

Сравнительный анализ динамики электронной локализации в тримерных и пентамерных нанокластерах во внешнем электрическом поле

О. В. Ялтыченко, Е. Ю. Канаровский

*Институт прикладной физики, Молдавский государственный университет,
г. Кишинёв, MD-2028, Молдова,*

**e-mail: oialt@mail.ru, **e-mail: kanarovskii@gmail.com*

Поступила в редакцию 29.04.2026

После доработки 21.05.2026

Принята к публикации 17.06.2026

Дано описание динамики локализации обобществлённого электрона в нанокластере с разным числом центров во внешнем низкочастотном электрическом поле. Временные зависимости амплитуд вероятности нахождения электрона на различных кластерных центрах получены как численные решения модельной системы дифференциальных уравнений при различных значениях модельных параметров. Предложенная модельная система применяется к пентамерам и тримерам и позволяет учесть разные геометрические конфигурации нанокластеров. При построении теоретической модели, центры нанокластера предполагались слабо туннельно-связанными, тогда как электрон-колебательная связь обобществлённого электрона с лигандным окружением на каждом из кластерных центров считалась существенной. Туннелирование учитывалось только между ближайшими соседними кластерными центрами, каждый из которых имеет ядро и лигандную оболочку, и такие составные центры считались эквивалентными. В результате численного моделирования для тримера и пентамера показано, что внешнее электрическое поле проявляет себя как управляющий фактор, поскольку вариации его частоты и амплитуды напряжённости приводят к реализации различных режимов электронной локализации в нанокластерах. В общем, полученные режимы распределения электронной плотности в тримере и пентамере характеризуются формой временной зависимости, длительностью электронной локализации на кластерных центрах и длительностью межцентрового переключения электронной локализации. Изменения параметров электрического поля обеспечивают регулировку и контроль этих характеристик. Сравнительный анализ полученных результатов показывает, что в пятицентровом нанокластере, который можно также рассматривать как тример с димеризованными концами, и трёхцентровом нанокластере динамика распределения электронной плотности практически совпадает.

Ключевые слова: многоцентровый нанокластер, тример, пентамер, лигандная оболочка, низкочастотное электрическое поле, электрон-колебательное взаимодействие, электронная локализация

УДК 538.9+539.1.01+539.189

<https://doi.org/10.52577/eom.2026.62.3.30>

ВВЕДЕНИЕ

Теоретические и экспериментальные исследования на протяжении последних десятилетий охватывают широчайший диапазон металлических и неметаллических кластерных систем и приобретают всё более мультидисциплинарный характер, объединяя усилия физиков, химиков и биологов в изучении их свойств и процессов с их участием [1–4]. Базовыми методами получения нанокластерных систем являются газофазные, жидкофазные и твердофазные методы с использованием нанореакторов, плёнок Ленгмюра-Блоджетт, адсорбционных слоёв, нанопор или рельефа поверхности подложки [3–5]. Эти методы успешно сочетаются с методами лазерного или плазменного испарения, нанолитографии. Перспективными также являются метод темплатного (матричного) синтеза,

используемый совместно с процессом самосборки, и зондовая нанотехнология сборки. Таким образом, нанокластеры могут быть сформированы как в объёме конденсированных и наноструктурированных сред, так и на поверхностях и границах раздела разных сред.

По своей сути кластер представляет собой совокупность взаимодействующих однородных элементов и, как единая система, обладает определёнными свойствами. Элементы, составляющие кластер, могут взаимодействовать посредством ковалентных и нековалентных, ионных, металлических, ван-дер-ваальсовых или водородных связей. При этом состав различных кластеров варьируется от единиц до десятков и сотен тысяч атомов. В качестве центров (узлов) многоцентрового нанокластера могут рассматриваться одноцентровые молекулярные нанокластеры или наночастицы типа “ядро–оболочка”

при соединении их своими оболочками непосредственно или с помощью молекул-линкеров. Следовательно, многоцентровый нанокластер представляет собой сверхкластер [4], так что каждый его центр имеет своё ядро (атом металла, атомарный кластер, квантовую точку) и лигандную оболочку. Потенциальный профиль такого сверхкластера представляет собой набор квантовых ям, разделённых барьерами, и может иметь разнообразные геометрические конфигурации центров (линейные, планарные или объёмные).

Разнообразие кластерных систем по составу, структуре и способам их получения показывает их высокий потенциал для приложений в разных областях науки и техники. Интерес к использованию таких систем как структурных и функциональных элементов нанокластерных материалов и электронных устройств возрастает благодаря их уникальным свойствам. В общем, нанокластеры и наночастицы типа “ядро-оболочка” находят своё применение в разнообразных прикладных приложениях как структурные и функциональные единицы новых материалов, оптических и электронных приборов. В качестве транспортных агентов, имеющих биологически активные оболочки, а также управляемых магнитными и электрическими полями активных агентов, покрытых защитной оболочкой или содержащихся внутри наноконтейнеров (природных и искусственных), они оказались в настоящее время высоко востребованными в медицинских и микробиологических приложениях. Согласно [4], интенсивно ведутся разработки новых форм лекарственных препаратов с использованием магнито- и электроактивных нанокластеров и наночастиц, инкапсулированных в липосомы разного рода, а в системах медицинской диагностики успешно применяются наносенсоры – флуоресцирующие метки из наночастиц или нанокластеров. Таким образом, повсеместное использование нанокластеров способствует переходу от традиционной электроники к наноэлектронике, и её составной части – одноэлектронике, где ключевыми становятся поверхностные, квантово-размерные и коллективные эффекты. В этой области наночастицы типа “ядро-оболочка”, включая и молекулярные нанокластеры, имеющие металлическое ядро, оказались крайне актуальными и широко применяются как функциональные элементы транзисторов, работающих в одноэлектронном режиме пропускания тока.

Теоретическое моделирование одноэлектронных транзисторов (ОЭТ) берёт своё начало с основополагающей работы 1986 года [6] и

продолжает успешно развиваться. В общем случае, учёт разнообразных физических и химических эффектов, структурных факторов, нелинейных и коллективных взаимодействий, специфики электронного спектра обеспечивает более детальное теоретическое и экспериментальное описание свойств и особенностей функционирования ОЭТ [7–14]. Первая экспериментальная реализация ОЭТ на базе молекулярного нанокластера была выполнена в [12], где он был встроен в качестве центрального островка, туннельно-связанного через узкие барьеры с электродами – истоком и стоком. При этом туннельный ток через центральный островок управлялся потенциалом затвора благодаря емкостной связи, осуществлённой через широкий барьер, что препятствовало туннелированию электрона между центральным островком и затвором. Существенно, что использование молекулярных нанокластеров в ОЭТ обеспечивает стабильный режим их работы при комнатной температуре [12, 13] в соответствии с теорией [6].

Важно подчеркнуть, что применение одноцентровых молекулярных нанокластеров, как и сверхкластеров (многоцентровых нанокластеров), в качестве центрального островка ОЭТ обеспечивает существенное продвижение в решении одной из главных задач современной микро- и наноэлектроники: создание электронных элементов и устройств со сверхнизким энергопотреблением при максимально высоком уровне их интеграции. Для реализации этой цели ОЭТ являются чрезвычайно перспективными, поскольку востребованы как базовые элементы систем управления и электронных устройств, выполняющих экстремально точные измерения, и при построении микропроцессоров и памяти. Одноэлектронные транзисторы используются в сверхчувствительных электрометрах, эталонах постоянного тока и температуры, датчиках инфракрасного и оптического излучения, а также как элементы в логических схемах состояний заряда и напряжения и программируемых логических ячейках [7, 14].

Построение математических моделей объектов и систем управления является основной задачей теории управления. Математические модели позволяют выполнять анализ исследуемой системы или процесса на основе аналитических решений, выполняя численное моделирование или реализуя компьютерные имитации. Динамические модели объектов и систем управления строятся для объяснения и предсказания их поведения – изменений во времени состояний системы и наблюдаемых

выходных переменных, вызванных различными внешними полями, воздействиями среды и с учётом её внутренних параметров и процессов. Цель любого управления – изменять и/или контролировать состояние объекта определённым образом (в соответствии с заданием). При моделировании объекта возникает задача идентификации – настройки (или модификации) параметров модели с целью достижения наибольшего сходства между данными на её входе и на выходе объекта при одинаковых входных данных. Для любого объекта (системы) можно построить множество различных моделей, которые в разной степени будут учитывать вклад тех или иных факторов. Оптимальным подходом является построение достаточно простой модели системы как объекта управления, или же регулятора, с последующей её модификацией (параметризацией) путём ввода дополнительных параметров и связей, опираясь на экспериментально получаемые данные.

В данной работе внешнее электрическое поле рассматривается как фактор, который контролирует и регулирует динамику электронной локализации в нанокластерах. Дополнительно здесь учитываются: сильная локализация электрона на кластерных центрах (в их потенциальных ямах), туннелирование обобществлённого электрона через потенциальные барьеры между центрами и взаимодействие электрона с локальными колебаниями лигандных оболочек центров, которые имеют определённую геометрическую конфигурацию. Все эти факторы включены в гамильтониан, для которого используется узельное представление. Таким образом, многоцентровый нанокластер типа “ядро–оболочка” моделируется как система с определёнными факторами, которые учитываются через модельные параметры. Цель исследования – не только выявить характерные режимы электронной локализации и условия переключения между ними, но и сравнить их особенности в пентамерах и тримерах и показать не только подобие найденных режимов в нанокластерах с разным числом центров, но и возможность их совпадения при соответствующем подборе значений модельных параметров.

ОПИСАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Рассматриваемая здесь модель описывает нелинейную динамику обобществлённого электрона в трех- и пятицентровом нанокластере (тримере и пентамере) типа “ядро–оболочка” с учётом конфигурации его узлов (центров). В общем случае, свойства многоцентрового нанокластера зависят как от числа его центров, так и от их геометрической

конфигурации. Как было продемонстрировано в работах [5, 15, 16], данная модель пригодна к описанию многоцентровых нанокластеров разных геометрических конфигураций. Модель учитывает влияние внешнего периодического электрического поля на процессы локализации и делокализации электрона, при этом рассматривается случай низкочастотного электрического поля. Также модель, наряду со слабой туннельной связью между центрами нанокластера, включает электрон-колебательное взаимодействие с локальными колебательными модами лигандных оболочек центров, приводя в итоге к нелинейной электронной динамике.

В данной модели многоцентрового нанокластера считается, что он состоит из N центров, имеющих ядро и лигандную оболочку. В результате тример (или пентамер) представляет собой кластер с тремя (или пятью) составными центрами, которые содержат по одному ядру с симметрично окружающими его лигандами. Следовательно, каждый такой составной центр можно считать сферически симметричным и, согласно общепринятой модели “желе” [3, 5, 15, 16], соответствующая ему потенциальная яма не имеет особенностей. В итоге многоцентровый нанокластер будет иметь потенциальный профиль из N эквивалентных потенциальных ям и барьеров между ними: для тримера – $N = 3$, а для пентамера – $N = 5$.

Считаем также, что для нанокластера выполнено условие электронейтральности. При этом обобществлённый электрон туннелирует через барьеры, формируемые лигандными оболочками соседних центров, и меняет зарядовые состояния центров. В результате чего происходит изменение дипольного момента нанокластера, поскольку остальная система положительных и отрицательных зарядов ядер и окружающих их лигандов в нанокластере характеризуется эффективным положительным зарядом $+e$, расположенным в его центре симметрии.

Другой существенной особенностью предложенной модели является то, что она учитывает только такие колебания лигандных оболочек узлов нанокластера, при которых его геометрическая конфигурация не искажается. Внутрикластерные локальные колебания такого типа реализуются при синхронных радиальных смещениях лигандных оболочек (сжатие–растяжение) относительно ядер кластерных узлов, при этом узлы остаются неподвижными.

Последовательный теоретический подход с детальным описанием модельного гамильтониана представлен в [5, 15, 16]. В нём электронная подсистема описывается квантово-

механически, а колебательная подсистема и внешнее электрическое поле – классически. Далее приведено краткое описание модельных параметров, а затем представлена результирующая модельная система дифференциальных уравнений, на базе которой выполняется численное моделирование для тримера и пентамера. Переменное электрическое поле, как внешний фактор модели, характеризуется двумя параметрами: амплитудой напряжённости \vec{E} и частотой Ω . Внутренними факторами модели являются: локализованные электронные состояния на центрах пентамера (тримера) (параметр ε_m , где индекс m нумерует центры), туннелирование между центрами пентамера (тримера) (параметр V_{mn}), колебательные моды лигандного окружения на каждом из центров пентамера (параметры q_m и ω_m), электрон-колебательное взаимодействие (параметр g_m).

Отметим также, что для получения модельной системы дифференциальных уравнений волновая функция $\Psi(t)$ обобществлённого электрона в пентамере была взята в виде суперпозиции локализованных на узлах нанокластера волновых функций ψ_m (типа Ванье) [5, 10, 15–18]. Дополнительно для исключения из рассмотрения локальных колебательных степеней свободы была выполнена подстановка $q_m = -\left(g_m / \omega_m^2\right) |c_m|^2$, основанная на использовании приближения $\ddot{q}_m \ll \omega_m^2 q_m$ в уравнении для локальной колебательной моды на m -м узле. Данное приближение соответствует применению метода медленно меняющихся амплитуд для колебаний лигандного окружения на кластерных узлах. Этот метод является базовым при рассмотрении сложных колебательных систем [19] и широко используется при теоретическом исследовании кластерных систем, например для димеров и многоцентровых линейных цепочек [17, 18].

Для упрощения модели и численных расчётов считается, что узлы нанокластера имеют эквивалентные ядра и одинаковые лигандные оболочки. Это приводит к следующим допущениям: энергетические уровни электрона на кластерных узлах эквивалентны ($\varepsilon_m = \varepsilon$ и начало отсчёта энергии выбираем от уровня ε), а локальные колебательные моды лигандных оболочек узлов имеют одинаковые частоты $\omega_m = \omega_0$ и одинаковые константы электрон-колебательного взаимодействия на m -м узле $g_m = g_0$. При численном моделировании используются безразмерные величины для времени, частот и энергий, так что частоты выражаются в единицах ω_0 , время – в единицах $1/\omega_0$, а энергии – в

единицах $\hbar\omega_0$, и введено обозначение: $g_m^2 / \omega_m^2 = g$.

В итоге модельная система уравнений ($m = 1 \div N$) для описания электронной подсистемы нанокластера, имеющего N центров, принимает вид:

$$i \frac{dc_m}{dt} = \sum_{n=1}^N V_{mn} c_n - g |c_m|^2 c_m + e \vec{E} \vec{r}_m \cos(\Omega t) c_m. \quad (1)$$

Приближение по методу медленно меняющихся амплитуд, ключевое при получении модельной системы (1), не нарушает унитарной квантовой эволюции электронной подсистемы нанокластера, которая обеспечивается используемым гамильтонианом [5, 16]. Теоретически нетрудно показать, что модельная система (1) полностью согласуется с условием унитарности, которое выражается в сохранении полной вероятности обнаружения обобществлённого электрона на центрах нанокластера. Практически непосредственной проверкой на основе результатов численного моделирования, представленных ниже графически, подтверждается, что равенство единице суммы электронных населённостей $|c_m|^2$ по всем узлам нанокластера соблюдается в любой момент времени с достаточно высокой степенью точности (отклонения от 1 не превышают 0,53% для пентамера и 1,28% – для тримера). Таким образом, это равенство является хорошим индикатором точности и корректности самой модели, вычислительных процедур и результатов численного моделирования. Отметим также, что дифференциальные уравнения полученной системы (1) содержат нелинейность третьей степени.

В целом учёт нелинейных и коллективных эффектов, присущих нанокластерам, принципиально важен для понимания и описания нелинейных оптических и кинетических свойств композитных материалов, содержащих нанокластеры [17, 18, 20]. Используемый теоретический подход приводит к модельной системе, в которой каждое дифференциальное уравнение по типу является дискретным нелинейным уравнением Шрёдингера, широко использующимся для моделирования различных нанокластерных систем [1, 5, 15–18]. Далее модельная система (1) решается численно для тримера ($N = 3$) и пентамера ($N = 5$), имеющих геометрические конфигурации, схематически изображенные на рис. 1. Также на рис. 1 показано направление вектора \vec{E} . Пространственные положения узлов нанокластера определяются вектором \vec{r}_m , который отсчитывается от его центра симметрии.

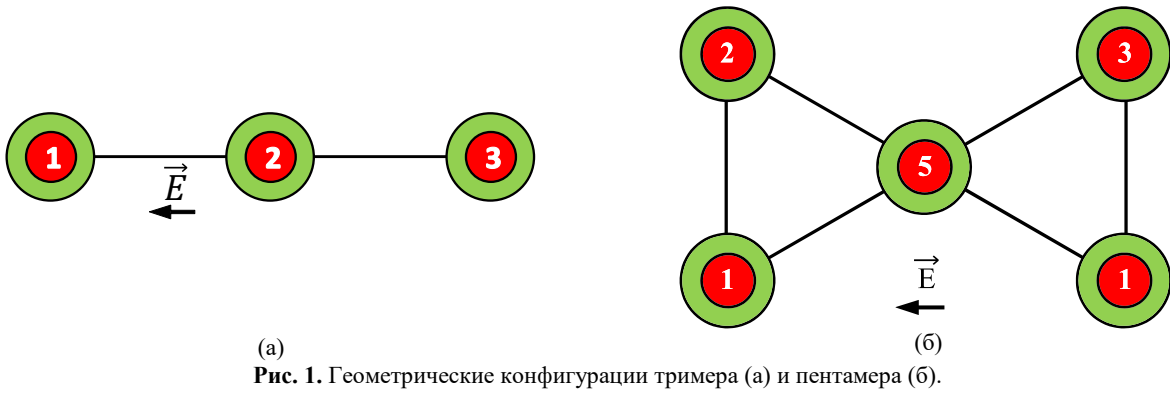


Рис. 1. Геометрические конфигурации тримера (а) и пентамера (б).

ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЁТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На рис. 2–7 представлены результаты численного расчёта системы дифференциальных уравнений (1) для тримеров (рис. 2–4) и пентамеров (рис. 5–7) соответственно. Временные зависимости вероятности обнаружения электрона на центрах пентамера (тримера) рассчитаны при различных значениях модельных параметров и разных начальных состояниях локализации электрона в нанокластере. В выполненных расчётах из всевозможных вариантов межцентрового переноса учитывалась возможность туннелирования только между ближайшими кластерными центрами, дистанция между которыми равна a (см. рис. 1). Параметр d для тримера равен ea , а для пентамера – $d = (\sqrt{3}/2)ea$. Значение параметра туннелирования взято одинаковым, то есть $V_{mn} = v$, и во всех расчётах его численное значение равнялось 0,2. Значения параметра g , характеризующего электрон-колебательное взаимодействие, и параметра dE , связанного с внешним электрическим полем, варьировались, при этом параметр Ω оставался постоянным. Важно подчеркнуть, что с теоретической точки зрения учёт низкочастотного электрического поля соответствует эффективному применению вышеупомянутого метода медленно меняющихся амплитуд. В то же время с точки зрения практического применения композитных материалов, содержащих нанокластеры такого типа, использование низкочастотных электрических полей технологически более приемлемо, чем высокочастотных.

Результаты численного моделирования показывают, что все режимы, представленные на рис. 2–7, являются периодическими и устойчивыми. На рис. 2–4 представлены временные зависимости вероятностей обнаружения электрона на каждом из центров тримера, при этом электрон в каждом из случаев первоначально локализован на первом центре.

Временные зависимости, представленные на рис. 2 и 3, соответствуют реализации режима прозрачности промежуточного центра 2, при этом полное переключение электронной плотности фактически происходит с центра 1 на центр 3 тримера. На рис. 2 временные зависимости имеют синусоидальный вид, тогда как на рис. 3 зависимости имеют ступеньки в виде трапеций. Поскольку локализация электрона на центрах 1 или 3 соответствует ненулевому дипольному моменту тримера, то при обратимых изменениях населённостей этих центров происходит периодическое изменение дипольного момента тримера, что является особенно ценным с точки зрения перспектив использования композитных систем, содержащих такого рода нанокластеры, в нано- и оптоэлектронике. На рис. 4 представлены изменения во времени электронной плотности на центрах тримера, так что промежуточный центр периодически оказывается частично заселённым в пределах 40%.

На рис. 5–7 представлены временные зависимости вероятностей обнаружения электрона на центрах пентамера, имеющего конфигурацию “бабочка”, в которой промежуточным является центр 5. Отметим, что пентамер с такой конфигурацией центров можно также рассматривать как тример, имеющий на противоположных концах димеры, каждый из которых туннельно связан с промежуточным центром двумя связями. В начальный момент времени в пентамере электронная плотность равномерно делокализована между центрами 1 и 2. Это можно интерпретировать как полную локализацию обобществлённого электрона на димере, составленном этими центрами. Случаи, представленные на рис. 5 и 6 (пентамер), по своей сути полностью аналогичные представленным на рис. 2 и 3 (тример), показывают реализацию режима прозрачности промежуточного центра нанокластера. Разница состоит в том, что в пентамере происходит синхронное обратимое

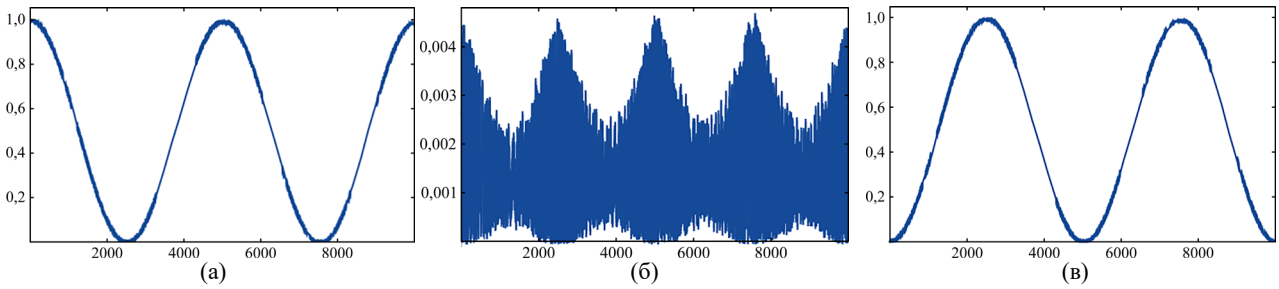


Рис. 2. Временные зависимости вероятности обнаружения электрона на m -м центре тримера (в отн. ед. времени ωt) для $\nu = 0,2$, $g = 12$, $\Omega = 1/800$, $dE = 6$, $c_1(0) = 1$. Соответственно: для $m = 1$ (а); для $m = 2$ (б); для $m = 3$ (в).

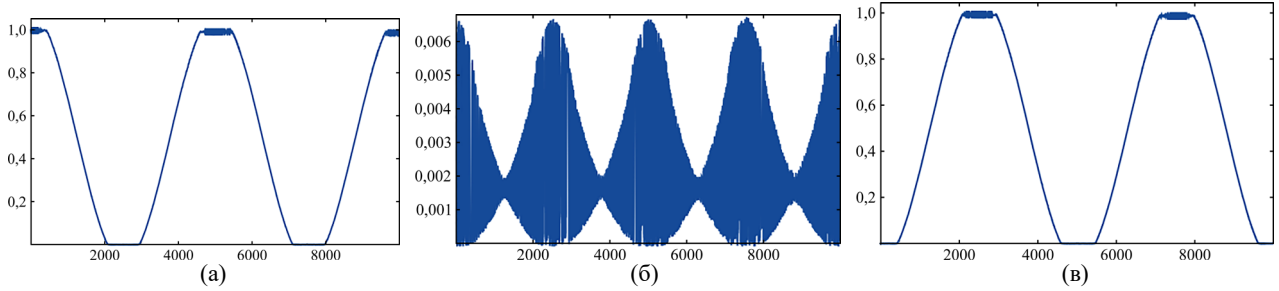


Рис. 3. Временные зависимости вероятности обнаружения электрона на m -м центре тримера (в отн. ед. времени ωt) для $\nu = 0,2$, $g = 12$, $\Omega = 1/800$, $dE = 7$, $c_1(0) = 1$. Соответственно: для $m = 1$ (а); для $m = 2$ (б); для $m = 3$ (в).

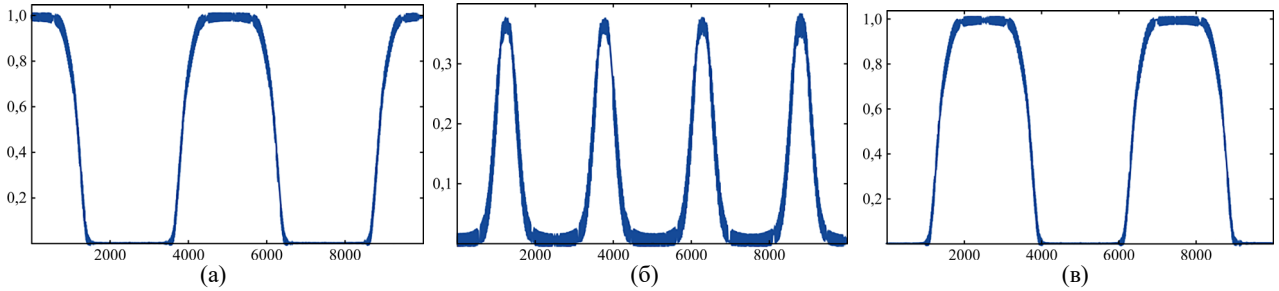


Рис. 4. Временные зависимости вероятности обнаружения электрона на m -м центре тримера (в отн. ед. времени ωt) для $\nu = 0,2$, $g = 3,5$, $\Omega = 1/800$, $dE = 7$, $c_1(0) = 1$. Соответственно: для $m = 1$ (а); для $m = 2$ (б); для $m = 3$ (в).

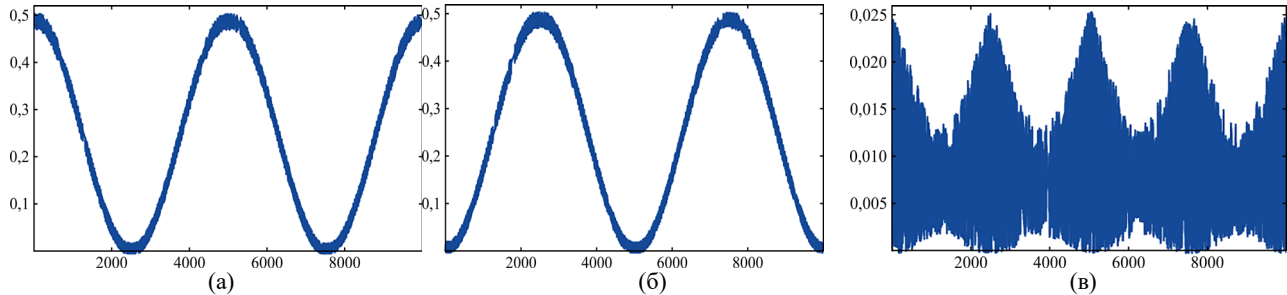


Рис. 5. Временные зависимости вероятности обнаружения электрона на m -м центре пентамера (в отн. ед. времени ωt) для $\nu = 0,2$, $g = 16$, $\Omega = 1/800$, $dE = 4$, $c_1(0) = c_2(0) = 1/\sqrt{2}$. Соответственно: для $m = 1$ и 2 (а); для $m = 3$ и 4 (б); для $m = 5$ (в).

переключение электронной плотности между парами центров 1, 2 и центров 3, 4. Случай, представленный на рис. 7, соответствует периодическому режиму с частичным заселением промежуточного центра 5 в пределах 25%. В целом сравнение форм временной зависимости распределения электронной плотности показывает, что для синусоидальной формы длительность переключения электронной плотности значительно превосходит длительность электронной локализации на кластерных центрах. Для прямоугольной формы отношения указанных длительностей обратно, и длительность электронной локализации больше, чем для трапецевидной формы, для которой обе длитель-

ности сопоставимы. В общем случае параметрами, управляющими динамикой электронной плотности в нанокластере, являются амплитуда напряжённости и частота внешнего электрического поля, при этом существенную роль играет величина отношения параметра dE к параметру электрон-колебательного взаимодействия g .

Следует также подчеркнуть, что сравнение величин $|c_1|^2$ (или $|c_3|^2$) для тримера (рис. 2 и 3) и суммы величин $|c_1|^2 + |c_2|^2$ (или $|c_3|^2 + |c_4|^2$) для пентамера (рис. 5 и 6) показывает их совпадение с высокой степенью точности. Таким образом,

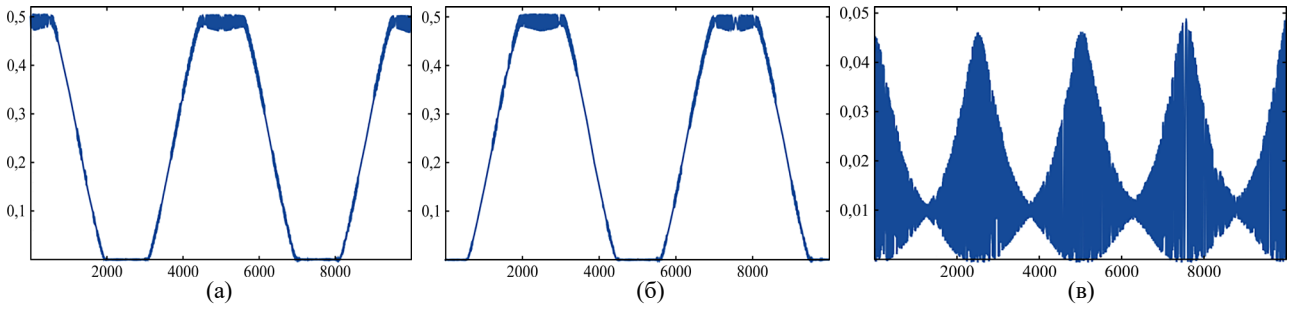


Рис. 6. Временные зависимости вероятности обнаружения электрона на m -м центре пентамера (в отн. ед. времени ωt) для $\nu = 0,2$, $g = 21$, $\Omega = 1/800$, $dE = 7$, $c_1(0) = c_2(0) = 1/\sqrt{2}$. Соответственно: для $m = 1$ и 2 (а); для $m = 3$ и 4 (б); для $m = 5$ (в).

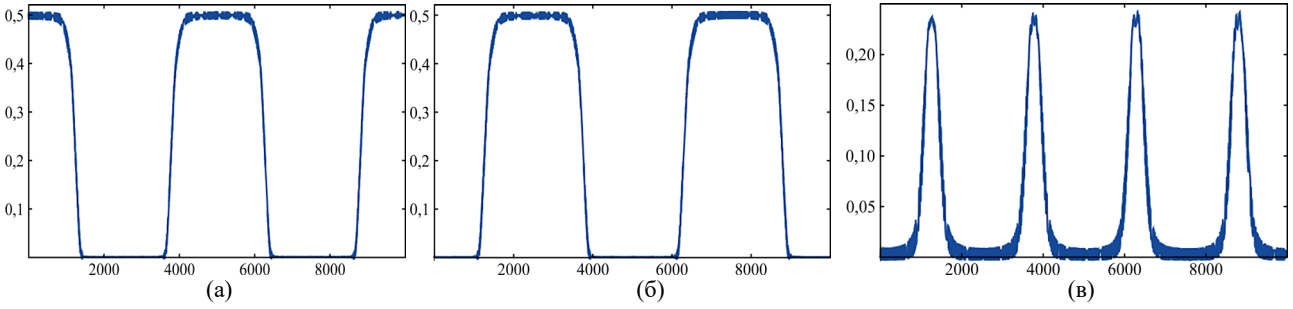


Рис. 7. Временные зависимости вероятности обнаружения электрона на m -м центре пентамера (в отн. ед. времени ωt) для $\nu = 0,2$, $g = 7$, $\Omega = 1/800$, $dE = 10,5$, $c_1(0) = c_2(0) = 1/\sqrt{2}$. Соответственно: для $m = 1$ и 2 (а); для $m = 3$ и 4 (б); для $m = 5$ (в).

результаты, полученные для динамики электронной локализации в тримере и пентамере, демонстрируют возможность реализации практически одинаковых режимов периодического переключения нанокластера между состояниями с противоположными направлениями дипольного момента.

ВЫВОДЫ

Описание динамики электронной локализации в тримерных (конфигурация линейная) и пентамерных (конфигурация “бабочка”) нанокластерах дано модельной системой дифференциальных уравнений относительно временных зависимостей амплитуд вероятности локализации электрона на каждом из кластерных центров. Численные расчёты для этих двух конфигураций выполнены при условии $g \gg \nu$. При этом сильное электрон-колебательное взаимодействие, соответствующее высоким значениям параметра g , является важным фактором, способствующим установлению и удержанию локализации электрона на центрах нанокластера. Анализ результатов численного моделирования показал, что в тримере, как и в пентамере, при вариации параметров внешнего электрического поля и параметра g могут быть реализованы характерные режимы в динамике локализации обобществлённого электрона:

– периодический режим переключения электронной плотности между центрами нанокластера с частичным заселением промежуточного центра, имеющий ступенчатую

(близкую к прямоугольной) форму временной зависимости;

– периодический режим переключения электронной плотности с эффектом прозрачности промежуточного центра, имеющий ступенчатую (в виде трапеций) или синусоидальную форму временной зависимости.

Отметим, что аналогичные режимы были получены и для тетрамеров [15]. Важно также отметить, что помимо представленных здесь режимов электронной локализации, существует ещё и режим запирания электрона на центре 1 для тримера или на центрах 1 и 2 для пентамера. Аналогичный режим, при соответствующем подборе модельных параметров, был найден для пентамера, имеющего другие конфигурации (плоско-квадратную и линейную [5], пирамидальную [16]), а также для линейного и циклического тетрамера [15].

Важным следствием из полученных результатов является то, что выбор определённых значений модельных параметров обеспечивает совпадение режимов переключения дипольного момента для тримерных и пентамерных нанокластеров не только качественно, но и количественно. Тем самым тримеры и пентамеры, имеющие рассмотренные конфигурации, взаимозаменяемы с функциональной точки зрения. В общем, полученные результаты выявляют управляющую роль электрического поля в реализации разных режимов электронной локализации и делокализации. Показано, что частота и амплитуда напряжённости электрического поля определяют форму временной зависимости распределения электронной плот-

ности, длительность электронной локализации на кластерных центрах и длительность переключения нанокластера между состояниями с различной локализацией электрона.

В заключение отметим, что поскольку динамику электронной локализации в многоцентровом нанокластере можно задавать в разных режимах и изменять режим, варьируя амплитуду напряжённости и частоту электрического поля, то тем самым можно эффективно управлять распределением электронной плотности в нанокластере и его дипольным моментом, изменяя его по направлению и величине. Такого рода изменения, индуцируемые электрическим полем, на практике будут приводить к изменениям оптических и электронных свойств матрицы (подложки, плёнки), в которую внедрены исследуемые нанокластеры. Это, соответственно, обеспечивает возможность управления физическими характеристиками наноструктурированных материалов (например, поглощением, пропусканием или проводимостью), что перспективно для микро- и оптоэлектронных приложений.

Следует также подчеркнуть, что система дифференциальных уравнений (1) позволяет моделировать динамику электронной локализации не только в многоцентровых нанокластерах с эквивалентными центрами, при разных геометрических конфигурациях и при произвольном числе центров нанокластеров. Как инструмент моделирования полученная модельная система обладает гибкостью и легко модифицируется для описания нанокластеров с неэквивалентными составными центрами типа “ядро–оболочка” путём введения дополнительных модельных параметров, соответствующих разным значениям: ε_m , V_{mn} – для электронной подсистемы, и q_m , ω_m , g_m – для колебательной подсистемы. Более того, она естественным образом обобщается на случай нескольких электрических полей с разными частотами и разными по величине и направлению амплитудами напряжённости.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Данное исследование финансировалось Министерством образования и исследований Республики Молдова (подпрограмма 011201).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Лахно, В.Д., *Кластеры в физике, химии, биологии*. Ижевск: НИЦ “РХД”, 2001. 253 с.
2. Губин, С.П., *Химия кластеров. Основы классификации и строение*. М.: Наука, 1987. 263 с.
3. Суздальев, И.П., *Нанотехнология: физикохимия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов*. М.: URSS, 2009. 592 с.
4. Елисеев, А.А., Лукашин, А.В., *Функциональные наноматериалы*. М.: Физматлит, 2010. 456 с.
5. Yaltychenko, O.V., and Kanarovskii, E.Yu., Control of electron localization in pentamer nanoclusters of various configurations in an external electric field, *Surf. Eng. Appl. Electrochem.*, 2025, vol. 61, no. 6, p. 942.
<https://doi.org/10.3103/S1068375525701029>
6. Averin, D.V., and Likharev, K.K., Coulomb blockade of single-electron tunneling, and coherent oscillations in small tunnel junctions, *Journal of Low Temperature Physics*, 1986, vol. 62, no. 3–4, p. 345.
<https://doi.org/10.1007/BF00683469>
7. Солдатов, Е.С., Колесов, В.В., Одноэлектроника: прошлое, настоящее, будущее, *Радиоэлектроника. Наносистемы. Информационные технологии*, 2012, т. 4, № 2, с. 71.
<https://www.elibrary.ru/item.asp?id=18436975>
8. Gaydamachenko, V.R., Beloglazkina, E.K., Petrov, R.A., Dagesyan, S.A., et al., A Coulomb blockade in a nanostructure based on single intramolecular charge center, *Moscow Univ. Phys.*, 2018, vol. 73, no. 2, p. 193.
<https://doi.org/10.3103/S0027134918020066>
9. Dagesyan, S.A., Shorokhov, V.V., Presnov, D.E., Soldatov, E.S., et al., Single-electron transistor with an island formed by several dopant phosphorus atoms, *Moscow Univ. Phys.*, 2017, vol. 72, no. 5, p. 474.
<https://doi.org/10.3103/S0027134917050058>
10. Shorokhov, V.V., A method of dopant electron energy spectrum parameterization for calculation of single-electron nanodevices, *Moscow Univ. Phys.*, 2017, vol. 72, no. 3, p. 279.
<https://doi.org/10.3103/S0027134917030110>
11. Abramov, I.I., Ignatenko, S.A., and Novik, E.G., Characteristics of multiple-island single-electron chains in relation to various factors, *Semiconductors*, 2003, vol. 37, no. 10, p. 1201.
<https://doi.org/10.1134/1.1619517>
12. Soldatov, E.S., Khanin, V.V., Trifonov, A.S., Presnov D.E., et al., Single-electron transistor based on a single cluster molecule at room temperature, *JETP Lett.*, 1996, vol. 64, no. 7, p. 556.
<https://doi.org/10.1134/1.567234>
13. Gubin, S.P., Gulayev, Yu.V., Khomutov, G.B., Kislov, V.V., et al., Molecular clusters as building blocks for nanoelectronics: the first demonstration of a cluster single-electron tunnelling transistor at room temperature, *Nanotechnology*, 2002, vol. 13, no. 2, p. 185.
<https://doi.org/10.1088/0957-4484/13/2/311>
14. Kumar, O., and Kaur, M., Single electron transistor: applications & problems, *International Journal of*

VLSI Design & Communication Systems, 2010, vol. 1, no. 4, p. 24.

<https://doi.org/10.5121/vlsic.2010.1403>

15. Yaltychenko, O.V., and Kanarovskii, E.Yu., Nonlinear dynamics of electron localization in four-center linear and cyclic type clusters in an external electric field, *Surf. Eng. Appl. Electrochem.*, 2017, vol. 53, no. 3, p. 250.
<https://doi.org/10.3103/S1068375517030152>
16. Yaltychenko, O.V., and Kanarovskii, E.Yu., Electric field-controlled dynamics of electron localization in pentamer nanoclusters, In: Sontea, V., Tiginyanu, I., Railean, S. (eds) 7th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering. ICNBME-2025. Cham.: Springer, *IFMBE Proceedings*, 2025, vol. 134, p. 64.
https://doi.org/10.1007/978-3-032-06494-3_8
17. Kenkre, V.M., An ecumenical nonlinear von Neumann equation: fluctuations, dissipation, and bifurcations, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 1993, vol. 68, no. 1, p. 153.
[https://doi.org/10.1016/0167-2789\(93\)90040-8](https://doi.org/10.1016/0167-2789(93)90040-8)
18. Tsironis, G.P., Kenkre, V.M., and Finley, D., Effects of dissipation on nonlinearity in transport: Evolution and integrability properties in a molecular dimer, *Phys. Rev. A*, 1988, vol. 37, no. 11, p. 4474.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.37.4474>
19. Заславский, Г.М., Мейтлис, В.П., Филоненко, Н.Н., *Взаимодействие волн в неоднородных средах*. Новосибирск: Наука, 1982. 177 с.
20. Calvayrac, F., Reinhard, P.-G., Suraud, E., Ullrich, C.A., Nonlinear electron dynamics in metal clusters, *Phys. Rep.*, 2000, vol. 337, no. 6, p. 493.
[https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(00\)00043-0](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(00)00043-0)

Summary

The localization dynamics of a shared electron in a nanocluster with a different number of centers in an external low-frequency electric field is described. The time dependences of the probability amplitudes for finding an electron at different cluster centers were obtained as numerical solutions to a model system of differential equations for various values of the model parameters. The proposed model system is applied to pentamers and trimers and allows for various geometric configurations of nanoclusters to be taken into account. In constructing a theoretical model, the nanocluster centers were assumed to be weakly tunnel-coupled, while the electron-vibrational coupling of the shared electron with the ligand environment at each cluster center was considered to be significant. Tunneling was taken into account only between the nearest neighboring cluster centers, each of which had a core and a ligand shell, and such composite centers were assumed to be equivalent. As a result of numerical modeling for the trimer and pentamer, it was shown that an external electric field acts as a control factor, since variations in its frequency and strength amplitude lead to the implementation of various regimes of electron localization in nanoclusters. In general, the electron density distribution regimes in the trimer and pentamer are characterized by the shape of their time dependence, the duration of localization at cluster centers, and the duration of intercenter switching of electron localization. Variations in the electric field parameters provide adjustment and control of those characteristics. A comparative analysis of the obtained results shows that in a five-center nanocluster, which can also be considered to be a trimer with dimerized ends, and a three-center nanocluster, the dynamics of the electron density distribution is practically identical.

Keywords: multicenter nanocluster, trimer, pentamer, ligand shell, low-frequency electric field, electron-vibrational interaction, electron localization