрисида маълумотлар келтирилган.

Диссертациянинг “�тказувчан полимерлар физикаси асослари ва тармоқланган квант структуралар назарияси” номли биринчи бобида SSH-модель асосида ўтказувчи полимерларнинг бир ўлчамли панжаравий назарияси, экситонлар ва квант графлар назарияси ёритилган ҳамда адабиётлар таҳлили, диссертацияда ҳал қилинадиган муаммоларнинг ҳозирги замон ҳолати ва диссертацияда фойдаланилган асосий методлар ва ёндашувларнинг тавсифи келтирилган.

Диссертациянинг “Тармоқланган полимерларда зарядланган солитонлар транспорти” номли иккинчи бобида заряд ташувчилар динамикасини зарядланган солитонлар кўринишида ўрганилган. Жумладан, мазкур бобда тармоқланган полимерларда зарядланган солитонлар ташувчиларининг транспортини тавсифловчи метрик графлардаги синус-Гордон тенгламасига асосланган модель таклиф қилинган.

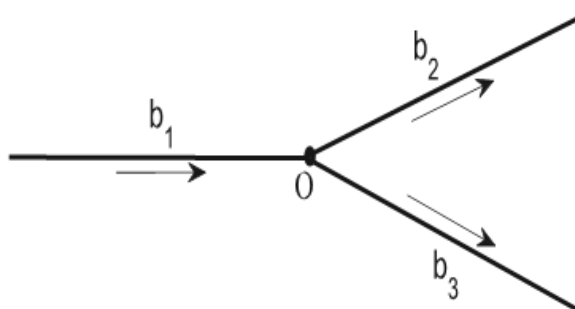


1-расм. Дендрид полимерларнинг схематик тавсифи

Ўтказувчи полимерларда заряд транспортининг солитонли механизми органик электроника материаларида намоён бўлувчи механизмлардан бири ҳисобланади. Кинк-солитонлар томонидан заряднинг ушлаб олиниши ва кўчирилиши заряд кўчишининг яна битта механизми ҳисобланади. Кейинги вақтларда тармоқланган архитектурали ўтказувчи полимерларга катта эътибор қаратилмоқда. Бу полимерларнинг шундай кўринишики, чизикли занжирда, тармоқланиш нуқтаси ёки тугуни ёки чўққиси деб аталувчи нуқтадан бошлаб, икки ёки бир неча тармоққа ажралади. Тармоқланиш структураси турли хил архитектураларга эга бўлиши мумкин, масалан, юлдуз, дарахт, ҳалқа ва шу каби кўринишларга эга бўлиши мумкин (1-расм).

Тармоқланишнинг бундай қоидаси структуранинг топологияси деб аталади. Полимернинг топологияси жуда мураккаб бўлса, у гипер-тармоқланган полимер деб аталади. Тармоқланган полимерлар ўзининг чизикли

аналогларидан қатор муҳим жихатлари билан фарқ қилади. Бундай полимер, бир хил молекуляр массали чизикли полимерга караганда, янада ихчамроқ конформацияни ҳосил қилади. Бундан ташқари, тармоқланиш топологиясига боғлиқ ҳолда, электрон ва эластик хоссалар чизикли полимерларнинг хоссаларидан тўлиқлигича фарқ қилиши мумкин. Аввало оддий ҳолни қараб чиқамиз: -боғланиш кўринишига эга бўлган юлдузсимон тармоқланган полимер. Биз тармоқларни, полимер занжир қалинлигига нисбатан, жуда узун деб тасаввур қиламиз. У ҳолда бундай полимерни графнинг тугуни ёки тармоқланиш нуқтаси деб аталувчи 0 нуқтада бириккан яримчексиз тармоқларга эга оддий юлдуз граф сифатида қараш мумкин (2-расм).



2-расм. Оддий юлдузсимон граф.

Бундай структурадаги солитон координаталари $x_1 \in (-\infty, 0]$ ва $x_{2,3} \in [0, \infty)$ сингари аниқланади, тармоқланиш нуқтасига 0 мос келади. Бундай тармоқланган полимерда зарядланган солитон динамикаси метрик графлардаги синус – Гордон тенгламаси терминлари бўйича тавсифланиши мумкин, у ҳар бир тармоқда, З. Собиров в.б.нинг ишларига асосан:

$$\psi_{ktt} - \alpha_k^2 \psi_{kxx} + \beta \sin \psi_k = 0, \quad (1)$$

сифатида ёзилиши мумкин, бу ерда ψ_k k -инчи тармоқдаги панжара силжишини тавсифлайди. Ушбу тенгламани ечиш учун граф тармоқланиш нуқтасида (туғунда) чегаравий шартларини қўйиш ва тармоқлар учларида тўлқин функциясининг асимптотикасини аниқлаш керак. Тугунда чегаравий шартларни қўйиш учун тўлқин функциясининг узлуксизлигидан:

$$\psi_1(0, t) = \psi_2(0, t) = \psi_3(0, t) \quad (2)$$

ҳамда энергиянинг, заряднинг ва импульснинг сақланиш қонунлари сингари фундаментал сақланиш қонунларидан фойдаланиш мумкин. Чексизликда асимптотик шартларни қандайдир бутун $n_k, k=1, 2, 3$, сон учун қуйидагича ёзиш мумкин: $x_1 \rightarrow \infty$ да $\partial_x \psi_1(\partial_x, t)$, $\partial_t \psi_1(x_1, t) \rightarrow 0$ ҳамда $\psi_1(x_1, t) \rightarrow 2\pi n_1$ бўлади

ва қандайдир $k=2, 3$, сон учун $x_k \rightarrow \infty$ да $\partial_x \psi_k(x_k, t)$, $\partial \psi_1(\partial_x, t) \rightarrow 0$ ҳамда $\psi_k(x_k, t) \rightarrow 2\pi m_k$ бўлади.

2-расмдаги юлдузсимон граф учун энергия ва топологик заряд (мос ҳолда) қуйидагича аниқланади:

$$E(t) = \sum_{k=1}^3 \frac{1}{\beta_k} \int B_k \left[\frac{1}{2} (\psi_{kt}^2 + \alpha_k^2 \psi_{kx}^2) + \beta_k (1 - \cos \psi_k) \right] dx, \quad (3)$$

ҳамда

$$2\pi Q = \frac{\alpha_1}{\sqrt{\beta_1}} \int_{-\infty}^0 \psi_{1x} dx + \sum_{k=2}^3 \frac{\alpha_k}{\sqrt{\beta_k}} \int_0^{+\infty} \psi_{kx} dx, \quad (4)$$

бу ерда $B_1 = (-\infty, 0)$, $B_{2,3} = (0, +\infty)$. Энергиянинг ва топологик заряднинг қуйидагича сақланиш қонунларидан

$$\frac{dE}{dt} = 0, \quad \frac{dQ}{dt} = 0,$$

тармоқланиш тугунларида қуйидагича чегаравий шартларга эга бўламиз:

$$\frac{\alpha_1^2}{\beta_1} \psi_{1x} \Big|_{x_1=0} = \frac{\alpha_2^2}{\beta_2} \psi_{2x} \Big|_{x_2=0} + \frac{\alpha_3^2}{\beta_3} \psi_{3x} \Big|_{x_3=0}. \quad (5)$$

Бу (2) ва (5) тенгламалар орқали берилган тугундаги чегаравий шартларга эга (1) тенгламанинг аниқ солитон (кинк) ечимлари қуйидаги йиғинди қоидаси бажарилганида олиниши мумкинлиги 3. Собиров в.б.нинг ишида кўрсатилган:

$$\frac{\alpha_1}{\sqrt{\beta_1}} = \frac{\alpha_2}{\sqrt{\beta_2}} + \frac{\alpha_3}{\sqrt{\beta_3}}. \quad (6)$$

У ҳолда ечимни қуйидагича ёзса бўлади:

$$\psi_k(x, t) = \nu \left(\frac{\sqrt{\beta_k}}{\alpha_k} x, \sqrt{\beta_k} t \right), \quad (7)$$

бу ерда

$$\nu(x, t) = 4 \arctan \left[\exp \left(\pm \frac{x - x_0 - \nu t}{\sqrt{1 - \nu^2}} \right) \right], \quad (8)$$

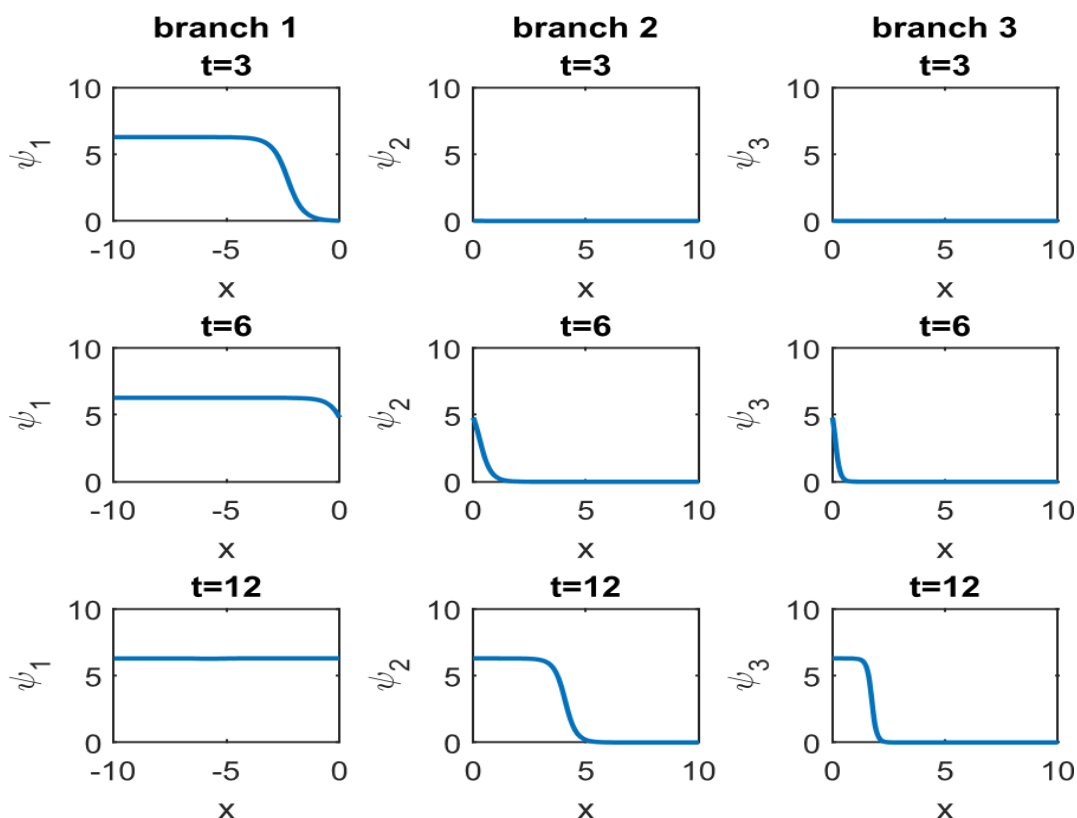
$|\nu| < 1$ кинк тезлиги ҳисобланади. (1) тенглама учун бошланғич шартлар

$$\psi_1(x, 0) = \nu \left(\frac{\sqrt{\beta_1}}{\alpha_1} x, 0 \right) \quad (9)$$

$$\psi_2(x,0) = \psi_3(x,0) = 0 \quad (10)$$

сингари танланган, яъни $t=0$ да ечим биринчи тармоқда ётувчи кинк шаклига эга бўлади.

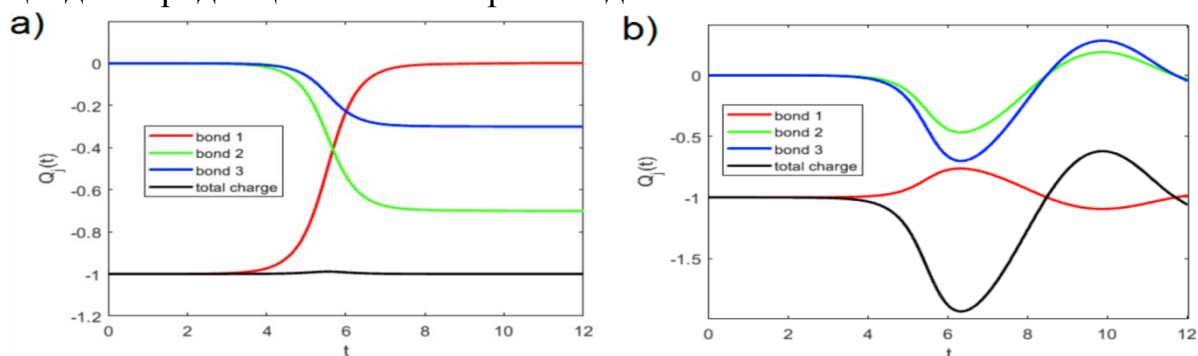
Шундай қилиб, тармоқланган ўтказувчи полимерларда зарядланган солитонларнинг динамикаси, (1), (2) ва (5) тенгламалар орқали берилди. Бошқача қилиб айтганда, бизнинг моделимиздаги синус-Гордон тенгламасининг ечими мазкур графда тармоқланган ўтказувчи полимерларда зарядланган кинк-солитонларнинг ҳаракатини тавсифлайди. (1), (2) ва (5) тенгламалар орқали берилган масаланинг ечимига эга бўлган ҳолда, панжаранинг силжиши ва топологик заряднинг вақт бўйича эволюциялари, полимер тармоқланиши нуқтасида зарядларни ташувчи солитонларнинг қайтиши ва ўтиши каби турли хил заряд ташувчиларининг кўчиш хусусиятларини ҳисоблаш мумкин.



3-расм. (б) йиғинди қоидаси бажарилганида ҳар битта тармоқда ҳар хил вақт моментларида ψ_k нинг координатага боғлиқлиги (профили).

Йиғинди қоидаси бажарилганида (3-расм) ҳар битта тармоқда ҳар хил вақт моментларида ψ_k нинг координатага боғлиқлиги (профили) тасвирланган. Йиғинди қоидаси бажарилган режим учун қандайдир (охирги) вақт оралиғидан кейин кинк биринчи тармоқдан иккинчи ва учинчи тармоқларга тўлиқ ўтишини кўришимиз мумкин. 4,а-расмда (б) тенглама орқали берилган йиғинди қоидаси бажарилганда, яъни энергия ва зарядни сақланган ҳолда, юлдузсимон тармоқланган полимернинг ҳар бир тармоғида вақт функцияси сифатида

заряднинг графиклари тасвирланган. Топологик заряднинг сақланиши ушбу графикдан аниқ кўринади. 4,б-расмда йиғинди қоидаси бузилган ҳол учун шунга ўхшаш графиклар тақдим этилган. Ўз-ўзидан аёнки, бу режимда ҳеч қандай заряд сақланиши бажарилмайди.



4-расм. (б) Йиғинди қоидаси ($a_1=1$, $a_2=0,7$, $a_3=0,3$) бажарилганида (а) ва ($a_1=1$, $a_2=2$, $a_3=3$) бузилганида (б) юлдузсимон тармоқланган полимернинг ҳар битта тармоғида заряднинг вақтга боғлиқлиги.

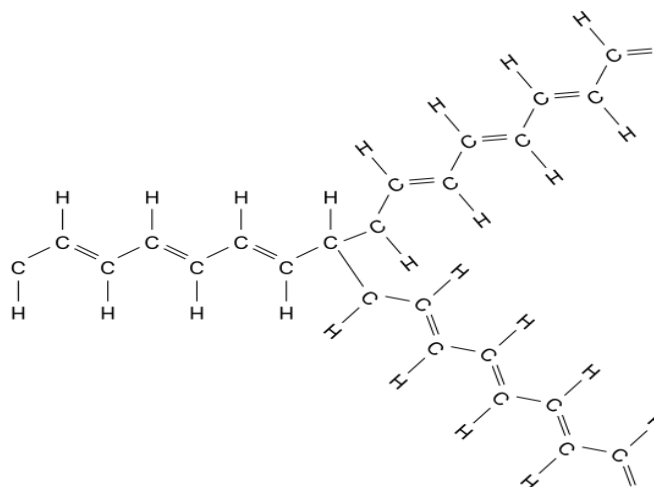
Иккала ҳолатда ҳам, заряд дастлабки вақт momenti ($t=0$) да биринчи тармоқда генерацияланади деб тахмин қилинади.

Таъкидлаш керакки, юқорида қараб чиқилган ёндашув янада мураккаб тармоқланиш топологияга эга бўлган бошқа тармоқланган полимерларда зарядланган солитонларнинг динамикасини моделлаштириш учун кенгайтирилиши мумкин.

Диссертациянинг “Тармоқланган ўтказувчан полимерларда экситонлар динамикаси” номли учинчи бобида тармоқланган ўтказувчи полимерларни квант графлар ёрдамида моделлаштириш йўли билан уларда экситонлар динамикаси қараб чиқилган. Квант графлар, граф топологияси деб аталувчи қандайдир қоида бўйича ўзаро бир-бирлари билан боғланган, квант ўтказгичлар системасини ташкил этади.

Ўтказувчи полимерларда экситонлар фотофизик жараёнларда ва органик оптоэлектрон қурилмаларда асосий заряд ташувчилар ҳисобланадилар. Экситонлар транспортининг реал моделларини яратиш, янги функционал материалларни яратиш ва мавжудларини оптималлаштириш учун, ҳам аҳамият касб этади. Экситонли транспортдан ташқари, стационар экситонларни ёритиш экситон-панжаравий экситонли фононларда ва бошқа ўзаро таъсирларда муҳим рол ўйнайдиган асосий омилларни тушунишга имкон беради. Ҳозирги вақтгача адабиётларда боғланган полимерларда экситонлар динамикасининг турли хил моделлари таклиф қилинган. Ўтказувчи полимерлар учун, уларнинг квази бир ўлчамли ва даврий структураси туфайли, полимер занжирни мономерларнинг бир ўлчамли панжараси каби қараш мумкин. Шунинг учун ўтказувчи полимерларда экситонларни ёритувчи кўпчилик моделлар бир ўлчамли моделлар ҳисобланади. Бу, масалан, мустаҳкам боғланишли бир ўлчамли ёндашувдан зонавий структурани ва заряд ташувчиларнинг миграцияси учун фойдаланишга имкон беради. Шундай ёндашув дастлаб М.Ж. Райс (M.J. Rice) ва Ю.Н. Гарштейн (Yu.N. Gartstein) ишларида таклиф этилган. Бу ерда биз

тармоқланган, яъни битта мономерда бир-бири билан боғланган учта полимер занжирдан ташкил топган, ўтказувчи полимерларда экситонлар динамикасини қараб чиқамиз (5-расм.).



5-расм. Тармоқланган полимер занжири.

Шунинг учун ўтказувчи полимерларда экситонларни ёритувчи кўпчилик моделлар бир ўлчамли моделлар ҳисобланади. Бу, масалан, мустаҳкам боғланишли бир ўлчамли ёндашувдан зонавий структурани ва заряд ташувчиларнинг миграцияси учун фойдаланишга имкон беради. Шундай ёндашув дастлаб М.Ж. Райс (M.J. Rice) ва Ю.Н. Гарштейн (Yu.N. Gartstein) ишларида таклиф этилган. Бу ерда биз тармоқланган, яъни битта мономерда бир-бири билан боғланган учта полимер занжирдан ташкил топган, ўтказувчи полимерларда экситонлар динамикасини қараб чиқамиз (5-расм.).

Мазкур ишда биз фойдаланган модель ўтказувчи полимерлар физикаси шаклланишининг дастлабки босқичларида Абэ томонидан таклиф қилинган моделга яқиндир. Мазкур модель электрон-фонон ўзаро таъсирларни эътиборга олмасликни, бир ўлчамли панжарани қаттиқ деб ва электрон орасида Кулон ўзаро таъсирлашишни электрон ва ковак орасидаги ўзаро таъсирлашишга нисбатан заиф деб ҳисоблашни тахмин қилади. Бундан ташқари, чексиз боғланиш энергиясининг пайдо бўлишидан қутулиш учун Кулон потенциалига чекканинг узунлигини киритамиз, яъни Кулон потенциалини кичик масофаларда қирқамиз. У ҳолда электрон ва ковак орасидаги тортишувчи Кулон потенциалини қуйидагича кўринишда ёзиш мумкин:

$$V(x) = -\frac{1}{|x + \xi|}.$$

Биз бу ерда тармоқланган ўтказувчи полимерларда шундай полимерларни қараб чиқамиз. Тармоқланиш Y -ўтишга эга деб тахмин қилинади (5-расм). Бундай система 2-расмда тақдим этилган юлдузсимон граф кўринишига акслантирилади. Полимер узунлиги, унинг кенглигидан бир неча марта катта

(полимер тармоқлари етарлича узун бўлиши, яъни кўп мономерлардан иборат бўлиши керак) деб тахмин қилиниб, электрон-ковак жуфтнинг динамикаси, 2-расмда тақдим этилган графнинг ҳар битта тармоғида) куйидагича кўринишда берилувчи метрик графлардаги Шредингернинг стационар тенгламалари терминларида ифодаланиши мумкин ($\hbar = e = 1$ бирликларида)

$$\left(\frac{p^2}{2\mu} - \frac{1}{|x + \xi_j|} \right) \psi_j(x) = E_b \psi_j(x), \quad (11)$$

бу ерда $p = -i \frac{d}{dx}$, E_b – электрон-ковак жуфти учун боғланиш энергияси, j – тармоқ тартиб рақами. Кулон потенциали электрон-ковак ўзаро таъсирлашишни ифодалайди, μ – келтирилган масса бўлиб, у куйидагича аниқланади:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h}.$$

(11) тенгламани ечиш учун графнинг тармоқланиш тугунларида чегаравий шартларни қўйиш керак. Биз бу ерда уларни тармоқланиш тугунида тўлқин функциясининг узлуксизлиги:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) = \psi_3(0) \quad (12)$$

ва куйидагича кўринишда берилувчи

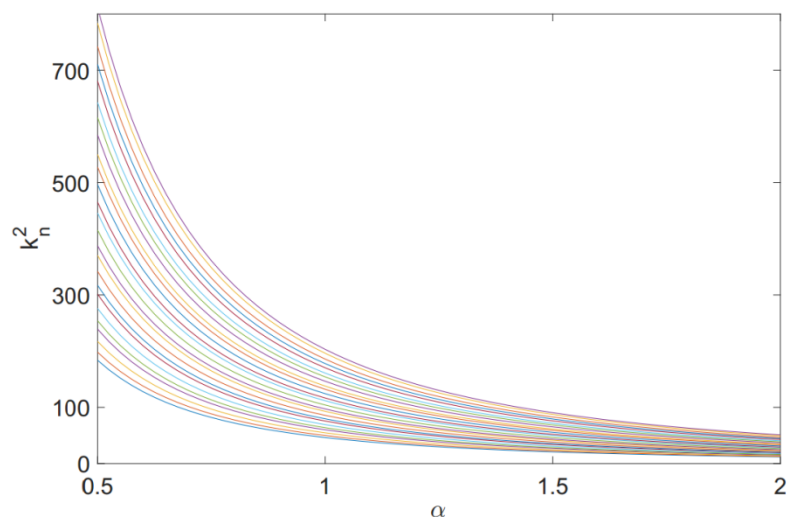
$$\sum_{j=1}^3 \frac{d}{dx} \psi_j(x=0) = 0. \quad (13)$$

Кирхгоф қондаси каби қараймиз. Тармоқларнинг учларида Дирихле чегаравий шартлари куйидагича кўриниш олади:

$$\phi_1(L_1) = \phi_2(L_2) = \phi_3(L_3) = 0.$$

(11) тенгламани аналитик ечиб бўлмаслиги сабабли, уни (12) ва (13) чегаравий шартлар учун сонли ечамиз, бу эса бизга ўтказувчи полимерда, 6-расмда тасвирланган, экситонларнинг энергетик спектрини ҳисоблаш имконини беради.

Ўтказувчи полимерларнинг экситонли динамикасини моделлаштиришда муҳим масала бўлиб экситонларнинг полимер занжири бўйлаб транспорти ҳисобланади. Тармоқланган ўтказувчи полимер ҳолида тармоқланиш нуқтасида экситоннинг ўтиши ёки қайтиши ҳисобига динамика янада мураккаб бўлиб қолади. Бундай полимерларда экситонлар динамикасини, куйидагича кўринишда берилувчи, метрик графлардаги Шредингернинг ностационар тенгламаси ёрдамида ифодалаш мумкин:



6-расм. Энергиянинг дастлабки 20 та сатҳлари.

$$i\partial_t\psi_j + \partial_x^2\psi_j + \left(\frac{2\mu}{x+\xi_j}\right)\psi_j = 0, \quad a > 0, \quad x \geq 0 \quad (14)$$

бу ерда μ – келтирилган масса, ξ_i – Кулон потенциали қирқимининг узунлиги, j –инчи тармоқнинг тартиб рақами. Чегаравий шартлар тўлқин функция оғирлигининг узлуксизлиги

$$a_1\psi_1(0,t) = a_2\psi_2(0,t) = a_3\psi_3(0,t), \quad (15)$$

ва токнинг сақланиши

$$\sum_{j=1}^3 \frac{1}{a_j} \partial_x \psi_j(x=0,t) = 0, \quad (16)$$

кўринишида қўйилади, бу ерда α_j – ҳақиқий доимийлар, $j=1, 2, 3, \dots$. Дирихле чегаравий шартлари ҳар битта тармоқнинг учида қўйилади:

$$\psi_j(x=L_j,t) = 0, \quad j=1, 2, 3. \quad (17)$$

Квант графлар учун шаффоф чегаравий шартлар деб аталувчи концепциядан фойдаланиб, баъзи шартлар бажарилганида α_j коэффициентлар учун полимернинг тармоқланиш тугуни орқали экситоннинг ўтиши қайтувчан бўлмаслигини кўрсатиш мумкин. Бу қоида қуйидагича йиғинди қоидасидир:

$$\frac{1}{a_1^2} = \frac{1}{a_2^2} + \frac{1}{a_3^2} \quad (18)$$

Диссертациянинг “Тармоқланган молекуляр занжирларда квазизаррачаларнинг квант транспорти ва поляронлар динамикаси” номли тўртинчи бобда тармоқланган структураларда, потенциал ўраларда квант зарраларнинг транспортини ўрганилган. Бундай структураларда, ҳам чизиқли ҳамда тармоқланган ўтказувчи полимерлардаги заряд ташувчиларни моделлаштирилади. Тармоқланган ўтказувчи полимерларда поляронлар динамикасини Су-Шиффер-Хигер (SSH) модели деб аталувчи модель асосида ўрганилган. Мазкур модель, молекуляр кристалларга, яъни даврий структурага (бундайларга ўтказувчи полимерлар ҳам киради) эга бўлган ва транс-полиацетиленда электрон жараёнларни моделлаштиришда муваффақиятли қўлланилган молекуляр структураларга мослаштирилган кучли боғланиш моделининг бир ўлчамли аналоги ҳисобланади. Мазкур диссертация ишида квант графларни қўллашга асосланган ёндашувдан фойдаланиб тармоқланган полимерлар учун SSH-моделни умумлаштириш таклиф қилинган. Моделда қуйидагича кўринишга эга бўлган квант графлардаги Шредингер тенгламасини ечиш талаб қилинади:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_j(x) \right] \Psi_j(x) = E \Psi_j(x), \quad (19)$$

бу ерда Ψ_j – j -инчи боғланишнинг тўлқин функцияси ва $j=1, 2, \dots, N$. Графдаги Шредингер операторининг ўз ўзига қўшма бўлишини сақлайдиган структуранинг тугунларидаги чегаравий шартлар қуйидагича кўринишда ёзилиши мумкин:

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0) = \dots = \Psi_N(0) \quad (20)$$

Тармоқланиш нуқтасида токнинг сақланишидан қуйидагига эга бўламиз:

$$\sum_{j=1}^N \frac{d\Psi_j}{dx} \Big|_{x=0} = 0.$$

Дирихле чегаравий шартлари графнинг тармоқлари учларида қўйилади:

$$\Psi_b(L_j) = 0,$$

бу ерда L_j – j -инчи тармоқнинг узунлиги.

SSH-модели доирасида поляронни электрон ва фононлар булутининг боғланган системаси сифатида қараган ҳолда, бу системанинг ҳаракат

тенгламасини (чизикли) тўлқин тенгламалари системаси кўринишида ҳосил қилишга имкон берувчи Гамильтон ёндашиши ёрдамида тавсифлаш мумкин.

$b_j, j = 1, 2, 3, b_1 \sim (-\infty;], b_{2,3} \sim [0; +\infty)$ тармоқларга эга графларда SSH-модели учун Лагранж функцияси қуйидаги кўринишга эга

$$L = \sum_{j=1}^3 \int_0^{+\infty} L_j(t) dt, \quad (21)$$

бунда

$$\begin{aligned} L_j(t) = & \frac{1}{\beta_j} \left[\frac{i}{2} \int_{b_j} (u_j(x,t) \partial_t u_j^*(x,t) - u_j^*(x,t) \partial_t u_j(x,t)) dx + \right. \\ & + \frac{i}{2} \int_{b_j} (v_j(x,t) \partial_t v_j^*(x,t) - v_j^*(x,t) \partial_t v_j(x,t)) dx - \\ & - \gamma_j \int_{b_j} \left[\frac{d\Delta_j(x,t)}{dt} \right]^2 dx - \theta_j \int_{b_j} \Delta_j^2(x,t) dx + \\ & + i\beta_j \int_{b_j} (u_j^*(x,t) \partial_x u_j(x,t) - u_j^*(x,t) \partial_x u_j(x,t)) dx - \\ & \left. \int_{b_j} \Delta_j(x,t) (u_j^*(x,t) v_j(x,t) + v_j^*(x,t) u_j(x,t)) dx \right]. \quad (22) \end{aligned}$$

Бу ерда u_j – электроннинг тўлқин функцияси, v_j – фононнинг тўлқин функцияси, Δ_j – тирқиш параметр.

Ушбу Лагранжианга Эйлер тенгламасини кўллаб, тармоқланган юлдузсимон ўтказувчан полимерларда поляронлар динамикасининг қуйидагича тўлқин тенгламаларини ҳосил қиламиз:

$$\begin{aligned} -i\partial_t u_j + i\beta_j \partial_x u_j - \Delta_j v_j &= 0 \\ -i\partial_t v_j - i\beta_j \partial_x v_j - \Delta_j u_j &= 0 \end{aligned} \quad (23)$$

ва улар учун тармоқланиш нуқтасидаги чегаравий шартлар

$$\begin{aligned} \alpha_1 u_1 \Big|_{x=0} &= \alpha_2 u_2 \Big|_{x=0} = \alpha_3 u_3 \Big|_{x=0}, \\ \frac{1}{\alpha_1} v_1 \Big|_{x=0} &= \frac{1}{\alpha_2} v_2 \Big|_{x=0} + \frac{1}{\alpha_3} v_3 \Big|_{x=0}. \end{aligned} \quad (24)$$

кўринишда қўйилади.

β_j параметрлар йиғинди қоидасини қаноатлантиради деб қабул қилиб

$$\frac{1}{\beta_1^2} = \frac{1}{\beta_2^2} + \frac{1}{\beta_3^2} \quad (25)$$

тармоқланган ўтказувчан полимердаги поляроннинг тўлқин функциясини қуйидаги кўринишда ёзиш мумкин

$$\begin{aligned}u_0(x) &= N[(1-i)\operatorname{sech} k_0(x+x_0) + (1+i)\operatorname{sech} k_0(x-x_0)], \\u_0(x) &= N[(1+i)\operatorname{sech} k_0(x+x_0) + (1-i)\operatorname{sech} k_0(x-x_0)], \\ \Delta_j(x) &= \Delta_{0j} - k_0\beta_j[\tanh k_0(x+x_0) - \tanh k_0(x-x_0)],\end{aligned}\tag{26}$$

бу ерда

$$\tanh 2k_0x_0 = \frac{k_0\beta_j}{\Delta_{0j}}.$$

ХУЛОСА

«Тармоқланган ўтказувчан полимерларда заряд ташувчилар динамикасини моделлаштириш» мавзусида фалсафа доктори (PhD) диссертацияси бўйича олиб борилган тадқиқотлар натижасида қуйидаги хулосалар тақдим этилади:

1. Солитонларнинг тармоқланган полимерларда тармоқланиш нуқтасидан қайтмасдан ўтишини аниқлашга имкон берувчи зарядланган солитонларнинг бошқариладиган транспорти мавжудлиги исботланди;
2. Турли хил тармоқланиш топологиясига эга бўлган ўтказувчан полимерларда солитонлар заряд оқимининг вақтга боғлиқлиги ва тармоқланиш нуқтасида оқим сақланиш қонуни аниқланди;
3. Тармоқланган ўтказувчан полимерларда экситонлар энергетик спектридаги қонуниятлар аниқланди. Электрон-тешик жуфтлигининг боғланиш энергияси полимер тармоғининг узунлигига тескари пропорционал эканлиги кўрсатилди;
4. Ўтказувчан полимернинг тармоқланиш нуқталари орқали экситонларнинг қайтишсиз ўтиш режими ҳосил бўлиш шартлари аниқланди;
5. Су-Шриффер-Хигер модели тармоқланган ўтказувчан полимерлар учун умумлаштирилган;
6. Тармоқланган ўтказувчан полимерларда поляронлар динамикаси тадқиқ қилинди. Поляронларнинг тармоқланиш нуқтаси орқали қайтишсиз ўтиш режими мавжудлиги исботланди. Ушбу режимнинг математик шarti материалнинг физик параметрларига боғлиқ равишда келтириб чиқарилди.
7. Турли заряд ташувчилари динамикасининг компьютерда моделлаштирилиши, ҳамда заряд кўчишининг компьютер визуализацияси алгоритми ва дастури ишлаб чиқилди.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc 02/30.12.2019.К/ФМ/Т.36.01 ПО
ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ПРИ ИНСТИТУТЕ
ХИМИИ И ФИЗИКИ ПОЛИМЕРОВ**

УРГЕНЧСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

МАТЯКУБОВ ХИКМАТЖОН ШУХРАТОВИЧ

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В
ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИХ ПОЛИМЕРАХ**

01.04.06 – Физика полимеров

**АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ ДОКТОРА ФИЛОСОФИИ (PhD) ПО
ФИЗИКО – МАТЕМАТИЧЕСКИМ НАУКАМ**

Ташкент – 2020

Тема диссертации доктора философии (PhD) зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за №B2019.2.Phd/FM138

Диссертация выполнена в Ургенчском государственном университете.

Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещен на веб-странице Научного совета (polychemphys.uz) и информационно-образовательном портале «ZiyoNet» (www.ziynet.uz).

Научный руководитель: **Матрасулов Даврон Урунович**
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты: **Нурғалиев Илнар Накипович**
доктор физико-математических наук

Явидов Бахрам Янгибаевич
доктор физико-математических наук

Ведущая организация **Самаркандский государственный университет**

Защита диссертации состоится «27» ноябрь 2020 года в 10:00 часов на заседании Научного совета DSc 02/30.12.2019.K/FM/T.36.01 при Институте химии и физики полимеров (Адрес: 100128, г.Ташкент, ул.Абдулла Кадыри, 7^б, Тел.:(+99871)241-85-94, факс: (+99871)241-26-60, e-mail: polymer@academy.uz).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Института химии и физики полимеров АН РУ за № 15 (Адрес: 100128, г.Ташкент, ул.Абдулла Кадыри, 7^б, Тел.:(+99871) 241-85-94).

Автореферат диссертации разослан «10» 10 2020 года.
(протокола рассылки № 2 от «09» 10 2020 года.)



 **С.Ш.Рашидова**
Председатель научного совета по присуждению
учёной степени, д.х.н., профессор, академик

 **М.М. Усманова**
Учёный секретарь научного совета по присуждению
ученой степени, к.х.н.
старший научный сотрудник

 **С.С. Негматов**
Председатель научного семинара при научном совете
по присуждению ученой степени, д.т.н.,
профессор, академик

ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и востребованность темы диссертации.

Сегодня развитие придается особое внимание на переход низкоуглеродной энергетике на основе экологически безопасных и возобновляемых источников энергии. При этом актуальным является создание эффективных, гибких, экологически безопасных и конкурентоспособных электронных устройств, в том числе и солнечных элементов нового поколения.

В настоящее время в мире ведущими исследователями проведены ряд научно-практических исследований, связанных с темой диссертации и подтверждающие их актуальность. При этом уделено особое внимание на органические солнечные элементы, созданные на основе проводящих полимеров. Увеличение КПД подобных солнечных ячеек до 20% позволяет им становиться коммерчески конкурентоспособным и частично или полностью заменить кремниевые солнечные элементы полимерными. Решение подобной задачи определяет проведение целенаправленного исследования по созданию реалистических моделей переноса заряда в фотовольтаических полимерах как приоритетную задачу современной физики полимеров.

В нашей стране уделяется особое внимание развитию экологически чистых и коммерчески конкурентоспособных возобновляемых источников энергии. В частности, получены важные результаты по ряду направлений, таких как разработка эффективных солнечных ячеек на основе полупроводниковых гетероструктур, по увеличению конверсионной эффективности существующих фотовольтаических преобразователей с путем оптического фокусирования солнечных лучей. В стратегии Действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан² развитие науки и внедрение результатов фундаментальных исследований на практику определены в качестве приоритетных задач. Поэтому имеют важное значение научно-практические исследования, направленные на разработку реалистических моделей транспорта носителей заряда, таких как экситоны, поляроны, а также заряженные солитоны в проводящих полимерах, являющихся основой ресурсосберегающей органической электроники, выявление наиболее оптимальной с точки зрения конверсионной эффективности архитектур разветвления таких полимеров.

Настоящая диссертация, в определенной степени, служит осуществлению задач, обозначенных в Постановлениях Президента Республики Узбекистан №-ПП-916 «О дополнительных мерах по стимулированию внедрения инновационных проектов и технологий в производство» от 15 июля 2008 года, №-ПП-2789 «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, организации, управления и финансирования научно-исследовательской деятельности» от 17 февраля 2017 года и Указа Президента №-УП-4947 «О стратегии действий по дальнейшему развитию Республики

² Указ Президента Республики Узбекистан о стратегии Действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан от 7 февраля 2017 года

Узбекистан» от 8 февраля 2017 года, а также Постановления Президента Республики Узбекистан «об ускоренных мерах по повышению энергоэффективности отраслей экономики и социальной сферы, внедрению энергосберегающих технологий и развитию возобновляемых источников энергии».

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологии в Республике. Диссертационная работа выполнена в рамках приоритетного направления развития науки и технологий в Республике Узбекистан под названием энергетика, энерго- и ресурсосбережение; использование и развитие возобновляемых источников энергии.

Степень изученности проблемы. Во многих странах мира проводятся интенсивные исследования по изучению динамики носителей заряда в проводящих полимерах и их практическому использованию. В опубликованных к настоящему времени в основном рассматривались линейные полимеры, описание которых сводится к использованию модели одномерных решеток Су-Шиффера-Хигера (так называемая SSH-модель). Данная модель является одномерным аналогом метода сильной связи и рассматривает проводящий полимер как одномерную периодическую структуру. В том числе, впервые в начале 80-годов прошлого столетия, на основе данной модели были проведены множество исследований механизмов переноса различных носителей заряда, таких как экситоны, поляроны и заряженные солитоны, в некоторых видах проводящих полимеров, которые позволили также рассчитывать зонную структуру подобных полимеров. Позднее, правильность таких моделей было подтверждена в серии экспериментальных исследований разных авторов, среди которых нобелевские лауреаты, Ширакава, Хигер и Макдармид. Следует также отметить работы Абэ, Райса и Бразовского, где были предложены различные квантово-механические модели экситонов в полиацетилене, что позволило также вычислить зонную структуру и другие электронные свойства данного полимера.

В нашей республике электронные свойства проводящих полимеров и солнечных ячеек на их основе были исследованы в работах С.Ш. Рашидовой, Б.Л. Оксенгендлера, Н.Н. Тураевой и Н.Р. Ашурова, которые использовали различные стат-физические, синергетические и квантово-механические модели для расчета характеристик мобильности заряда, зонной структуры и других свойств.

До этих исследований в литературе моделирование носителей заряда в разветвленных проводящих полимерах было мало изученной задачей. Разработка эффективных моделей данных процессов позволяет решить проблему управляемого транспорта в разветвленных проводящих полимерах и повысить эффективность и ресурсосбережение органических электронных устройств и солнечных элементов созданных на их основе.

Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ высшего образовательного или научно-исследовательского учреждения, где выполнена диссертация. Исследования, проведенные в диссертации, были проведены в рамках научного

гранта «Многоэлектронные фотовольтаические процессы в системах низкой размерности и конверсия солнечной энергии» (Ф-2-003), а также международного гранта «Динамика носителей заряда в тонкопленочных элементах на основе полимеров» (M/UZ-GER-06/2016(UZB-007)).

Целью исследования является изучение механизмов транспорта экситоны, заряженные солитоны и поляроны в разветвленных проводящих полимерах разработка способов управления данными процессами.

Задачи исследования:

моделирование динамики экситонов в разветвленных проводящих полимерах. Выявление условия возникновения режима, при котором отсутствует отражение экситонов на точках разветвления. Расчет характеристик электрической проводимости полимера;

моделирование динамики поляронов в разветвленных полимерах путем модификации так называемой SSH (Su-Schiffner-Heeger) модели на случай квантовых графов. Аналитическое и численное решение системы нелинейных волновых уравнений, вытекающей из SSH –модели. Расчет характеристик мобильности поляронов в разветвленных проводящих полимерах;

моделирование динамики заряженных солитонов в проводящих полимерах. Использование для расчета характеристик мобильности зарядов, и тока заряженных солитонов. Выявление условий для безотражательного перехода солитонов через узлы.

Объект исследования: разветвленные проводящие полимеры, экситоны, поляроны, заряженные солитоны.

Предмет исследования: динамика носителей заряда в проводящих полимерах имеющих разветвленную структуру, расчет физических характеристик транспорта заряда в подобных материалах.

Методы исследования. Методы численного и аналитического решения линейного уравнения Шредингера, уравнения синус-Гордона и других нелинейных волновых уравнений, вытекающих из модели SSH, для граничных условий, которые заданы на метрических графах.

Научная новизна диссертационного исследования заключается в следующем:

впервые предложена модель, описывающая транспорт заряженных солитонов в разветвленных проводящих полимерах;

впервые рассчитаны характеристики транспорта заряженных солитонов в разветвленных проводящих полимерах.

впервые выявлены условия для безотражательного перехода заряженных солитонов через точки разветвления полимера.

впервые предложена модель, описывающая динамику экситонов в разветвленных проводящих полимерах

впервые получены условия, обеспечивающие отсутствие обратного рассеяния экситонов в узлах разветвления.

впервые вычислены характеристики мобильности экситонов в разветвленных проводящих полимерах.

впервые предложено обобщение модели Су-Шиффера-Хигера на разветвленные полимеры.

Практические результаты исследования заключаются в следующем.

В рамках диссертации предложен ряд эффективных моделей для описания динамики носителей заряда в разветвленных проводящих полимерах. С помощью данных моделей становится возможной оптимизация электронных свойств функциональных материалов, имеющих широкое применение в органической электронике. Кроме того, данные модели имеют применение улучшить конверсионную эффективность солнечных элементов третьего поколения путем выявления оптимальных с точки зрения конверсии архитектур разветвления полимеров в них.

Достоверность результатов исследования заключается в том, что применяемые для моделирования динамики заряда подходы ранее детально изучались и находили широкое признание в контексте изучения динамики волн на графах. Выводы работы сделаны на основе результатов полученных с помощью уравнений синус-Гордона и нестационарного уравнения Шредингера. Полученные результаты были апробированы на ряде республиканских и международных конференций.

Научная и практическая значимость результатов исследования. Научная значимость полученных результатов состоит в том факте, что в диссертации впервые выявлена временная зависимость тока носителей заряда в разветвленных проводящих полимерах, а также, путем моделирования динамики носителей заряда с помощью волновых уравнений на квантовых графах вычислен энергетический спектр экситонов в таких полимерах. На основе моделей, основанного на квантовых графах, предложена обобщенная версия модели SSH, описывающей динамику поляронов в разветвленных проводящих полимерах. Также, путем выявления условий безотражательного перехода носителей через узлы, показано возможность управляемого транспорта солитонов в таких полимерах.

Практическая значимость полученных результатов состоит в том, что в диссертации разработаны компьютерные модели динамики различных носителей заряда и алгоритм визуализации процесса транспорта заряда. Путем решения волновых уравнений на графах, впервые исследованы электронные процессы в разветвленных проводящих полимерах и получены результаты, позволяющие оптимизировать функциональные свойства устройств органической электроники. Также предложенные модели могут применяться к описанию динамики заряда в тонкопленочных органических солнечных ячейках, созданных путем напыления полимерного раствора.

Внедрение результатов исследования. На основе полученных результатов по моделированию динамики носителей заряда в электропроводящих полимерах:

обобщенная версия SSH-модели была применена для расчета характеристик квантового транспорта квазичастиц в углеродных наноструктурах низкой размерности в рамках проекта БФ2-022 «Квантовый транспорт в разветвленных углеродных наноструктурах» (справка Общества

Физики Узбекистана № 3/02-10 от 15 июня 2020 года). В результате применения данной модели стало возможно решение проблемы управляемого транспорта квазичастиц в разветвленных квантовых материалах низкой размерности;

модель экситонного транспорта в разветвленных фотовольтаических полимерах было рекомендовано для расчета конверсионной эффективности и оптимизации функциональных свойств тонкопленочных солнечных ячеек на основе проводящих полимеров специалистами из Германии (справка Университета Вуппертал от 20 июня 2020 года). В результате применения данной модели появляется возможность решения проблемы управляемого транспорта экситонов в органических электронных устройствах и увеличения конверсионной эффективности полимерных солнечных ячеек;

модель транспорта заряженных солитонов в разветвленных полимерах рекомендована экспертами из Германии для оптимизации функциональных свойств органических электронных устройств и материалов, обеспечив тем самым улучшения их ресурсосбережение (справка Университета Вьюрзбурга от 18 марта 2020 года). Применения данной модели к разветвленным Джозефсоновским контактам позволяет экспериментальную реализацию новой модели квантовых процессоров.

Апробация результатов исследования. Основные результаты по диссертации представлялись на 8 международных и 6 республиканских научных конференциях.

Публикация результатов исследования. По теме диссертации опубликовано 19 научных работ, 5 научных статей, из них 4 в зарубежных журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов диссертации доктора философии (PhD) Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан.

Структура и объем диссертации. Структура диссертации состоит из введения, четырех глав, заключения, списка использованной литературы, приложений. Объем диссертации составляет 76 страниц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснована актуальность и востребованность темы диссертации в соответствии с приоритетными направлениями развития науки и технологий Республики Узбекистан. Сформулированы цель и задачи, указаны объект и предмет исследования, изложены научная новизна и практические результаты исследования. Обоснована достоверность полученных результатов, раскрыта теоретическая и практическая значимость полученных результатов. Приведены перечень внедрений в практику результатов исследования, сведения об опубликованных работах и структура диссертации.

В первой главе диссертации под названием «**Основы физики проводящих полимеров и теория разветвленных квантовых структур**», представлен обзор литературы, современное состояние проблем, решаемых в

диссертации и описание основных методов и подходов, используемых в диссертации. В частности, изложены одномерная решеточная теория проводящих полимеров на основе SSH-модели, теория экситонов и квантовых графов.

Вторая глава диссертационной работы, под названием «**Транспорт заряженных солитонов в разветвленных проводящих полимерах**», посвящена изучению динамики носителей заряда в виде заряженных солитонов. В частности, в данной главе предложена модель, основанная на уравнении синус-Гордона на метрических графах, которое описывает транспорт носителей заряженных солитонов в разветвленных полимерах. Солитонный механизм транспорта заряда в проводящих полимерах является одной из важных механизмов, используемых в материалах органической электроники. В последнее время большое внимание уделяется проводящим полимерам с разветвленной архитектурой. Это виды полимеров, в которых линейная цепочка делится на две или несколько ветвей, начиная с некоторой точки, которая называется точкой ветвления, или узлом, или вершиной. Структура разветвления может иметь разные архитектуры, например, может быть в виде звезды, дерева, кольца и т. д. (Рис. 1).

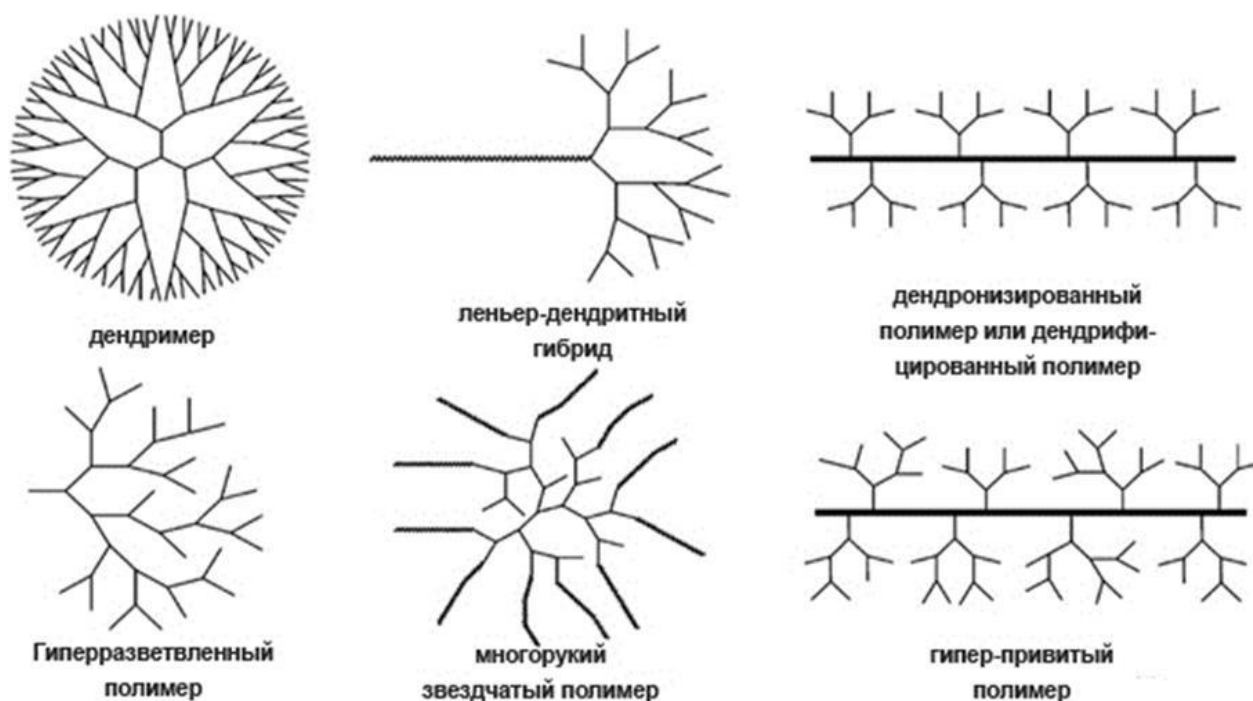


Рис. 1: Схематическое описание дендритных полимеров

Подобное правило разветвления называется топологией структуры. Когда топология полимера очень сложна, он называется гипер-разветвленным полимером. Разветвленные полимеры отличаются от своих линейных аналогов несколькими важными аспектами. Такой полимер образует более компактную, чем линейный полимер конформацию, с одинаковой молекулярной массой. Кроме того, в зависимости от топологии разветвления, электронные и эластичные свойства могут полностью отличаться от свойств линейных полимеров.

Рассмотрим для простоты звездообразный разветвленный полимер, имеющий вид Y-соединения.

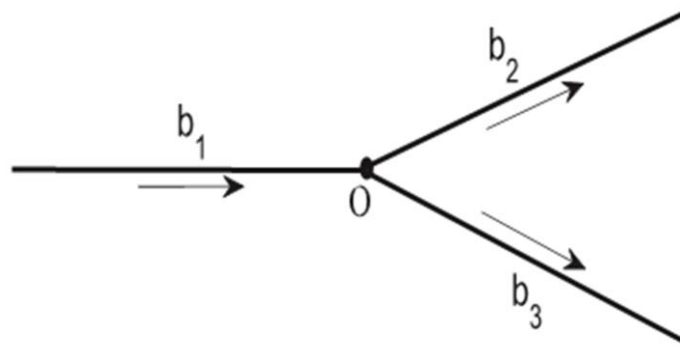


Рис. 2: Простейший звездообразный граф.

Будем считать, что ветви очень длинны по сравнению с толщиной полимерной цепи. Тогда такой полимер можно рассматривать как простейший звездообразный граф с полубесконечными ветвями, соединенными в точке 0 называемой вершиной или точкой ветвления графа (Рис. 2). Координаты солитона в такой структуре определяются как $x_1 \in (-\infty, 0]$ и $x_{2,3} \in [0, \infty)$, где 0 соответствует точке ветвления. Динамика заряженного солитона в таком разветвленном полимере может быть описана в терминах уравнения синус-Гордона на метрическом графе, который можно записать на каждой ветви как (согласно работе З. Собирова и др.)

$$\psi_{ktt} - \alpha_k^2 \psi_{kxx} + \beta_k \sin \psi_k = 0, \quad (1)$$

где ψ_k описывает смещение решетки на k -й ветви. Для решения этого уравнения необходимо наложить граничные условия в точке ветвления (вершины) графа и определить асимптотику волновой функции на концах ветвления. Для формулировки граничных условий вершине можно использовать непрерывность волновой функции

$$\psi_1(0, t) = \psi_2(0, t) = \psi_3(0, t) \quad (2)$$

и фундаментальные законы сохранения, такие как сохранение энергии, заряда и импульса. Асимптотические условия в бесконечностях можно записать в виде $\partial_x \psi_1(x_1, t), \partial_t \psi_1(x_1, t) \rightarrow 0$ а также $\psi_1(x_1, t) \rightarrow 2\pi n_1$ как $x_1 \rightarrow -\infty$, а также $\partial_x \psi_k(x_k, t), \partial_t \psi_k(x_k, t) \rightarrow 0$ а также $\psi_k(x_k, t) \rightarrow 2\pi n_k$ как $x_k \rightarrow \infty, k = 2, 3$, для некоторого целого $n_k, k = 1, 2, 3$,

Для звездообразного графа на (Рис. 2) энергия и топологический заряд определяются как (соответственно)

$$E(t) = \sum_{k=1}^3 \frac{1}{\beta_k} \int_{B_k} \left[\frac{1}{2} (\psi_{kt}^2 + \alpha_k^2 \psi_{kx}^2) + \beta_k (1 - \cos \psi_k) \right] dx, \quad (3)$$

а также

$$2\pi Q = \frac{\alpha_1}{\sqrt{\beta_1}} \int_{-\infty}^0 \psi_{1x} dx + \sum_{k=2}^3 \frac{\alpha_k}{\sqrt{\beta_k}} \int_0^{+\infty} \psi_{kx} dx, \quad (4)$$

где $B_1 = (-\infty, 0)$, $B_{2,3} = (0, +\infty)$.

Из законов сохранения энергии и топологического заряда, задаваемых как

$$\frac{dE}{dt} = 0, \quad \frac{dQ}{dt} = 0,$$

мы имеем граничные условия в точке ветвления:

$$\frac{\alpha_1^2}{\beta_1} \psi_{1x} \Big|_{x_1=0} = \frac{\alpha_2^2}{\beta_2} \psi_{2x} \Big|_{x_2=0} + \frac{\alpha_3^2}{\beta_3} \psi_{3x} \Big|_{x_3=0}. \quad (5)$$

Это было показано в работе З. Собирова и др., что точные солитонные (кинковые) решения уравнения (1), выполняющих граничные условия вершин, заданные уравнениями (2) и (5) могут быть получены при условии соблюдения следующего правила сумм:

$$\frac{\alpha_1}{\sqrt{\beta_1}} = \frac{\alpha_2}{\sqrt{\beta_2}} + \frac{\alpha_3}{\sqrt{\beta_3}}. \quad (6)$$

Тогда решение можно записать в виде

$$\psi_k(x, t) = v \left(\frac{\sqrt{\beta_k}}{\alpha_k} x, \sqrt{\beta_k} t \right), \quad (7)$$

где

$$v(x, t) = 4 \arctan \left[\exp \left(\pm \frac{x - x_0 - vt}{\sqrt{1 - v^2}} \right) \right], \quad (8)$$

с $|v| < 1$ являющейся скоростью кинка.

Начальное условие для уравнения (1) выбраны как

$$\psi_1(x, 0) = v \left(\frac{\sqrt{\beta_1}}{\alpha_1} x, 0 \right) \quad (9)$$

$$\psi_2(x, 0) = \psi_3(x, 0) = 0 \quad (10)$$

т.е. при $t = 0$ решение имеет форму кинка, расположенного на первой ветви.

Таким образом, динамика заряженных солитонов в разветвленных проводящих полимерах описывается в терминах задачи, заданной уравнениями (1), (2) и (5). Другими словами, в нашей модели решение уравнения синус-Гордон на таком графе описывает движение заряженных кинк-солитонов в разветвленных проводящих полимерах. Имея решение задачи, заданной уравнениями (1), (2) и (5) можно вычислить различные характеристики переноса заряда, такие как временные эволюции смещения решетки и топологического заряда, отражение и передача зарядов, несущимися солитонами в точке разветвления полимера.

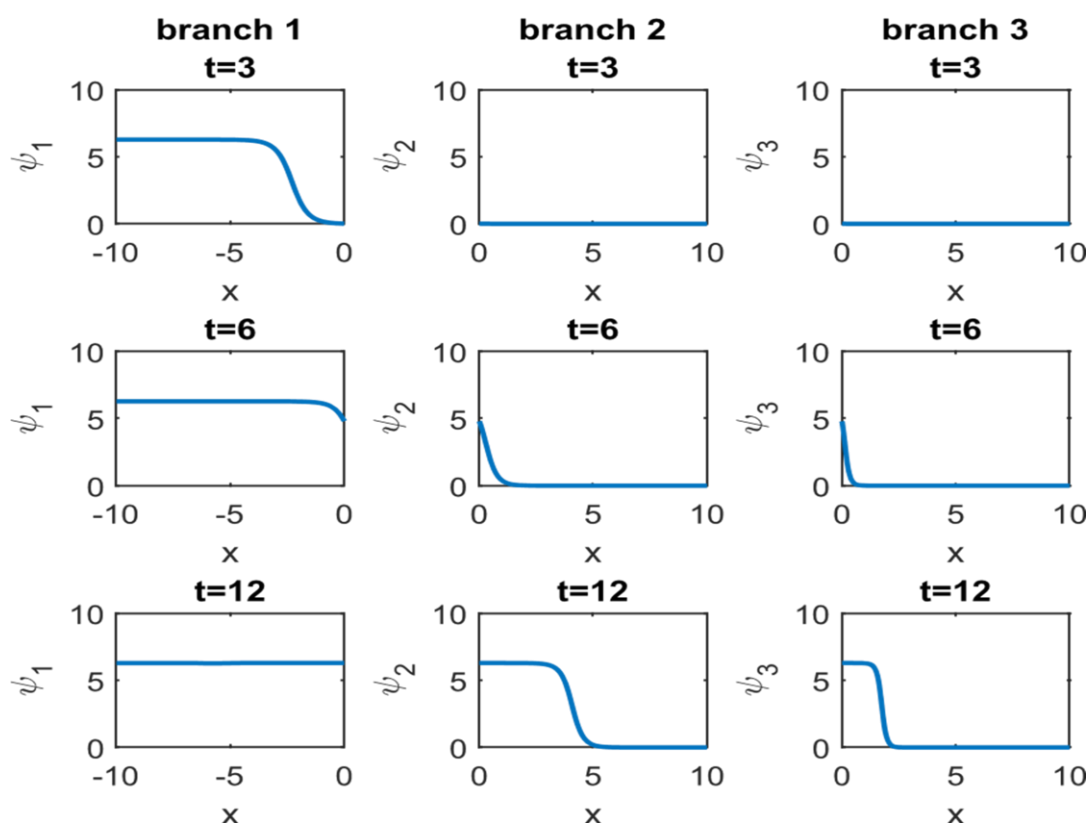


Рис. 3: Координатная зависимость (профиль) ψ_k в разные моменты времени на каждой ветви, когда выполняется правило суммы (6)

$$(a_1 = 1, a_2 = 0.7, a_3 = 0.3).$$

На Рис. (3) изображена координатная зависимость (профиль) ψ_k в разные моменты времени на каждой ветви, когда выполняется правило сумм. Видно, что, кинк полностью переходит из первой ветви во вторую и третью после некоторого (конечного) временного интервала. На рис. 4а представлены графики заряда как функция времени на каждой ветви звездообразно – разветвленного полимера для режима, когда выполняется правило суммы, заданное уравнением (6), т.е. в случае сохранения энергии и заряда. Сохранение топологического заряда ясно видно из этого графика.

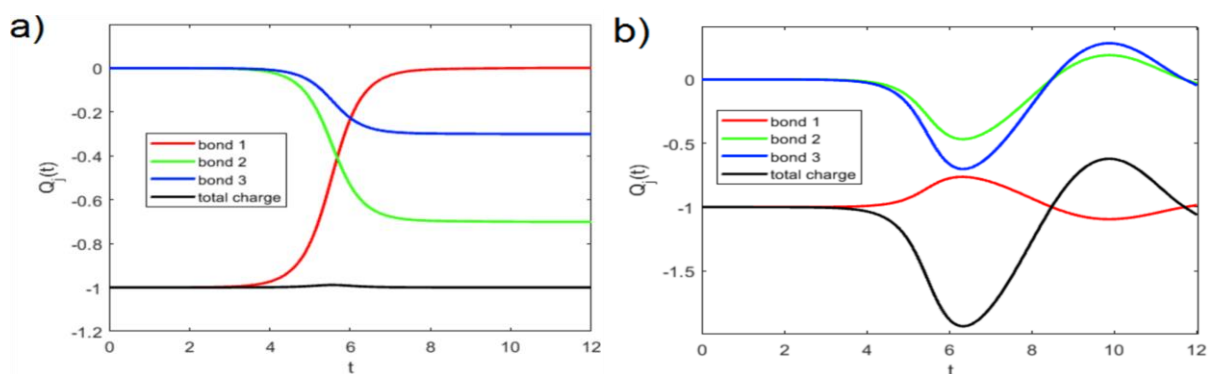


Рис. 4: Временная зависимость заряда на каждой ветви звездообразного разветвленного полимера: (а) когда выполняется правило сумм (б) ($a_1 = 1, a_2 = 0.7, a_3 = 0.3$). и (в) нарушено ($a_1 = 1, a_2 = 2, a_3 = 3$).

Отметим, что вышеупомянутый подход может быть обобщен на случай других разветвленных полимеров, имеющих более сложные топологии разветвления.

В третьей главе диссертации, под названием «**Динамика экситонов в разветвленных проводящих полимерах**», рассмотрена динамика экситонов в разветвленных проводящих полимерах путем их моделирования с помощью квантовых графов. Последние представляют собой систему квантовых проводов, соединенных между собой по некоторому правилу, которое называется топологией графа.

Экситоны в проводящих полимерах являются основными носителями заряда в фотофизических процессах и органических оптоэлектронных устройствах. Разработка реалистичных моделей транспорта экситонов имеет решающее значение для разработки новых функциональных материалов и оптимизации существующих. Помимо экситонного транспорта, описание стационарных экситонов позволяет понять основные факторы, играющие важную роль в экситон-решеточных экситонных фонах и других взаимодействиях. До настоящего времени в литературе были предложены различные модели динамики экситонов в сопряженных полимерах. Для проводящих полимеров, благодаря их квазиодномерной и периодической структуре, полимерную цепь можно рассматривать как одномерную решетку мономеров. Поэтому большинство моделей, описывающих экситоны в проводящих полимерах, являются одномерными моделями. Это позволяет, например, использовать одномерный подход с жесткой связью для расчета зонной структуры и миграции носителей заряда. Такой подход был впервые предложен в работе М.Ж. Райса (M.J. Rice) и Ю.Н. Гарштейна (Yu.N. Gartstein). Здесь мы рассмотрим динамику экситонов в разветвленных проводящих полимерах, т.е. состоящих из трех полимерных цепей, которые связаны друг с другом на одном мономере (Рис. 5).

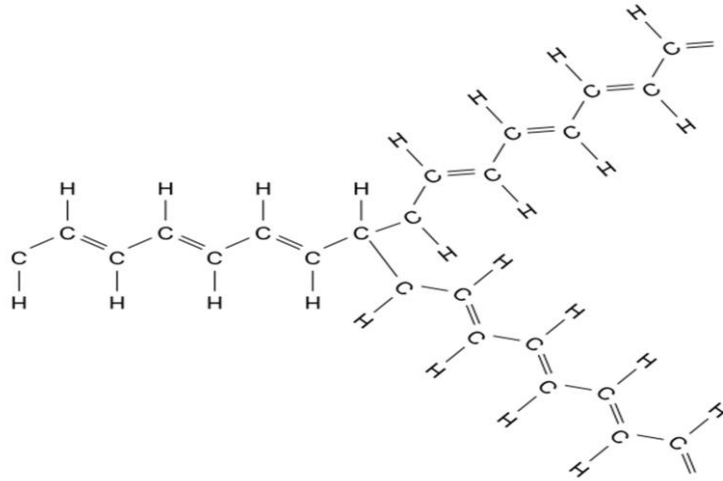


Рис. 5: Разветвленная полимерная цепь.

Модель, которую мы использовали в данной работе, близка к модели предложенной Абэ на заре физики проводящих полимеров. Данная модель предполагает пренебрежение электрон-фононными взаимодействиями, рассматривает одномерную решетку как жесткую, и кулоновское взаимодействие между электроном считается слабым по сравнению с взаимодействием между электроном и дыркой. Кроме того, чтобы избежать появления бесконечной энергии связи, мы включаем длину обреза в кулоновский потенциал, то есть обрезаем кулоновский потенциал на малых расстояниях. Тогда притягивающий кулоновский потенциал между электроном и дыркой можно записать в виде

$$V(x) = -\frac{1}{|x + \xi|}$$

Здесь мы рассмотрим такие полимеры в разветвленных проводящих полимерах. Предполагается, что ветвление имеет вид Y-перехода (Рис. 5). Такая система может быть отображена на звездообразный граф, представленный на Рис. 2. Предполагая, что длина полимера намного больше его ширины (что подразумевает, что ветви полимера достаточно длинные, т.е. содержит больше мономеров), динамика пары электрон-дырка может быть описана в терминах стационарного уравнения Шредингера на метрическом графе, который задается уравнением (на каждой ветви графа, представленной на Рис.2) (в единицах $\hbar = e = 1$)

$$\left(\frac{p^2}{2\mu} - \frac{1}{|x + \xi_j|} \right) \psi_j(x) = E_b \psi_j(x), \quad (11)$$

где $p = -i \frac{d}{dx}$, E_b - энергия связи для пары электрон-дырка, j - номер ветви. Кулоновский потенциал описывает электронно-дырочное взаимодействие, а μ - приведенная масса, определяемая как

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h},$$

Для решения уравнения (11) необходимо наложить граничные условия в точках ветвления (вершинах) графа. Здесь мы налагаем их как непрерывность волновой функции в точке ветвления:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) = \psi_3(0) \quad (12)$$

и правило Кирхгофа, которое дается

$$\sum_{j=1}^3 \frac{d}{dx} \psi_j(x=0) = 0. \quad (13)$$

Граничные условия Дирихле на концах ветвей имеют вид

$$\phi_1(L_1) = \phi_2(L_2) = \phi_3(L_3) = 0.$$

Поскольку аналитическое решение уравнения (11) невозможно, необходимо решить ее численно для граничных условий (12) и (13), что позволяет нам вычислить энергетический спектр экситонов в проводящем полимере, который представлен на Рис. 6.

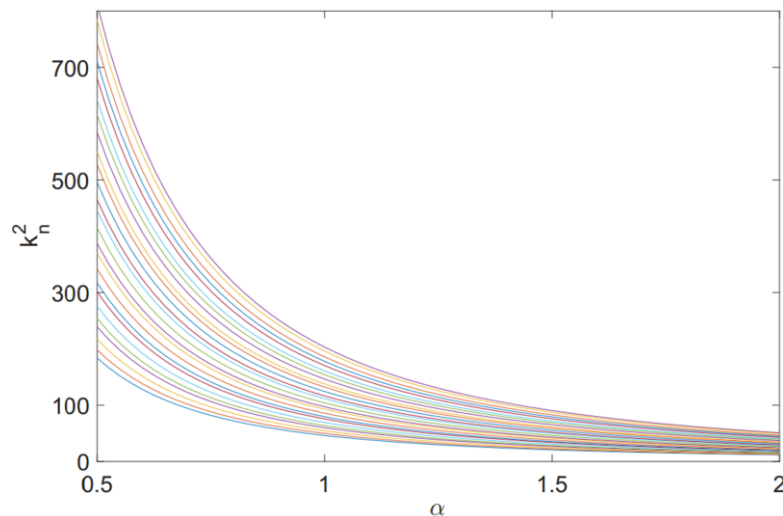


Рис. 6: Первые 20 уровней энергии

Важным вопросом при моделировании экситонной динамики проводящих полимеров является транспорт экситонов вдоль полимерной цепи. В случае разветвленного проводящего полимера динамика становится более сложной за счет пропускания или отражения экситона в точке разветвления. Динамику экситонов в таких полимерах можно описать с помощью нестационарного уравнения Шредингера на метрическом графе, который задается как

$$i\partial_t\psi_j + \partial_x^2\psi_j + \left(\frac{2\mu}{x + \xi_j}\right)\psi_j = 0, a > 0, x \geq 0 \quad (14)$$

где μ - приведенная масса, ξ_j – длина обрезания кулоновского потенциала, а j - номер ветви. Граничные условия накладываются в виде непрерывности веса волновой функции

$$a_1\psi_1(0, t) = a_2\psi_2(0, t) = a_3\psi_3(0, t), \quad (15)$$

и сохранение тока

$$\sum_{j=1}^3 \frac{1}{a_j} \partial_x \psi_j(x=0, t) = 0, \quad (16)$$

где a_j , - действительные постоянные, $j = 1, 2, 3$. Граничные условия Дирихле накладываются в конце каждой ветви:

$$\psi_j(x = L_j, t) = 0, j = 1, 2, 3. \quad (17)$$

Используя концепцию так называемых прозрачных граничных условий (ПГУ) для квантовых графов, можно показать, что при выполнении определенного условия для коэффициентов a_j переход экситона через точки разветвления полимера становится без отражательным. Данное условие следующего правила сумм:

$$\frac{1}{a_1^2} = \frac{1}{a_2^2} = \frac{1}{a_3^2} \quad (18)$$

Четвёртая глава диссертации, которая называется «**Динамика поляронов и квантовый транспорт квазицатиц в разветвлённых молекулярных цепях**», посвящена изучению транспорта квантовых частиц в разветвленных структурах с потенциальными ям и поляронной динамики в разветвленных проводящих полимерах. В разветвленных проводящих полимерах в рамках так называемой модели Су-Шиффера-Хигера (так называемая SSH-модель). Данная модель представляет собой одномерной аналог модели сильной связи,

адаптированной к молекулярным кристаллам, то есть к молекулярным структурам, имеющим периодическую структуру (к таковым относятся также и проводящие полимеры), и успешно примененный к моделированию электронных процессов в транс-полиацетилене. Такие структуры разветвленных потенциальных ям моделируют носителей заряда как в линейных, так и в разветвленных квазиодномерных молекулярных цепях. Модель сводится к решению уравнения Шрёдингера на квантовых графах которое имеет вид

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_j(x) \right] \Psi_j(x) = E \Psi_j(x), \quad (19)$$

где Ψ_j волновая функция j -й связи и $j = 1, 2, \dots, N$. Граничные условия на вершинах структуры, сохраняющие самосопряженность оператора Шрёдингера на графе, могут быть записаны в виде

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0) = \dots = \Psi_N(0) \quad (20)$$

Из сохранения тока в точке разветвлении имеем

$$\sum_{j=1}^N \frac{d\Psi_j}{dx} \Big|_{x=0} = 0$$

Граничные условия Дирихле накладываются на краях ветвей графа

$$\Psi_b(L_j) = 0$$

где L_j длина j ветви.

В данной диссертационной работе предложено обобщение SSH-модели на случай разветвленных полимеров, используя подход, основанный на использовании квантовых графов.

Рассматривая полярон как связанную систему электрона и фононного облака, в рамках SSH-модели, данную систему можно описать в рамках гамильтоновского подхода, который позволяет вывести уравнение движение системы в виде системы (линейных) волновых уравнений.

Функция Лагранжа для SSH-модели на графах с ребрами $b_j, j = 1, 2, 3, b_1 \sim (-\infty; \infty], b_{2,3} \sim [0; +\infty)$, имеет вид

$$L = \sum_{j=1}^3 \int_0^{+\infty} L_j(t) dt, \quad (21)$$

где

$$\begin{aligned}
L_j(t) = & \frac{1}{\beta_j} \left[\frac{i}{2} \int_{b_j} (u_j(x,t) \partial_t u_j^*(x,t) - u_j^*(x,t) \partial_t u_j(x,t)) dx + \right. \\
& + \frac{i}{2} \int_{b_j} (v_j(x,t) \partial_t v_j^*(x,t) - v_j^*(x,t) \partial_t v_j(x,t)) dx - \\
& - \gamma_j \int_{b_j} \left[\frac{d\Delta_j(x,t)}{dt} \right]^2 dx - \theta_j \int_{b_j} \Delta_j^2(x,t) dx + \\
& + i\beta_j \int_{b_j} (u_j^*(x,t) \partial_x u_j(x,t) - u_j(x,t) \partial_x u_j^*(x,t)) dx - \\
& \left. \int_{b_j} \Delta_j(x,t) (u_j^*(x,t) v_j(x,t) + v_j^*(x,t) u_j(x,t)) dx \right]. \quad (22)
\end{aligned}$$

Здесь u_j – волновая функция электрона, v_j – волновая функция фонона, Δ_j – параметр щели.

Применяя уравнения Эйлера к данному Лагранжиану получаем следующие волновые уравнения динамики поляронов в разветвленных звездообразных проводящих полимерах:

$$\begin{aligned}
-i\partial_t u_j + i\beta_j \partial_x u_j - \Delta_j v_j &= 0 \\
-i\partial_t v_j - i\beta_j \partial_x v_j - \Delta_j u_j &= 0
\end{aligned} \quad (23)$$

для которых граничные условия в точке разветвления задаются в виде

$$\begin{aligned}
\alpha_1 u_1 \Big|_{x=0} &= \alpha_2 u_2 \Big|_{x=0} = \alpha_3 u_3 \Big|_{x=0}, \\
\frac{1}{\alpha_1} v_1 \Big|_{x=0} &= \frac{1}{\alpha_2} v_2 \Big|_{x=0} + \frac{1}{\alpha_3} v_3 \Big|_{x=0}.
\end{aligned} \quad (24)$$

Допуская, что параметры β_j удовлетворяют правилу сумм

$$\frac{1}{\beta_1^2} = \frac{1}{\beta_2^2} + \frac{1}{\beta_3^2} \quad (25)$$

Волновую функцию полярона в разветвленном проводящем полимере можно записать в виде

$$\begin{aligned}
u_0(x) &= N[(1-i)\operatorname{sech}hk_0(x+x_0) + (1+i)\operatorname{sech}hk_0(x-x_0)], \\
u_0(x) &= N[(1+i)\operatorname{sech}hk_0(x+x_0) + (1-i)\operatorname{sech}hk_0(x-x_0)], \\
\Delta_j(x) &= \Delta_{0j} - k_0\beta_j[\tanh k_0(x+x_0) - \tanh k_0(x-x_0)],
\end{aligned}
\tag{26}$$

где

$$\tanh 2k_0x_0 = \frac{k_0\beta_j}{\Delta_{0j}}.$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате исследований, проведённых на основе диссертационной работы доктора философии (PhD) на тему «Моделирование динамики носителей заряда в разветвленных проводящих полимерах» представлены следующие выводы:

1. Показана возможность управляемого транспорта заряженных солитонов в разветвленных проводящих полимерах, состоящая в возможности выявления безотражательного перехода солитонов через точки разветвления;
2. Выявлены временные зависимости зарядового потока солитонов в проводящих полимерах различных топологий разветвления и соблюдения закона сохранения потока в точке разветвления.
3. Выявлены закономерности зависимости энергетического спектра экситонов от длины ветви в разветвленных проводящих полимерах. Показано, что энергия связи электрон-дырочной пары обратно пропорциональна длине ветви полимера;
4. Выявлены условия для возникновения режима безотражательного перехода экситонов через точки разветвления проводящего полимера;
5. Предложено обобщение модели Су-Шриффера-Хигера на случай разветвленных проводящих полимеров;
6. Исследована динамика поляронов в разветвленных проводящих полимерах. Доказано существование режима безотражательного прохождения поляронов через точку разветвления. Выведено математическое условие данного режима в терминах физических параметров материала.
7. Разработаны алгоритм и программа компьютерного моделирования динамики различных носителей заряда, а также компьютерной визуализации процесса переноса заряда.

**SCIENTIFIC COUNCIL ON AWARD SCIENTIFIC DEGREES
DSc 02/30.12.2019.K/FM/T.36.01
AT THE INSTITUTE OF POLYMER CHEMISTRY AND PHYSICS**

URGENCH STATE UNIVERSITY

MATYOKUBOV KHIKMATJON SHUKHRATOVICH

**MODELING OF DYNAMICS OF CHARGE CARRIERS IN
CONDUCTING POLYMERS**

01.04.06 – Physics of polymers

**DISSERTATION ABSTRACT OF THE DOCTOR OF PHILOSOPHY (PhD)
ON PHYSICAL MATHEMATICAL SCIENCES**

Tashkent – 2020

Subject of dissertation of the doctor of philosophy (PhD) is registered at the Supreme Attestation Commission under the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan №B2019.2.PhD/FM138

The dissertation was carried out at the Institute of Polymer Chemistry and Physics.

The abstract of dissertation in three languages (Uzbek, Russian, English (resume)) is placed on the website of the Scientific Council (polchemphys.uz) and on the website of "ZiyoNET" information-educational portal (www.ziynet.uz.)

Scientific supervisor: **Matrasulov Davron**
Doctor of Physical Mathematical Sciences, Professor

Official opponents: **Nurgaliev Inar**
Doctor of Physical Mathematical Sciences

Yavidov Bakhrom
Doctor of Physical Mathematical Sciences

Leading organization: **Samarkand State University**

The defense of the dissertation will take place on «27» november 2020 at «10:00» o'clock at a meeting of Scientific council DSc 02/30.12.2019.K/FM/T.36.01 at the Institute of Polymer Chemistry and Physics (Address: 100128, Tashkent city, Abdulla Kadiri str., 7⁶, Ph.: (998-71)-241-85-94; fax: (998-71) 241-26-61; e-mail: polymer@academy.uz)

The dissertation can be reviewed at the Informational Resource Centre of Institute of Polymer Chemistry and Physics (registration number 15) (Address: 100128, Tashkent city, Abdulla Kadiri str., 7⁶, Ph.: (998-71)-241-85-94;).

The abstract of the dissertation sent out on «10» 10 2020
(mailing report № 2 as of «09» 10 2020)



S.Sh. Rashidova
S.Sh. Rashidova
Chairman of scientific council for
awarding of scientific degrees,
Doctor of Chemical Science
Professor, Academician

M.M. Usmonova
M.M. Usmonova
Scientific secretary of scientific council
on award of scientific degrees,
Candidate of Chemical Science, Senior researcher

S.S. Negmatov
S.S. Negmatov
Chairman of scientific Seminar under Scientific
council for awarding the scientific degrees,
Doctor of Technical Science,
Professor, Academician

INTRODUCTION (abstract of doctor of philosophy dissertation)

The aim of the research work is the study of models of transport of charge carriers in branched conducting polymers by modeling the latter using quantum graphs.

The object of the research work: branched conducting polymers, solar cells based on such polymers, quantum graphs

Scientific novelty of the research work: is that for the first time:

A model is proposed that describes the transport of charged solitons in conducting polymers with a branched macroscopic structure.

The characteristics of the transport of charged solitons in branched conducting polymers are calculated.

The conditions for the reflectionless transport of charged solitons through the branching points of the polymer are revealed.

A model is proposed that describes the dynamics of excitons in branched conducting polymers with a branched macroscopic structure.

Conditions that ensure the absence of backscattering of excitons at the vertex of the branching are obtained.

The characteristics of exciton mobility in branched conducting polymers are calculated.

A generalization of the Su-Schiffier-Heeger model to branched polymers is proposed.

Implementation of the research results.

The generalized version of the SSH model developed in the dissertation was applied for the calculation of the characteristics of the quantum transport of quasiparticles in low-dimensional carbon nanostructures within the framework of the project "Quantum transport in branched carbon nanostructures BF2-022". Application of the model, allows to solve the problem of tunable transport of quasiparticles in branched low-dimensional quantum materials.

The model of exciton transport in branched photovoltaic polymers proposed in the thesis was recommended for calculation of the conversion efficiency and optimization of the functional properties of the polymers thin-film solar cells by an experts from Germany. Using the model, allows to solve the problem of tunable transport of excitons in organic electronic devices and increase the conversion efficiency of the polymer based solar cells.

The model of the transport of charged solutions in branched polymers developed in the dissertation was recommended for optimization of the functional properties of organic electronic devices and materials, thereby improving their resource conservation by experts from Germany (confirmation letter from the University of Wurzburg, from March 18, 2020). Application of this model to branched Josephson junctions allows experimental implementation of the new model of quantum processors.

The structure and volume of the thesis. The dissertation consists of an introduction, four chapters, conclusion, list of references and applications. The volume of the thesis is 76 pages.

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I бўлим (I част; part I)

1. Babajanov D.B., Matyokubov H.Sh., Matrasulov D.U. Charged solitons in branched conducting polymers. // The Journal of Chemical Physics 149, 164908 (2018) (№3, Scopus CiteScore 5,2).

2. Babajanov D.B., Matyokubov H.Sh. Soliton mechanism of charge transport in branched conducting polymers and verification of conservation laws. // Mintaqada zamonaviy fan, ta'lim va tarbiyaning dolzarb muammolari, 2018 №4. 7-18 b. (01.00.00; №10).

3. J.R. Yusupov, Kh.Sh. Matyokubov, K.K. Sabirov. Particle transport in a network of quantum harmonic oscillators. // Nanosystems: physics, chemistry, mathematics, 2020, 11 (2), p. 145–152. (01.00.00; №5).

4. J.R. Yusupov, Kh.Sh. Matyokubov, K.K. Sabirov. Dynamics of polarons in branched conducting polymers. // Nanosystems: physics, chemistry, mathematics, 2020, 11 (2), p. 183–188. (01.00.00; №5).

5. J.R. Yusupov, Kh.Sh. Matyokubov, K.K. Sabirov and D.U. Matrasulov. Exciton dynamics in branched conducting polymers: Quantum graphs based approach. // Chemical Physics 537 (2020) 110861 (№3, Scopus CiteScore 2,9).

II бўлим (II част; part II)

1. Matrasulov D.U., Matyokubov H.Sh., Yusupov J. Wave dynamics in driven quantum networks. // «Яримўтказгичлар физикасининг ва қайта тикланувчи энергия манбаларини ривожлантиришнинг замонавий муаммолари» Республика илмий-амалий анжумани материаллари. Андижон, 2018 йил 20-21 апрель, 35-36 б.

2. Matyokubov H.Sh., Babajanov D.B. O'tkazuvchan polimerlarda zaryad tashuvchilar dinamikasini modellashtirish. // «Яримўтказгичлар физикасининг ва қайта тикланувчи энергия манбаларини ривожлантиришнинг замонавий муаммолари» Республика илмий-амалий анжумани материаллари. Андижон, 2018 йил 20-21 апрель, 39-40 б.

3. Matyokubov H.Sh., Babajanov D.B. Acoustic waves propagation in branched polymers. // «Ёш олимлар тадқиқотларида инновацион ғоялар ва технологияларнинг ўрни» Олий ва ўрта махсус таълим вазирлиги миқёсида ўтказилган илмий-амалий анжумани материаллари. Тошкент 27 апрель 2018 йил, 15-16 б.

4. Yusupov J., Matrasulov D.U., Matyokubov H.Sh. Charge transport in branched conducting Polymers: Quantum graphs based approach. // «Седьмая Международная конференция по Физической Электронике» Сборник тезисов докладов. Ташкент – 2018, 18-19 мая, стр 127.

5. Babajanov D.B., Matyokubov H.Sh., Matrasulov D.U. Elastic waves propagation in branched polymers. // «Седьмая Международная конференция по Физической Электронике» Сборник тезисов докладов. Ташкент – 2018, 18-19 мая, стр 167.

6. Babajanov D.B., Matyokubov H.Sh., Matrasulov D.U. Modeling of charge dynamics in conducting polymers. // Материалы «IV Международной конференции по оптическим и фотоэлектрическим явлениям в полупроводниковых микро- и наноструктурах». Фергана – 2018, 25-26 мая, стр 297.

7. Babajanov D.B., Matyokubov H.Sh. Charge transport in branched conducting polymers: quantum graphs based approach. // «XXX IUPAP Conference on Computational Physics». University of California, Davis, USA-2018 July 29 - August 3, p 55.

8. Babajanov D.B., Matyokubov H.Sh. Charge transport in branched conducting polymers: quantum graphs based approach. // «5th International Conference on physics of optical materials and devices». Book of abstracts, Igalo, Montenegro 27-31 august 2018.

9. Babajanov D.B, Matrasulov D.U, Matyakubov H.Sh.. Modeling of acoustic waves propagation in branched polymers using metric graphs approach. // 8th Edition of Biopolymers and Bioplastics Polymer Science and Engineering. Las Vegas, USA, October 15-16, 2018, p 55.

10. Babajanov D.B., Matyokubov H.Sh. Dynamics of charged solitons in branched conducting polymers. // «Инновационные технологии в науке и образовании» Материалы республиканской научно-практической конференции, Нукус-2018 г, 20-21 ноябрь, стр 72.

11. Matyokubov H.Sh., Babajanov D.B, Matrasulov D.U. Polarons in branched conducting polymers. // Monografia pokonferencyjna «Science, Research, development #11 technics and technology», Rotterdam (The Netherlands), 29.11.2018 - 30.11.2018, p 26.

12. Yusupov J., Matyokubov H.Sh., Babajanov D.B, Matrasulov D.U. Particle and wave transport in driven quantum networks. // «3rd International Conference on quantum optics and quantum computing » September 10-11, 2018, London, UK, Volume 5, p 66.

13. Matyokubov H.Sh., Babajanov D.B, Matrasulov D.U. Modeling of polaron dynamics in conducting polymers in terms of quantum graphs. // International conference “Actual problems of applied mathematics and information technology” Tashkent - Uzbekistan, november 14–15, 2019, p 48.

14. H.Sh. Matyokubov, J.R. Yusupov, K.S. Sabirov, D.M. Matrasulov. Modeling the dynamics an electron-hole pair in branched structures. // International conference “Actual problems of applied mathematics and information technology” Tashkent - Uzbekistan, november 14–15, 2019, p 49.