

О.Ю. СЕМЧУК,¹ А.А. БІЛЮК,¹ О.О. ГАВРИЛЮК,¹ А.І. БІЛЮК^{2,3}

¹ Інститут хімії поверхні ім. О. Чуйка НАН України

(Вул. Ген. Наумова, 17, Київ 03164; e-mail: philosoph.tb@gmail.com)

² Вінницький національний аграрний університет

(Вул. Сонячна, 3, Вінниця 21008)

³ Вінницький державний педагогічний університет імені Михайла Коцюбинського

(Вул. Острозького, 32, Вінниця 21100)

РЕЗОНАНСНИЙ ПЕРЕНОС ЕНЕРГІЇ ВІД МОЛЕКУЛИ БАРВНИКА ДО ВУГЛЕЦЕВОЇ НАНОТРУБКИ

УДК 539

У цій роботі досліджено особливості процесу передачі енергії резонансу Ферстера від збуджених молекул барвника до напівпровідникових одностінних вуглецевих нанотрубок, зокрема, залежність швидкості передачі енергії від відстані між молекулою барвника та самою вуглецевою нанотрубкою. Аналіз отриманих результатів показує, зокрема, що ширина забороненої зони ε_g у межах $\varepsilon_g \sim (0,5-5) \cdot 10^{-19}$ Дж суттєво не впливає на швидкість передачі енергії $\gamma(\hbar\Omega)$, значення якої визначається індукованим дипольним моментом μ_{eg} , кількістю енергії, що передається в процесі резонансного переносу $\hbar\Omega$, та ефективною масою електрона в напівпровідниковій вуглецевій нанотрубі m^* . Запропонований підхід проливає нове світло на розуміння фізичного процесу резонансного переносу енергії в різних типах низьковимірних фізичних та біологічних наноструктур.

Ключові слова: графен, молекула барвника, теорія функціонала густини, механізм Ферстера, швидкість передачі енергії, гібридна наноструктура на основі вуглецю.

1. Вступ

Поглинання енергії світла (електромагнітного випромінювання) наночастинками, зокрема металевими наночастинками, завжди було в центрі уваги П.М. Томчука. Достатньо згадати його широко відомі праці на цю тему, зокрема статті, опубліковані у високореєтингових журналах [1, 2]. Тепер вони знайшли своє ідейне продовження у вивченні переносу енергії в різних типах наноструктур, зокрема в таких структурах, як молекула барвника – вуглецева нанотрубка [3]. Останнім часом вуглецеві нанотрубки (ВНТ) є одними з кандидатів на наступне покоління напівпровідникової електроніки [4], оптоелектроніки ближнього інфрачервоного діапазону [5] та поглиначів світла

або прозорих провідників для сонячних елементів [6]. Зокрема, з використанням напівпровідників на основі вуглецевих нанотрубок з контрольованою забороненою зоною зараз готуються мезомасштабні мережі з щільно переплетеними джгутами (плівками). [7, 8]. Ці структури (плівки) можна використовувати у фотоелектричних установках та фотодетекторах, в яких напівпровідникові трубки є фотопоглиначами, подібно до електронно-донорних полімерів у полімерних сонячних елементах [9]. Як і полімери, вуглецеві нанотрубки мають велике оптичне поглинання, яке можна регулювати, і їх можна обробляти у розчині, але нанотрубки демонструють надшвидкий перенос заряду та енергії на великі відстані та стабільність у повітрі [10]. Хоча фотофізика окремих нанотрубок є поширеною темою досліджень [9, 11], властивості цих нових мезомасштабних структур (плівок) здебільшого невідомі. Крім того, можливість контролювати склад плівок із забороненими зонами, дає змогу використовувати їх, як систему для вивчення різних видів процесів переносу заряду та енергії. Завдання вивчення особливостей

Цитування: Семчук О.Ю., Білюк А.А., Гаврилюк О.О., Білюк А.І. Резонансний перенос енергії від молекули барвника до вуглецевої нанотрубки. *Укр. фіз. журн.* **70**, № 10, 712 (2025).

© Видавець ВД “Академперіодика” НАН України, 2025. Стаття опублікована за умовами відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

переносу енергії в таких структурах є цікавим та актуальним. Перенос енергії від молекули барвника до вуглецевої нанотрубки можна розглядати як процес безвипромінювального переносу енергії від збудженого донора до акцептора. Він відомий як резонансний перенос енергії Форстера (FRET) [12]. У FRET взаємодія між донором та акцептором є кулонівською. Диполі електронного переходу донора та акцептора взаємодіють електростатично, що призводить до залежності R^{-6} швидкості переносу від відстані $\gamma(R)$ між донором та акцептором. Ферстер теоретично дослідив цей процес та отримав аналітичний вираз для залежності швидкості передачі енергії від відстані [12]. Швидкість FRET від диполя до об'ємних електронних мод збудження металу має d^{-3} залежність (d – відстань від диполя до металу) [13, 14]. Нещодавно у роботах [15, 16] було показано, що процес передачі енергії від флуорофора до графену має d^{-4} залежність і є дуже ефективним. Експерименти показали, що графен може гасити флуоресценцію флуорофорів, і цей процес можна використовувати для візуалізації графену на поверхнях [17] та графенових пластівців у розчині [18], а також для придушення флуоресценції в резонансній раманівській спектроскопії [19]. Зовсім недавно Говоров та ін. [20] повідомили про дослідження процесу передачі енергії збудження від наночастинок до нанодротів. Коли радіус наночастинки малий порівняно з відстанню між наночастиною та нанодротом d , можна вважати збудження в наночастинках локалізованими і, отже, дипольними. Для великих відстаней від наночастинок до дроту вони виявляють d^{-5} залежність. Оскільки акцепторні збудження обмежені одним виміром, швидкість має d^{-5} залежність.

У цій роботі ми дослідили особливості процесу резонансного переносу енергії Ферстера від збуджених молекул барвника (флуорофорів) до напівпровідникових одностінних вуглецевих нанотрубок, зокрема, залежність швидкості переносу енергії від відстані між молекулою барвника та самою вуглецевою нанотрубкою. Ми показали, що енергетична заборонена зона в електронному спектрі напівпровідникової нанотрубки суттєво не впливає на швидкість переносу енергії, значення якої визначається індукованим дипольним моментом, кількістю енергії, що передається в процесі резонансного переносу, та ефективною масою електрона в нанотрубці.

2. Модель швидкості передачі енергії

Тепер розглянемо процес передачі енергії резонансу Форстера від молекули барвника до електронів, обмежених дуже довгою нанотрубкою радіуса R та довжини $L \rightarrow \infty$ (див. рис. 1).

Ми використовуємо найпростіший можливий опис для електронів у нанотрубці. Припускаємо, що маємо напівпровідникову нанотрубку, структура якої подібна до нанотрубки з нітриду бору, із забороненою зоною ε_g (див. рис. 2 [21]).

Стани вище та нижче забороненої зони ε_g можна характеризувати імпульсом, паралельним осі трубки, який ми позначимо k , та кутовим моментом навколо осі трубки, який дорівнює (де $i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) [22, 23] як

$$\Psi_{k,m}^{\pm}(\rho, \phi, z) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N e^{ikz_i + im\phi} \chi^{\pm}(c\mathbf{r} - \mathbf{R}_i). \quad (1)$$

Надрядкові індекси $\pm$ у хвильовій функції $\Psi_{k,m}^{\pm}(\rho, \phi, z)$ позначають стани вище (+) або нижче (–) ширини забороненої зони ε_g . Функції $\chi^{+}(r - R_i)$ та $\chi^{-}(r - R_i)$ позначають локалізовані орбіталі в i -му вузлі графенової решітки, що вно-

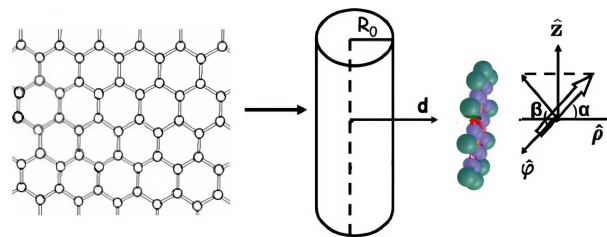


Рис. 1. Схема дипольного моменту переходу донорного барвника та трубки. Зверніть увагу, що нанотрубка утворюється шляхом згинання листа графену. Праворуч показано диполь переходу молекули барвника під кутами, які вона утворює з осями координат

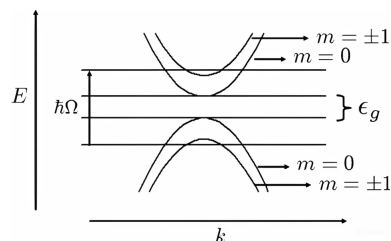


Рис. 2. Схема одновимірних енергетичних зон нанотрубки, що показує квантові числа вздовж екваторіального напрямку, енергетичну заборонену зону та кількість переданої енергії

сять вклад у зону провідності та валентну зону відповідно; N – кількість вузлів у решітці нанотрубки. Будемо вважати, що рівні енергії електронів у нанотрубці описуються таким співвідношенням:

$$\varepsilon_{k,m}^{\pm} = \pm \left(\frac{\varepsilon_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 m^2}{2m^* R} \right), \quad (2)$$

де m^* – ефективна маса електрона в нанотрубці, R – радіус нанотрубки. З огляду на вищесказане, збудження електрона з $\psi_{k_i, m_s}^{-}(\mathbf{r})$ до $\psi_{k_f, m_f}^{+}(\mathbf{r})$ призводить до появи тимчасової густини заряду на нанотрубці, яка визначається як

$$\sigma(\mathbf{r}) = -e \psi_{k_f, m_f}^{+*}(\mathbf{r}) \psi_{k_i, m_i}^{-}(\mathbf{r}) = -e \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e^{-iqz_i} \times \\ \times e^{-im_q \varphi_i} \chi^{-}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \chi^{+*}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i), \quad (3)$$

де ми поклали $k_f = k_i + q$, $m_f = m_i + m_q$ та знехтували добутком, χ^s які належать різним вузлам решітки, (R, φ, z) – це циліндричні полярні координати $\mathbf{R}_i$. Електромагнітний потенціал, зумовлений такою щільністю переходу, визначається як

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int d\mathbf{r}_2 \frac{\sigma(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|}. \quad (4)$$

Оскільки густина $\chi^{-}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_i) \chi^{+*}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_i)$ локалізована поблизу i -го атома, потенціал можна записати як

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 N} \mu_{\pm} \nabla_{\mathbf{r}} \sum_{i=1}^N \frac{e^{-iqz_i} e^{-im_q \varphi_i}}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|}, \quad (5)$$

де $\mu_{\pm} = -e \int d\mathbf{r}_2 \chi^{-}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_i) \chi^{+*}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_i)$ – диполь переходу $\chi^{-} \rightarrow \chi^{+}$. Для малих значень q суму у наведеному вище рівнянні можна замінити інтегралом, так що

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 A_u} \mu_{\pm} \nabla_{\mathbf{r}} \int dR_i \frac{e^{-iqz_i} e^{-im_q \varphi_i}}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|}, \quad (6)$$

де A_u – площа поверхні елементарної комірки циліндричної поверхні. Вважаємо, що елементарна комірка решітки містить один атом, що призводить до $A = NA_u$, де A – площа поверхні довгого циліндра. Тепер ми використовуємо такий мультипольний вираз для $1/|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|$ члена в циліндричних координатах [24]

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|} = \frac{1}{\pi} \sum_{m'=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dk' e^{im'(\varphi - \varphi_i)} \times$$

$$\times e^{ik'(z - z_i)} I_m(|k'| R) K_{m'}(|k'| dR). \quad (7)$$

Де ми використовували $\mathbf{r} = d \cos \varphi \mathbf{i} + d \sin \varphi \mathbf{j} + z \mathbf{k}$ та $\mathbf{R}_i = a \cos \varphi_i \mathbf{i} + a \sin \varphi_i \mathbf{j} + z \mathbf{k}$. Де $I_m(x)$ та $K_m(x)$ є функціями Бесселя першого та другого роду. Підставляючи це назад у (7) та обчислюючи інтеграли, отримуємо

$$\Phi(r) = \frac{R}{\varepsilon A} I_{|m_q|}(|q| R) \mu_z \cdot \nabla_r [e^{-iqz} e^{-im\phi}] K_{|q|}(|q| R). \quad (8)$$

Тепер ми використовуємо $\mu_z = \mu_{\rho}^{+} \hat{p} + \mu_{\varphi}^{+} \hat{\phi} + \mu_z^{+} \hat{z}$ для отримання

$$\Phi(r) = \frac{eR}{\varepsilon A} I_{|m_q|}(|q| R) e^{-im_q \varphi} e^{-iqz} \times \\ \times \left[-\frac{\mu_{\rho}^{\pm} |q|}{2} (K_{|m_q|-1}(|q| d) + K_{|m_q|+1}(|q| d)) - \right. \\ \left. - i \left(\frac{m_q \mu_{\varphi}^{\pm}}{d} + q \mu_z^{\pm} \right) K_{|m_q|}(|q| d) \right]. \quad (9)$$

Тепер ми оцінюємо взаємодію, використовуючи матричний елемент для взаємодії, який стає, $U = \mu_{eg}^D \cdot \nabla \Phi$ і він задається як

$$U = \frac{R}{\varepsilon A} \Phi(r) = \frac{eR}{\varepsilon A} I_{|m_q|}(|q| R) e^{-im_q \varphi} e^{-iqz} \times \\ \times \left[-\frac{\partial^2 K_{|m_q|}(|q| R)}{\partial d^2} \mu_{\rho}^{\pm} \mu_{\rho}^D - \frac{\partial K_{|q|}(|q| R)}{\partial d} \times \right. \\ \times \left. \left\{ \frac{m_q}{d} (\mu_{\varphi}^{\pm} \mu_{\rho}^D + \mu_{\varphi}^D \mu_{\rho}^{\pm}) + q (\mu_z^D \mu_{\rho}^{\pm} + \mu_z^{\pm} \mu_{\rho}^D) - \right\} \right. \\ \left. - \frac{qm_q}{d} (\mu_z^{\pm} \mu_{\varphi}^D + \mu_{\varphi}^{\pm} \mu_z^D) \right]. \quad (10)$$

Швидкість передачі енергії від молекули барвника до нанотрубки $\gamma(\hbar\Omega)$ можна розрахувати за допомогою золотого правила Фермі, яке для нашого конкретного випадку можна записати в такому вигляді

$$\gamma(\hbar\Omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_q^{U(\mathbf{q})} {}^2F(\mathbf{q}), \quad (11)$$

де ми використали $\mu_{eg}^D = \mu_{\rho}^D \hat{p} + \mu_{\varphi}^D \hat{\phi} + \mu_z^D \hat{z}$. Where $F(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}_i} \delta(E_{\mathbf{k}_i + \mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}_i} - \hbar\Omega)$.

Таким чином, як випливає з (11), залежність швидкості передачі енергії від відстані визначається функціональними формами енергії взаємодії,

$U(q)$ та $F(q)$. Тут ми використовуватимемо загальний формалізм, наведений вище та розроблений у [15, 16, 25, 26], щоб зрозуміти процес передачі енергії від локалізованого донора у випадку напівпровідникового графенового листа, складеного з утворенням нанотрубки. Зауважимо, що закон дисперсії енергії носіїв заряду в графеновій нанотрубці має такий вигляд

$$E_{\mathbf{k},m}^{\pm} = \pm \left(\frac{\varepsilon_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 m^2}{2m^* R^2} \right), \quad (12)$$

де m^* – ефективна маса електрона в графеновій нанотрубці.

Тепер оцінимо $F(\mathbf{q})$. У нашому конкретному випадку це значення матиме такий вигляд:

$$F(\mathbf{q}) = \frac{Lm}{\pi \hbar^2} \sum_{m_i} \int_{-\infty}^{\infty} dk_i \delta \left[(k_i + q)^2 + k_i^2 + \frac{(m_i + m_g)^2}{R^2} - \frac{2m^* (\hbar\Omega - \varepsilon_g)}{\hbar^2} \right]. \quad (13)$$

Обчислюючи інтеграл для k_i , отримуємо

$$F(\mathbf{q}) = \frac{Lm}{\pi \hbar^2} \times \sum_{\{m_i\}} \frac{1}{\left| \sqrt{\frac{4m^* (\hbar\Omega - \varepsilon_g)}{\hbar^2} - \frac{2}{R^2} \left\{ (m_i + m_g)^2 + m_i^2 \right\}} - q^2 \right|}. \quad (14)$$

Для малих значень переданого імпульсу ми можемо знехтувати цим q^2 членом у порівнянні з цим

$$\frac{4m^* (\hbar\Omega - \varepsilon_g)}{\hbar^2} - \frac{2}{R^2} \left\{ (m_i + m_g)^2 + m_i^2 \right\}. \quad (15)$$

Тепер, підставляючи вираз (15) у вираз для швидкості передачі енергії (11), отримуємо:

$$\gamma(\hbar\Omega) = \frac{L^2 m^*}{\pi \hbar^2} \times \sum_{\{m_s\}, m_q} \frac{1}{\left| \sqrt{\frac{4m^* (\hbar\Omega - \varepsilon_g)}{\hbar^2} - \frac{2}{R^2} \left\{ (m_i + m_g)^2 + m_i^2 \right\}} \right|} \times \int_{-\infty}^{\infty} |U(q)|^2 d\bar{q}, \quad (16)$$

де $U(\mathbf{q})$ визначається як (10). Щоб обчислити інтеграл за q ми змінюємо змінну інтегрування на $t = qd$, а потім використовуємо асимптотичну форму $I_{|m_q|} \left(\frac{|t|R}{d} \right)$ задану як

$$I_{|m_q|} \left(\frac{|t|R}{d} \right) \simeq \left(\frac{|tR|}{2d} \right)^{|m_q|} \frac{1}{\Gamma(|m_q| + 1)}. \quad (17)$$

Інтеграл за t тепер можна легко обчислити для різних $m_q = 0$. Спочатку обчислимо інтеграл за всіма можливими орієнтаціями дипольного моменту переходу донора, щоб отримати такий вираз для швидкості:

$$\gamma(\hbar\Omega) = \frac{3m^* \left(33\mu_z^{\pm 2} + 71\mu_\rho^{\pm 2} \right)}{8192\pi \hbar^3 \varepsilon_0^2 d^5} \times \sum_{|m_1|} \frac{\mu_{eg}^2}{\left| \sqrt{\frac{m^* (\hbar\Omega - \varepsilon_g)}{\hbar^2} - \frac{m^2}{R^2}} \right|}, \quad (18)$$

де маємо $|\mu_{eg}^D| = \mu_{eg}$. Отже, провідний член порядку у виразі або швидкість як d^{-5} .

Для числових розрахунків ми вибираємо такі значення параметрів: ефективна маса електрона в нанотрубці $m^* = 0,25m_e$, швидкість Фермі $v_f = 0,9 \cdot 10^6$ м/с.

Якщо ми оберемо найпростіший випадок, коли $m_i = 0$ тоді (18) можна записати як

$$\gamma(\hbar\Omega) = \frac{3m^* \left(33\mu_z^{\pm 2} + 71\mu_\rho^{\pm 2} \right)}{8192\pi \hbar^3 \varepsilon_0^2 d^5} \times \frac{\mu_{eg}^2}{\sqrt{\left| \frac{m^* (\hbar\Omega - \varepsilon_g)}{\hbar^2} \right|}} = \frac{3\mu_{eg}^2 \sqrt{m^*} \left(33\mu_z^{\pm 2} + 71\mu_\rho^{\pm 2} \right)}{8192\pi \hbar^2 \varepsilon_0^2 \sqrt{(\hbar\Omega - \varepsilon_g)} d^5}. \quad (19)$$

Графічна залежність швидкості передачі енергії від барвника $\gamma(\hbar\Omega)$ до вуглецевої напівпровідникової нанотрубки залежно від відстані між ними d показано на рис. 3. Аналіз отриманих результатів показує, зокрема, що енергетична заборонена зона ε_g в межах $\varepsilon_g \sim (0,5-5) \cdot 10^{-19}$ Дж суттєво не впливає на швидкість передачі енергії $\gamma(\hbar\Omega)$, значення якої визначається індукованим дипольним моментом μ_{eg} , тобто кількістю переданої енергії $\hbar\Omega$ у FRET та ефективною масою електрона в нанотрубці m^* .

З рис. 3 також випливає, що найефективніша передача енергії відбувається на відстанях порядку кількох нанометрів і фактично зупиняється

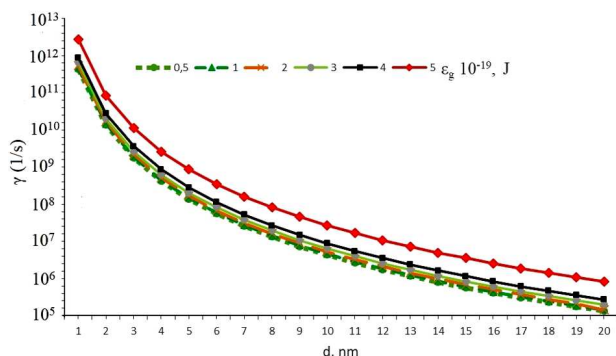


Рис. 3. Залежність швидкості передачі енергії від барвника до напівпровідникової нанотрубки від відстані між ними d

на $d \geq 20$ нанометрів. Цей результат, принаймні якісно, збігається з результатами роботи [20], в якій просторова залежність швидкостей передачі енергії від молекули барвника до нанодотів була розрахована за допомогою методу, відмінного від нашого.

3. Висновки

Ми дослідили залежність процесу резонансного переносу енергії від локалізованого донора, молекули барвника, до напівпровідникової нанотрубки від відстані d між ними. Ми виявили, що в системі молекула барвника – напівпровідник–вуглецева нанотрубка швидкість переносу енергії залежить від відстані як d^{-5} . Аналіз результатів числового моделювання показує, зокрема, що енергетична щільність ε_g в межах $\varepsilon_g \sim (0,5-5) \cdot 10^{-19}$ Дж суттєво не впливає на швидкість передачі енергії $\gamma (\hbar\Omega)$, значення якої визначається індукованим дипольним моментом μ_{eg} молекули барвника, кількістю енергії, що передається $\hbar\Omega$ в FRET, та ефективною масою електрона в напівпровідниковій нанотрубці m^* . Ми сподіваємося, що прості аналітичні моделі передачі енергії, представлені тут, можуть призвести до цікавого фізичного розуміння процесу резонансної передачі енергії в різних видах низьковимірних фізичних та біологічних наноструктур.

1. P.M. Tomchuk, N.I. Grigorchuk. Shape and size effect on the energy absorption by small metallic particles. *Phys. Rev. B* **73**, 155423 (2006).
2. N.I. Grigorchuk, P.M. Tomchuk. Optical and transport properties of spheroidal metal nanoparticles with account for the surface effect. *Phys. Rev. B* **84**, 085448 (2011).

3. B. Valeur. *Molecular Fluorescence* (Wiley-VCH, 2002).
4. O.Y. Semchuk, O. Havrylyuk, A.A. Biliuk, A.I. Biliuk. Plasmons in graphene: overview and perspectives of use. *Surface* **16**, 51 (2024).
5. V. May, O. Kuhn. *Charge and Energy Transfer Dynamics in Molecular Systems* (Wiley-VCH, 2000).
6. M.J. Shea, M.S. Arnold. 1% solar cells derived from ultrathin carbon nanotube photoabsorbing films. *Appl. Phys. Lett.* **102**, 243101 (2013).
7. L. Stryer, R.P. Haugland. Energy transfer: A spectroscopic ruler. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **58**, 719 (1967).
8. R.S. Swathi, K.L. Sebastian. Distance dependence of fluorescence resonance energy transfer. *J. Chem. Sci.* **121**, 777 (2009).
9. E. Hennebicq, G. Pourtois, G.D. Scholes, L.M. Herz, D.M. Russell, C. Silva, S. Setayesh, A.C. Grimsdale, K. Mullen, J.L. Bredas, D. Beljonne. Exciton migration in rigid-rod conjugated polymers: An improved Förster model. *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 4744 (2005).
10. T.E. Dykstra, E. Hennebicq, D. Beljonne, J. Gierschner, G. Claudio, E.R. Bittner, J. Knoester, G.D. Scholes. Conformational disorder and ultrafast exciton relaxation in PPV-family conjugated polymers. *J. Phys. Chem. B* **113**, 656 (2009).
11. L.G. Garrison, T.D. Krauss. Photophysics of individual single-walled carbon nanotubes. *Accounts of Chem. Res.* **41**, 235 (2008).
12. T. Förster. Zwischenmolekulare energiewanderung und fluoreszenz. *Ann. Phys.* **437**, 55 (1948).
13. A.P. Alivisatos, D.H. Valdeck, C.B. Harris. Nonclassical behavior of energy transfer from molecules to metal surfaces: Biacetyl ($3\pi\pi^*$)/Ag(111). *J. Chem. Phys.* **82**, 541 (1985).
14. B.N.J. Persson, N.D. Lang. Electron-hole-pair quenching of excited states near a metal. *Phys. Rev. B* **26**, 5409 (1982).
15. R.S. Swathi, K.L. Sebastian. Resonance energy transfer from a dye molecule to graphene. *J. Chem. Phys.* **129**, 054703 (2008).
16. R.S. Swathi, K.L. Sebastian. Long range resonance energy transfer from a dye molecule to graphene has (distance)-4 dependence. *J. Chem. Phys.* **130**, 086101 (2009).
17. A. Sagar, K. Kern, K. Balasubramanian. Marker-free on-the-fly fabrication of graphene devices based on fluorescence quenching. *Nanotechnology* **21**, 015303 (2010).
18. J. Kim, L.J. Cote, F. Kim, J. Huang. Visualizing graphene based sheets by fluorescence quenching microscopy. *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 260 (2010).
19. L. Xie, X. Ling, Y. Fang, J. Zhang, Z. Liu. Graphene as a substrate to suppress fluorescence in resonance Raman spectroscopy. *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 9890 (2009).
20. P.L. Hernandez-Martinez, A.O. Govorov. Exciton energy transfer between nanoparticles and nanowires. *Phys. Rev. B* **78**, 035314 (2008).

21. V.A. Margulis, E.E. Muyumin, E.A. Gaiduk. Dynamic dielectric response and electron-energy-loss spectra of individual single-walled BN nanotubes. *Phys. Rev. B* **77**, 035425 (2008).
22. A. Balassis, G. Gumbs. Plasmon instability in energy transfer from a current of charged particles to multiwall and cylindrical nanotube arrays based on self-consistent field theory. *Phys. Rev. B* **74**, 045420 (2006).
23. G. Gumbs, A. Balassis. Comparison of the stopping power of plasmons and single-particle excitations for nanotubes. *Phys. Rev. B* **71**, 235410 (2005).
24. J.D. Jackson. *Classical Electrodynamics* (John Wiley & Sons, 1962).
25. O.Y. Semchuk, O.O. Havryliuk, A.A. Biliuk. Inductive-resonance energy transfer in hybrid carbon nanostructures. *Him. Fiz. Technol. Poverhni* **15**, 328 (2024).
26. W. Wlazlo, M. Langer, O.Yu. Semchuk, S. Osella. Unraveling the competition between charge and energy transfer in 0D/2D nanographene-graphene heterojunctions. *Theor. Chem. Acc.* **144**, 14 (2025).

Одержано 15.08.25

O.Yu. Semchuk, A.A. Biliuk, O.O. Havryliuk, A.I. Biliuk

RESONANT ENERGY TRANSFER FROM A DYE MOLECULE TO A CARBON NANOTUBE

In this paper, the features of the Förster resonance energy transfer from excited dye molecules to semiconducting single-walled carbon nanotubes are investigated, in particular, the dependence of the energy transfer rate on the distance between the dye molecule and the carbon nanotube itself. Analysis of the obtained results shows, in particular, that the energy band gap ε_g within the limits $\varepsilon_g \sim (0.5-5) \times 10^{-19}$ J does not significantly affect the energy transfer rate $\gamma(\hbar\Omega)$, the value of which is determined by the induced dipole moment μ_{eg} , the amount of energy transferred in the resonant transfer process $\hbar\Omega$, and the effective mass of the electron in the semiconductor carbon nanotube m^* . The proposed approach sheds a new light on the understanding of the physical process of resonant energy transfer in various types of low-dimensional physical and biological nanostructures.

Keywords: graphene, dye molecule; density functional theory, Förster mechanism, rate of energy transfer, carbon-based hybrid nanostructure.