

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2017.01.044>

УДК 538.931+538.935

А.Г. Загородній, Л.М. Христофоров

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ

E-mail: lchrist@bitp.kiev.ua

Міграція квантової частинки ланцюжком з пастками: квантові виходи захоплення

Представлено академіком НАН України А.Г. Загороднім

Обчислено квантові виходи захоплення квантової частинки, що мігрує ланцюжком з пастками. Показано, що можливі лише два типи залежності квантового виходу від інтенсивності захоплення χ з альтернативною поведінкою (асимптотичним наближенням до 0 або 1 у границі $\chi \rightarrow \infty$). Реалізація певного типу зумовлюється виключно початковою умовою міграції.

Ключові слова: *низьковимірні ґратки, транспорт квантових частинок, міграція та захоплення, квантовий вихід.*

1. Вступ. В попередній роботі [1] були показані нетривіальні особливості міграції квантової частинки в необмеженому ланцюжку з пасткою. Зокрема, на відміну від класичної дифузійної міграції, при будь-яких скінченних значеннях інтенсивності χ захоплення пасткою завжди існує ненульова ймовірність частинці загубитися у нескінченності (неповернення). Тобто, квантовий вихід пастки завжди менше одиниці окрім тривіального випадку початку міграції саме на вузлі з пасткою нескінченної інтенсивності. Для всіх інших початкових умов збільшення χ , навпаки, зрештою тільки погіршує квантовий вихід аж до нуля, створюючи ефективну «стінку» для частинки. Це є наслідком руйнування квантової когерентності поперечною релаксацією, що є невід'ємним супутником поздовжньої, яка власне і забезпечує витік у пастку.

Нетривіальна залежність $W_N^{(n)}(a)$ (тут $W_N^{(n)}$ — квантовий вихід у пастку на вузлі N за умови початку міграції з вузла n , а $a = \chi / 4L$, де $4L$ — ширина зони) наводить на думку, що певні особливості можуть бути притаманними і захопленню за наявності кількох (принаймні двох) таких пасток на різних вузлах, а також у напівобмеженому ланцюжку. Аналізу цього і присвячена дана робота.

2. Загальний метод розрахунку квантового виходу. Обчислення останнього значно полегшується такими обставинами. По-перше, він є інтегральною характеристикою і тому вимагає знання лише лаплас(фур'є)-образів заселеностей вузлів, пов'язаних з пасткою.

© А.Г. Загородній, Л.М. Христофоров, 2017

По-друге, моделюючи пастку процесом розпаду стану відповідного вузла, ми можемо, не поступаючись коректністю розгляду, залишатися в межах рівняння Шрьодінгера з уявним доданком до енергії цього вузла, що в порівнянні з формалізмом матриці густини значно спрощує розгляд. Нарешті, наявність таких пасток легко враховується застосуванням методу функції джерела. Все це дозволяє отримувати точні вирази для квантових виходів у будь-яких модифікаціях схеми (міграція + пастки), див. також [1].

Отже, якщо ми маємо систему з гамільтоніаном

$$H = H_0 - (i\chi/2)|N\rangle\langle N|, \quad (1)$$

де H_0 відповідає системі без пасток (у нас — одновимірному необмеженому або напівобмеженому регулярному ланцюжку з обмінними інтегралами L між найближчими сусідами), а на вузлі N можливе необернене захоплення частинки з інтенсивністю захоплення χ , і нам відома хвильова функція $|\Psi_0(t)\rangle = \sum_n c_{0,n}(t)|n\rangle$ «нульової задачі» $d|\Psi_0\rangle/dt = -iH_0|\Psi_0\rangle$ ($\hbar = 1$), тоді розв'язок $|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle$ рівняння Шрьодінгера з гамільтоніаном (1) є:

$$|\Psi(\tau)\rangle = |\Psi_0(\tau)\rangle - a \int_0^\tau c_N(\theta) |\Psi_0^{(N)}(\tau - \theta)\rangle d\theta, \quad (2)$$

де введено безрозмірний час $\tau = 2Lt$, а верхній індекс означає початкову умову, $|\Psi_0^{(N)}(0)\rangle = |N\rangle$. Лаплас-перетворення $\tilde{f}(s) = \int_0^\infty \exp(-s\tau)f(\tau) d\tau$ рівняння (2) приводить до наступного виразу для амплітуд хвильової функції через амплітуди нульової задачі:

$$\tilde{c}_n = \tilde{c}_{0,n} - a \frac{\tilde{c}_{0,n}^{(N)}}{1 + a\tilde{c}_{0,N}^{(N)}} \tilde{c}_{0,N}. \quad (3)$$

Зокрема,

$$\tilde{c}_N = \frac{\tilde{c}_{0,N}}{1 + a\tilde{c}_{0,N}^{(N)}}. \quad (4)$$

Рівняння (3) та (4), що виконуються за будь-яких початкових умов, часто буває зручніше використовувати для величин B_n або $B_{n,0}$, пов'язаних з c -амплітудами як $c_n^{(n_0)} = (-i)^{n-n_0} B_n^{(n_0)}$, $c_{0,n}^{(n_0)} = (-i)^{n-n_0} B_{0,n}^{(n_0)}$, що ми надалі і будемо робити. Знаючи $\tilde{c}_N(s)$, або ж після заміни $s \rightarrow i\omega$ фур'є-образ $\tilde{c}_N(\omega)$, можна, застосовуючи теорему Парсеваля, знайти шуканий квантовий вихід з вузла N :

$$W_N = \chi \int_0^\infty |B_N(t)|^2 dt = \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^\infty |\tilde{B}_N(\omega)|^2 d\omega, \quad (5)$$

омінаючи складну і не завжди реальну процедуру обернення лаплас-образів. Нижче ми застосовуємо цю схему (2)–(5) в конкретних випадках.

3. Необмежений ланцюжок з двома витоками. Відмінність цієї задачі (див. рис. 1) від розглянутої в [1] задачі з одним витоком полягає в тому, що тут існують різні можливості початкових умов $|\Psi^{(N)}(0)\rangle = |n_0\rangle$: ліворуч (праворуч) обох витоків, на одному з них, або ж між ними. Як зараз побачимо, відповіді будуть принципово різними.

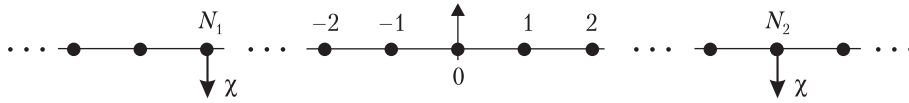


Рис. 1. Частинка починає мігрувати з будь-якого вузла в сусідні завдяки обмінним матричним елементам L між найближчими сусідами. На вузлах N_1 і N_2 вона має ймовірність бути захопленою пастками з інтенсивністю захоплення χ

Для спрощення формул нехай пастки мають однакову інтенсивність χ , тобто

$$H = H_0 - (i\chi / 2)(|N_1\rangle\langle N_1| + |N_2\rangle\langle N_2|), \quad (6)$$

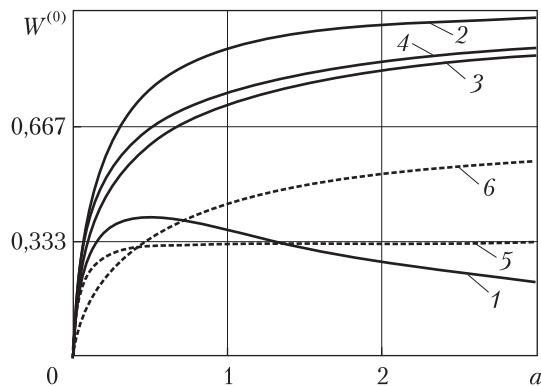
де гамільтоніан нульової задачі H_0 відповідає необмеженому регулярному ланцюжку, $H_0 = L \sum_{-\infty}^{\infty} (|n\rangle\langle n+1| + \text{h.c.})$. Розв'язок нульової задачі добре відомий: $B_{0,n}^{(n_0)}(\tau) = J_{n-n_0}(\tau)$, де $J_m(\tau)$ – функції Бесселя, лаплас-образи яких є

$$\tilde{J}_m(s) = (\sqrt{s^2 + 1} - s)^m / \sqrt{s^2 + 1} \quad (m \geq 0), \text{ і } J_{-m}(\tau) = (-1)^m J_m(\tau).$$

Застосування описаної в попередньому розділі процедури приводить до такого розв'язку рівняння Шрьодінгера з гамільтоніаном (6) (випишуємо тільки амплітуди, потрібні для обчислення квантових виходів, вважаючи $N_1 < N_2$):

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{N_1}^{(n_0)}(s) &= \frac{\tilde{J}_{N_1-n_0}(1+a\tilde{J}_0) - a(-1)^{N_2-N_1} \tilde{J}_{N_2-N_1} \tilde{J}_{N_2-n_0}}{(1+a\tilde{J}_0)^2 - (-1)^{N_2-N_1} a^2 \tilde{J}_{N_2-N_1}^2}, \\ \tilde{B}_{N_2}^{(n_0)}(s) &= \frac{\tilde{J}_{N_2-n_0}(1+a\tilde{J}_0) - a\tilde{J}_{N_2-N_1} \tilde{J}_{N_1-n_0}}{(1+a\tilde{J}_0)^2 - (-1)^{N_2-N_1} a^2 \tilde{J}_{N_2-N_1}^2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Тепер треба конкретизувати початкову умову, тобто розташування n_0 відносно N_1 і N_2 . Існують три різних варіанти: а) $n_0 < N_1, N_2$, б) $n_0 = N_1$ та нарешті в) $N_1 < n_0 < N_2$. За типом залежності повного квантового виходу $W^{(n_0)}(a) = W_{N_1}^{(n_0)}(a) + W_{N_2}^{(n_0)}(a)$ перші два варіанти принципово не відрізняються від розглянутих в [1] аналогічних варіантів за наявності лише одного витoku: у випадку б) крива $W^{(n_0)}(a)$ монотонно зростає, прямуючи до 1, якщо $a \rightarrow \infty$, а у випадку а) після короткого початкового росту $W^{(n_0)}(a)$ спадає до нуля (див.



розділ 1), тобто виток створює ефективну стінку, «закриваючи» частинку в ланцюжку (криві 1 та 2 на рис. 2). Тому детальніше розглянемо тут тільки випадок в). Уникаючи занадто громізд-

Рис. 2. Квантові виходи (необмежений ланцюжок, $n_0 = 0$): 1 – $N_1 = 1, N_2 = 2$; 2 – $N_1 = 0, N_2 = 1$; 3 – $N_1 = -1, N_2 = 1$. Криві 4–6 стосуються випадку $a_1 = 2a, a_2 = a$ ($N_1 = -1, N_2 = 1$); 4 – $W^{(0)} = W_{-1}^{(0)} + W_1^{(0)}$; 5 – $W_{-1}^{(0)}$; 6 – $W_1^{(0)}$

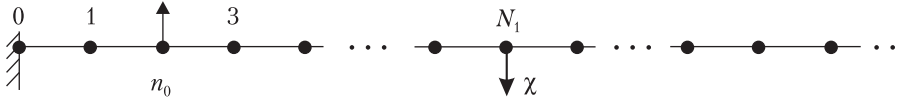


Рис. 3. На відміну від рис. 1, тут n приймає тільки цілі невід'ємні значення

ких формул, покладемо $n_0 = 0$, а $N_1 = -1$ і $N_2 = 1$. З виразів (7) тоді отримуємо:

$$\tilde{B}_1^{(0)} = \frac{\tilde{J}_1(1+a\tilde{J}_0) + a\tilde{J}_1\tilde{J}_2}{(1+a\tilde{J}_0)^2 - a^2\tilde{J}_2^2} = \frac{\tilde{J}_1}{1+a(\tilde{J}_0 - \tilde{J}_2)} = \frac{1}{\sqrt{s^2+1}(\sqrt{s^2+1+s})+2as} \quad (8)$$

і $\tilde{B}_{-1}^{(0)} = -\tilde{B}_1^{(0)}$. Далі робимо заміну $s \rightarrow i\omega$ і підраховуємо квантовий вихід за формулою (5), див. також [1], що приводить до виразу (в даному випадку $W_1^{(0)} = W_{-1}^{(0)}$ і $W^{(0)} = 2W_1^{(0)}$):

$$W^{(0)}(a) = 2 \left(\frac{2a}{\pi} \right) \left[\int_0^1 \frac{d\omega}{1+\omega^2(4a^2+4a\sqrt{1-\omega^2}-1)} + \int_1^\infty \frac{d\omega}{(\omega^2-1)(\sqrt{\omega^2-1}+\omega)^2+4\omega^2a^2} \right]. \quad (9)$$

Інтеграли (9) практично миттєво обчислює будь-яка стандартна програма. Результат подано кривою \mathcal{Z} на рис.2, і він виглядає дещо несподівано: квантовий вихід $W^{(0)}(a)$ знову прямує до одиниці при $a \rightarrow \infty$, тоді як за наявності одного витoku відбувалося повне закнення частинки в ланцюжку [1], див. також випадки е), ж) розділу 4. Нічого принципово не зміниться за асиметричних початкових умов (наприклад, $N_1 = -1$, $n_0 = 0$, $N_2 = 2$) або різної інтенсивності пасток (скажімо, $\chi_1 = 2\chi$ на вузлі $N_1 = -1$ і $\chi_2 = \chi$, $N_2 = 1$), проте в останньому випадку варто зауважити, що вихід $W_{-1}^{(0)}(a \rightarrow \infty) = 1/3$ у пастку з вдвічі більшою інтенсивністю є вдвічі меншим, ніж $W_1^{(0)}(a \rightarrow \infty) = 2/3$ (див. криві 4–6, рис.2), тобто ефект «відштовхування» від сусідньої пастки підсилюється зі збільшенням її інтенсивності.

4. Напівобмежений ланцюжок з одним витокom. Відмінність схеми рис. 3 від розглянутої в [1] тут полягає в тому, що нульова задача з гамільтоніаном $H_0 = L \sum_0^\infty (|n\rangle\langle n+1| + \text{h.c.})$, до якої потім «пришивається» витік, має трохи складніший розв'язок, ніж просто функції Бесселя $J_{n-n_0}(\tau)$. Він знаходиться, наприклад, методом твірної функції і має вигляд

$$\tilde{B}_{0,n}^{(n_0)} = \tilde{J}_{n-n_0} + (-1)^{n_0} \tilde{J}_{n+n_0+2}. \quad (10)$$

Тоді після додавання витoku на вузлі N за загальним рецептом (1)–(4) маємо

$$\tilde{B}_N^{(n_0)} = \frac{\tilde{B}_{0,N}^{(n_0)}}{1+a\tilde{B}_{0,N}^{(N)}} = \frac{\tilde{J}_{N-n_0} + (-1)^{n_0} \tilde{J}_{N+n_0+2}}{1+a[\tilde{J}_0 + (-1)^N \tilde{J}_{2N+2}]}, \quad (11)$$

і залишається розглянути різні початкові умови n_0 відносно розташування витoku N .

Якщо $N = 0$, є лише два принципово різних варіанти: а) $n_0 = 0$ і б) $n_0 > 0$. Якщо $N = 1$, таких варіантів три: в) $n_0 = 0$, г) $n_0 = 1$ та д) $n_0 > 1$. Нарешті, якщо $N \geq 2$, їх чотири: е) $n_0 = 0$, ж) $0 < n_0 < N$, з) $n_0 = N$ та і) $n_0 > N$. Насправді, як побачимо нижче, всі ці випадки зводяться, як і у випадку необмеженого ланцюжка, до одного з двох типів залежності $W^{(n_0)}(a)$: монотонного зростання від 0 до 1 або початкового росту з подальшим спаданням до нуля; залишається з'ясувати, якому випадку відповідає певний тип. Як і раніше, уникаючи занадто громіздких виразів, обмежимося мінімальними характерними значеннями n_0 і N .

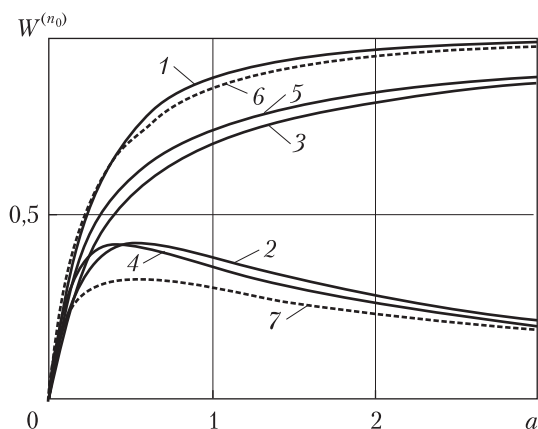


Рис. 4 Квантові виходи (напівобмежений ланцюжок): 1 – $n_0 = N = 0$; 2 – $n_0 = 1, N = 0$; 3 – $n_0 = 0, N = 1$; 4 – $n_0 = 2, N = 1$; 5 – $n_0 = 1, N = 2$. Для порівняння додано криві для необмеженого ланцюжка з одним витком [1]: 6 – $n_0 = N = 0$; 7 – $n_0 = 0, N = 1$

Варіант а) $N = n_0 = 0$. Після підстановки цих значень в (11) потрібна амплітуда виглядає досить просто:

$$\tilde{B}_0^{(0)} = \frac{\tilde{J}_0 + \tilde{J}_2}{1 + a(\tilde{J}_0 + \tilde{J}_2)} = \frac{2}{\sqrt{s^2 + 1 + s + 2a}}$$

Діючи у той же спосіб, що й після формули (8), отримуємо залежність $W_0^{(0)}(a)$ (див. криву 1 на рис. 4), що мало відрізняється від аналогічного випадку для необмеженого ланцюжка [1] (крива 6 того ж рисунку): в обох квантовий вихід монотонно зростає до одиниці, коли $a \rightarrow \infty$, чого, звісно, і слід було очікувати.

Варіант б) $N = 0, n_0 = 1$. Тут

$$\tilde{B}_0^{(1)} = \frac{\tilde{J}_1 + \tilde{J}_3}{1 + a(\tilde{J}_0 + \tilde{J}_2)} = -\frac{2(\sqrt{s^2 + 1} - s)}{\sqrt{s^2 + 1 + s + 2a}}$$

і розрахунок дає $W_0^{(1)}(a)$, зображений кривою 2 на рис. 4. Як бачимо, перенос початкової умови з 0 до 1 приводить до радикально іншої залежності від a , знов-таки схожої з такою для необмеженого ланцюжка з аналогічною початковою умовою (поряд з витком), для порівняння поданою кривою 7 на рис. 4. Оскільки тут присутня додаткова «стінка», то й крива 2 йде вище, але ефект повного «відходу частинки у нескінченність» (або ж «замкнення частинки в ланцюжку»), коли $W_0^{(1)}(a \rightarrow \infty) \rightarrow 0$, залишається тим самим.

Варіант в) $N = 1, n_0 = 0$. Тут

$$\tilde{B}_1^{(0)} = \frac{\tilde{J}_1 + \tilde{J}_3}{1 + a(\tilde{J}_0 - \tilde{J}_4)} = \frac{2}{(\sqrt{s^2 + 1 + s})^2 + 4as},$$

що дає криву 3 на рис. 4. «Дивним чином» ми знов повертаємося до монотонного росту $W_1^{(0)}(a)$, хоча й повільнішого, ніж у випадку а). Але ефекту замкнення, подібного до аналогічної схеми в необмеженому ланцюжку, вже нема!

Варіант г) $N = n_0 = 1$. Тут

$$\tilde{B}_1^{(1)} = \frac{\tilde{J}_0 - \tilde{J}_4}{1 + a(\tilde{J}_0 - \tilde{J}_4)} = -\frac{4s}{(\sqrt{s^2 + 1 + s})^2 + 4as}$$

і результат очікувано слабо відрізняється від випадку а) аналогічного розташування на кінці ланцюжка або в необмеженому ланцюжку (тобто від кривих 1 та 6 на рис. 4).

Варіант д) $N = 1, n_0 = 2$. Тут

$$\tilde{B}_1^{(2)} = \frac{-\tilde{J}_1 + \tilde{J}_5}{1 + a(\tilde{J}_0 - \tilde{J}_4)} = -\frac{4s(\sqrt{s^2 + 1} - s)}{(\sqrt{s^2 + 1 + s})^2 + 4as}$$

і ми повертаємося, як і у випадку б), до можливості повного відходу частинки в нескінченність, якщо $a \rightarrow \infty$ (крива 4, рис. 4 дуже схожа з кривою 2 того ж рисунка).

Варіант е) $N = 2, n_0 = 0$. Тут

$$\tilde{B}_2^{(0)} = \frac{\tilde{J}_2 + \tilde{J}_4}{1 + a(\tilde{J}_0 + \tilde{J}_6)} = \frac{(\sqrt{s^2 + 1} - s)[1 + (\sqrt{s^2 + 1} - s)^2]}{\sqrt{s^2 + 1} + a[1 + (\sqrt{s^2 + 1} - s)^6]}.$$

Як і слід очікувати, $W_2^{(0)}(a)$ практично не відрізняється від такого у випадку в), в якому $N = 1$ (крива 3, рис. 4): ефект замкнення зникає.

Варіант ж) $N = 2, n_0 = 1$. Тут

$$\tilde{B}_2^{(1)} = \frac{\tilde{J}_1 - \tilde{J}_5}{1 + a(\tilde{J}_0 + \tilde{J}_6)} = \frac{(\sqrt{s^2 + 1} - s)[1 - (\sqrt{s^2 + 1} - s)^4]}{\sqrt{s^2 + 1} + a[1 + (\sqrt{s^2 + 1} - s)^6]}.$$

Результат (крива 5, рис. 4) аналогічний таким у попередніх випадках в) та е).

Варіант з) $N = n_0 = 2$. Зрозуміло, що нема сенсу шукати особливих відмінностей від випадків а) ($N = n_0 = 0$) та г) ($N = n_0 = 1$).

Варіант і) $N = 2, n_0 = 3$. Тут теж нема сенсу шукати різницю з випадками б) ($N = 0, n_0 = 1$) та д) ($N = 1, n_0 = 2$).

5. Обговорення. Співставимо висновки роботи [1] для необмеженого ланцюжка з одним витоком з отриманими тут результатами. Перш за все, зберігається головний висновок: можливі лише два типи залежності повного квантового виходу захоплення від інтенсивності пастки – монотонне зростання від 0 до 1 (тип 1) або початкове зростання з подальшим погіршенням захоплення аж до нуля (тип 2). Проте в обох випадках, на відміну від класичної дифузійної міграції, при будь-яких скінченних значеннях інтенсивності захоплення *завжди* існує ймовірність частинці залишитися в ланцюжку («загубитися у нескінченності»), яка точно обраховується.

Віднесення залежності $W_1^{(0)}(a)$ до типу 1 чи 2 визначається взаємним розташуванням початкового вузла та вузлів з пастками (а також краю ланцюжка, якщо він напівобмежений). З поданих на рис. 2 та 4 залежностей, що вичерпують всі принципово різні варіанти цього розташування, впливає, що тип 1 виникає завжди, якщо на початковому вузлі n_0 є пастка (що більш-менш природно). Дещо цікавішим є те, що тип 1 виникає також тоді, коли початковий вузол опиняється між пастками або між краєм та пасткою. В усіх інших випадках виникає тип 2.

Загалом, ці висновки узгоджуються з відміченими в [1] особливостями порушення квантової когерентності процесу міграції частинки, що їх вносять витоки, слугуючи одночасно джерелом поздовжньої релаксації (яка забезпечує власне витік) та поперечної релаксації (яка руйнує когерентність розповсюдження). Проте цікаво простежити за конкуренцією останніх, зокрема, за реалізацією типу 1 у випадку n_0 між пастками або між краєм ланцюжка та пасткою. Тут завдяки поперечній релаксації частинка виявляється ніби «затиснутою» між витоками, що обмежують її відхід у нескінченність; зростання інтенсивності витоків перетворює їх у границі $a \rightarrow \infty$ на «стілки», і ланцюжок виявляється ефективно обмеженим з двох сторін. В таких умовах вирішальною стає поздовжня релаксація, яка зрештою приво-

дить до повного витікання частинки з ланцюжка — як то завжди відбувається в разі обмеженого ланцюжка. Про те, що підсилення витоку радше перетворює його на стінку, свідчить і розглянутий випадок витоків різної інтенсивності (криві 4–6, рис. 2), коли *вдвічі сильніший* витік має у границі $a \rightarrow \infty$ *вдвічі менший* квантовий вихід.

Наостанок зазначимо, що розглянуті тут і в роботі [1] схеми (міграція + пастки) стосуються багатьох задач, пов'язаних з переносом енергії збудження або заряду в низьковимірних системах¹. До останніх, окрім традиційних об'єктів наноелектроніки [4], відносяться численні біомолекулярні процеси — наприклад, екситонний транспорт в фотосинтетичних антенах з подальшим захопленням реакційним центром, електронний транспорт через макромолекули білків та ДНК тощо [5–8]. Тому подані тут результати щодо особливостей квантової міграції можуть виявитися корисними для досить різноманітних застосувань.

Робота виконана в межах цільової теми 0112-U-000056 «Фундаментальні властивості фізичних систем» ВФА НАН України.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Загородній А.Г., Христофоров Л.М. Теорема Пойа і міграція та захоплення квантової частинки // Доп. НАН України — 2016. — № 11. — С. 44–51.
2. Christophorov L.N., Kharkyanen V.N. Theory of interimpurity transitions in condensed medium // Phys. Stat. sol. (b) — 1983. — **116**, № 2. — P. 415-425.
3. Li G., Govind N., Ratner M.A., Cramer C.J., Gagliardi L. Influence of coherent tunneling and incoherent hopping on the charge transfer mechanism in linear donor–bridge–acceptor systems // J. Phys. Chem. Lett. — 2015. — **6**, № 24. — P. 4889-4897.
4. Siebbeles L.D.A., Grozem F.C. (Editors). Charge and exciton transport through molecular wires. — Weinheim: Wiley-VCH, 2011. — 319 p.
5. Davydov A.S. Biology & quantum mechanics. — Oxford: Pergamon, 1982. — 229 p.
6. Van Amerongen H., Valkunas L., Van Grondelle R. Photosynthetic excitons. — Singapore: World Scientific, 2000. — 479 p.
7. Hildner R., Brinks D., Nieder J. B., Cogdell R.J., van Hulst N.F. Quantum Coherent Energy Transfer over Varying Pathways in Single Light-Harvesting Complexes // Science — 2013. — **340**, № 6139. — P. 1448-1451.
8. Liu C., Xiang L., Zhang Y., Zhang P., Beratan D.N., Li Y., Tao N. Engineering nanometre-scale coherence in soft matter // Nature Chem. — 2016. — **8**, № 10. — P. 941-945.

Надійшло до редакції 10.10.2016

REFERENCES

1. Zagorodny A.G., Christophorov L.N. Dopovidi NAN Ukrainy, 2016, No 11: 44–51 (in Ukrainian).
2. Christophorov L.N., Kharkyanen V.N. phys. stat. sol. (b), 1983, **116**, No 2: 415-425.
3. G. Li, Govind N., Ratner M.A., Cramer C.J., Gagliardi L. J. Phys. Chem. Lett., 2015, **6**, No 24: 4889-4897.
4. Siebbeles L.D.A., Grozem F.C. (Editors). Charge and exciton transport through molecular wires, Weinheim: Wiley-VCH, 2011.
5. Davydov A.S. Biology & quantum mechanics. Oxford: Pergamon, 1982.
6. Van Amerongen H., Valkunas L., Van Grondelle R. Photosynthetic excitons, Singapore: World Scientific, 2000.
7. Hildner R., Brinks D., Nieder J. B., Cogdell R.J., van Hulst N.F. Science, 2013, **340**, No 6139: 1448-1451.
8. Liu C., Xiang L., Zhang Y., Zhang P., Beratan D.N., Li Y., Tao N. Nature Chem., 2016, **8**, No 10: 941-945.

Received 10.10.2016

¹ Зокрема, подібні розглянутим квантові виходи визначають швидкості донор-акцепторного переносу у місткових (bridge-assistant) реакціях [2, 3].

А.Г. Загородний, Л.Н. Христофоров

Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины, Киев
E-mail: lchrist@bitp.kiev.ua

МИГРАЦИЯ КВАНТОВОЙ ЧАСТИЦЫ
В ЦЕПОЧКЕ С ЛОВУШКАМИ: КВАНТОВЫЕ ВЫХОДЫ ЗАХВАТА

Рассчитаны квантовые выходы захвата квантовой частицы, мигрирующей по цепочке с ловушками. Показано, что возможны лишь два типа зависимости квантового выхода от интенсивности захвата χ с альтернативным поведением (асимптотическим приближением к 0 или 1) в пределе $\chi \rightarrow \infty$. Реализация конкретного типа определяется начальным условием миграции.

Ключевые слова: низкоразмерные решетки, транспорт квантовых частиц, миграция и захват, квантовый выход.

A.G. Zagorodny, L.N. Christophorov

Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the NAS of Ukraine, Kiev
E-mail: lchrist@bitp.kiev.ua

MIGRATION OF A QUANTUM PARTICLE
IN THE CHAIN WITH TRAPS: QUANTUM YIELDS OF CAPTURE

Quantum yields of capture of a particle migrating in a chain with traps are calculated. It is shown that there exist only two types of the dependence of the quantum yield on the trap intensity χ , tending asymptotically to 0 or 1 in the $\chi \rightarrow \infty$ limit. Realization of a certain type is determined by initial conditions of migration.

Key words: low-dimensional lattices, quantum particle transport, migration and capture, quantum yield.