

Управление локализацией электрона в пентамерных нанокластерах различных конфигураций во внешнем электрическом поле

О. В. Ялтыченко*, Е. Ю. Канаровский**

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

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

Поступила в редакцию 08.04.2025

После доработки 22.05.2025

Принята к публикации 29.05.2025

Предложена минимальная теоретическая модель для описания динамики локализации обобществлённого электрона в пентамерном нанокластере во внешнем низкочастотном электрическом поле с учётом электрон-колебательного взаимодействия. На её основе получена система дифференциальных уравнений относительно временных зависимостей амплитуд вероятности нахождения электрона на различных центрах пентамера. Эта модель применяется для описания пентамеров линейной и плоско-квадратной конфигураций. Для этих двух типов геометрической конфигурации пентамеров проведены численные расчёты при различных значениях модельных параметров. Предложенная модель характеризуется тем, что центры нанокластера рассматриваются как слабо туннельно-связанные, причем существенную роль играет электрон-колебательная связь с лигандным окружением на каждом из его центров. При этом туннелирование учитывается только между ближайшими центрами нанокластера, а сами центры, рассматриваемые совместно с их лигандным окружением, считаются эквивалентными. Выявлена управляющая роль внешнего электрического поля, которая состоит в том, что вариации его частоты и амплитуды напряжённости позволяют реализовать различные режимы электронной локализации в пентамерном нанокластере и регулировать присущие им характеристики. Полученные режимы распределения электронной плотности в нанокластере характеризуются формой временной зависимости, длительностью полной локализации электрона на кластерных центрах и скоростью межцентрового переключения локализации электрона.

Ключевые слова: пентамерный нанокластер, лигандное окружение, электрон-колебательное взаимодействие, низкочастотное электрическое поле, локализация электрона

УДК 538.9+539.1.01+539.189

<https://doi.org/10.52577/eom.2025.61.3.52>

ВВЕДЕНИЕ

В химии [1, 2], физике [3, 4] и биологии [4, 5] кластеры различных видов являются предметом многочисленных исследований на протяжении ряда десятилетий. Кластер – это совокупность взаимодействующих однородных элементов, которая обладает определёнными свойствами и функционирует как самостоятельная единица. Составляющие элементы в кластерах могут взаимодействовать посредством ковалентных, ионных, металлических, ван-дер-ваальсовых или водородных связей, а количество атомов в различных кластерах варьируется от единиц до десятков и сотен тысяч. В более широком смысле кластер, как понятие удобное для классификации и моделирования, в настоящее время стало повсеместно использоваться и в других научных дисциплинах, а также в технических, производственных и технологических сферах деятельности.

Исследования свойств кластеров и процессов с их участием в химии, физике и биологии охватывают широчайший диапазон металлических и неметаллических кластерных систем. Это понятие объединяет такие кластеры, как: атомарные и молекулярные, газовые безлигандные, коллоидные, матричные и твердотельные, которые образуются как в объёме конденсированных и наноструктурированных сред, так и на поверхностях и границах раздела разных сред. Известна ещё одна форма уникальных кластеров, которые называют сверхкластерами, в которых составными единицами являются наночастицы или другие кластеры. Сверхкластеры могут рассматриваться в качестве структурных блоков в наноструктурированных материалах, иллюстрацией чего является пространственно упорядоченный массив сверхкластеров, образованных наночастицами PbSe размером 2 нм в оболочке олеиновой кислоты [4]. Важно отметить, что лигандные оболочки,

формируемые вокруг нанокластеров или наночастиц, играют важную роль для их стабилизации.

Для получения кластерных систем используются газофазные, жидкофазные и твердофазные методы. При формировании наноструктур, наночастиц и нанокластеров этими методами определяющую роль играет управление процессами испарения, конденсации, адсорбции и нуклеации, а также возможность регулирования поверхностного натяжения.

В жидкофазных и твердофазных методах использование коллоидных и твердофазных нанореакторов открывает широкие возможности для дизайна нанокомпозитов с заданными физико-химическими свойствами и получения практически всех видов однокомпонентных и многокомпонентных наноструктур [4]. Использование коллоидных нанореакторов позволяет сформировать нанокластеры и наночастицы различной формы, анизотропии и с разными покрытиями. Коллоидные нанореакторы формируются в результате нековалентных (лиофильных/лиофобных, гидрофильных/гидрофобных, ван-дер-ваальсовых, электростатических) взаимодействий органических молекул между собой. В качестве коллоидных нанореакторов для получения нанофазы наиболее часто используют обращенные мицеллы, жидкие кристаллы, адсорбционные слои, пленки Ленгмюра-Блоджетт, микроэмульсии, а также биомолекулы (белки, ДНК, РНК и др.). В твердофазных нанореакторах направленный рост нанокластеров и наночастиц происходит под влиянием внешнего пространственного ограничения, создаваемого стенками нанопор или же заданным рельефом поверхности подложки, который можно сформировать методом нанолитографии [4].

Важно отметить, что в качестве шаблона, задающего геометрию планарных нанокластеров, используют различные твердотельные подложки, а для получения линейных нанокластеров (цепочек из наночастиц) роль шаблона выполняют поры матриц разного типа: на основе мезопористого диоксида кремния, пористого оксида алюминия, углеродных и неуглеродных нанотрубок, полимерных молекул, цепей ДНК и РНК. При этом если матричные поры достаточно крупные, то в них могут быть сформированы и планарные кластеры, состоящие из малого числа наночастиц. Двумерные молекулярные наноструктуры, состоящие из нанокластеров, стабилизированных лигандами, могут быть сформированы также синтезом в пленках Ленгмюра-Блоджетт и в адсорбционных слоях.

Примеры такого рода кластеров даны в работах [6] – формирование линейных кластеров из наночастиц золота в «свободном пространстве» между соседними молекулами ДНК и [7] – формирование твердофазного смачивающего слоя металла (адсорбата) на поверхности монокристаллического кремния (подложка) в виде двумерного слоя нанокластеров. Здесь также интересно отметить, что равновесная геометрия при адсорбции плоского кластера Pb_n на поверхности Al (001) с увеличением его размера приобретает куполообразную форму, то есть более выгодно формирование кластера островкового типа, как показывает теоретическое моделирование динамической стабильности системы $Pb_n/Al(100)$ [8].

Метод конденсации из газовой фазы на современном этапе развивается в сочетании с методами лазерного или плазменного испарения и продолжает широко использоваться как для синтеза кластеров металлов и неметаллов, так и для получения нанопорошков, нанопленок, нанотрубок и других полых фигур различной формы. Отметим также, что для сборки кластеров из наночастиц перспективной является зондовая нанотехнология [9].

В общем, нанокластеры находят своё применение в разнообразных прикладных приложениях как структурные и функциональные единицы новых материалов, оптических и электронных приборов. Большие перспективы открываются для применения наночастиц и нанокластеров в медицинских и микробиологических приложениях для лечения и диагностики заболеваний: в роли транспортных агентов, покрытых биологически активной оболочкой, или управляемых магнитными и электрическими полями активных агентов, покрытых защитной оболочкой, или содержащихся внутри природных или искусственных наноконтейнеров. В качестве наноконтейнеров, в дополнение к природным фосфолипидным везикулам (липосомам), могут быть использованы нанокapsулы, искусственно-синтезированные из полимеров липидов или молекул РНК, а также неорганические капсулы из диоксида кремния, диоксида титана и многие другие. Кроме того, активно ведутся исследования по созданию электронных нанопереклюателей на основе заключенных в наноконтейнеры металлических и полупроводниковых кластеров. Как отмечено в [4], свое применение в системах медицинской диагностики уже нашли наносенсоры – флуоресцирующие метки из наночастиц или нанокластеров, а на основе магнито- и электроактивных нанокластеров и наночастиц, инкапсулированных в липосомы разного рода,

интенсивно ведутся разработки новых форм лекарственных препаратов. Например, недавние исследования [10] показывают, что биосовместимые магнитные нанокластеры с повышенной эффективностью нагрева, используемые в методе магнитной гипертермии, значительно подавляют рост злокачественных клеток.

Среди кластеров простых веществ особое место занимают металлические кластеры [11–13]. Физические характеристики многоатомных металлических кластеров, имеющих один остов (то есть одноцентровых), существенно зависят от сорта и от числа атомов, составляющих остов кластера. Так, например, для свободных (то есть без оболочки) кластеров Ni_n ($n \leq 20$) обнаружена немонотонная зависимость от их размеров параметра стабильности, энергии диссоциации и минимальной частоты колебаний с экстремальными значениями для $n = 4, 6, 13, 19$ – эти числа называются «магическими» [14].

Многочисленные теоретические и экспериментальные исследования металлических кластеров (МК) [3, 11–13, 15–18] берут своё начало с открытия оболочечной электронной структуры у кластеров щелочных и редкоземельных металлов [15, 16], которая подобна оболочечной структуре атомов и атомных ядер. В большинстве современных теоретических подходов используется модель желе как основа разного рода оболочечных моделей [3, 15–18] для расчёта электронной структуры различных МК и моделирования реакции кластеров на действие внешних полей. Будучи простой и удобной в расчётах, модель желе основана на естественном предположении о сферически симметричной потенциальной яме, формируемой равномерно распределённым положительным зарядом ионного остова (системы ионов с заполненными внутренними электронными оболочками), в которой находятся обобществлённые электроны. При этом важно, что в начале системы координат, связанной с ионным остовом, отсутствует сингулярность, то есть при $r = 0$ потенциал не обращается в бесконечность.

В настоящей работе предложена модель, описывающая нелинейную динамику обобществлённого электрона в пяти-центровом нанокластере (пентамере), имеющем дискретное распределение положительного заряда на его центрах с учётом его конфигурации, которая является либо линейной, либо плоскоквадратной. В общем случае, свойства многоцентрового нанокластера зависят как от числа его центров, так и от их геометрической конфигурации. Целью этой работы является построение модели, которая пригодна к

описанию многоцентровых нанокластеров и способна учитывать особенности геометрической конфигурации их центров. В связи с этим в рамках излагаемого здесь подхода модель желе используется иначе, чем обычно, давая качественное обоснование потенциального профиля многоцентрового нанокластера, что принимается во внимание при построении его модельного гамильтониана. Модель, помимо туннелирования электрона между центрами, учитывает влияние внешнего периодического электрического поля на процессы локализации и делокализации электрона, при этом рассматривается случай низкочастотного электрического поля. В модель также включено взаимодействие электрона с колебательными модами лигандного окружения на каждом из центров нанокластера, что приводит в итоге к нелинейной электронной динамике.

Для практического применения и теоретического моделирования кластерных систем актуален также учёт влияния нелинейных и коллективных эффектов на их свойства и процессы с их участием [16–19]. Коллективные эффекты в многоатомных МК, как следует из экспериментальных и теоретических результатов, модифицируют электронную структуру кластера из-за сильного взаимодействия обобществлённых электронов, оказывают влияние на геометрическую структуру его остова, а также проявляют себя в нелинейном отклике на внешнее воздействие. Например, в оптимизированной модели желе [17, 18], описываемой системой нелинейных интегродифференциальных уравнений, нелинейность появляется из-за учёта характера взаимодействия электронной и ионной подсистем кластера или связана с коллективными эффектами в одной из них. В нашей модели нелинейность явно появляется в уравнениях, описывающих электронную подсистему, при исключении из них внутрикластерных колебательных мод лигандного окружения на центрах пентамера с использованием уравнения для его колебательной подсистемы.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ПОДХОД И ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Далее переходим к изложению особенностей модели металлического кластера, который имеет ионный остов, состоящий из пяти центров. При этом центры МК, каждый из которых рассматривается совместно с его лигандной оболочкой, считаются эквивалентными как по ионному составу, так и по их локальному лигандному окружению. В результате пентамер в нашей модели можно рассматривать как кластерный

комплекс с пятью составными центрами, в каждый из которых входит по одному иону металла вместе с окружающими его лигандами. Каждый выделенный таким образом составной центр можно считать сфероидальным и для описания его потенциала применять модель желе. Такой способ её применения является существенной особенностью предлагаемого здесь подхода к моделированию МК. Таким образом, в координатном представлении пентамер будет иметь потенциальный профиль из пяти эквивалентных потенциальных ям и барьеров между ними. При этом обобществлённый электрон туннелирует с центра на центр, проходя барьеры, формируемые лигандными оболочками соседних центров.

В атомарных МК с ионами металлов с переменной степенью окисления обобществлённый электрон туннелирует между ближайшими центрами, меняя степень окисления этих центров на единицу. Соответственно считаем, что центры распределения положительных зарядов ионного остова МК и отрицательных зарядов на лигандах, окружающих центры МК, находятся в его геометрическом центре, создавая эффективный положительный заряд $+e$. При этом вся система зарядов нанокластера, включающая ионный остов МК, лигандное окружение и туннелирующий между центрами МК обобществлённый электрон, в целом считается нейтральной. Важно отметить, что данная модель позволяет также рассматривать и сверхкластеры типа «ядро–оболочка», которые в качестве туннельно-связанных центров нанокластера содержат одноэлектронные квантовые точки с покрытием.

Рассмотрим внешние и внутренние факторы модели. Переменное электрическое поле, как внешний фактор модели, в классическом виде характеризуется двумя параметрами: амплитудой напряжённости \vec{E} и частотой Ω . Внутренними факторами модели являются: локализованные электронные состояния на центрах пентамера (параметр ε_m), туннелирование между центрами пентамера (параметр V_{mn}), колебательные моды лигандного окружения на каждом из центров пентамера (параметры q_m и ω_m), электрон-колебательное взаимодействие (параметр g_m).

В итоге запишем модельный гамильтониан в узельном представлении с учётом указанных внутренних и внешних факторов, что даёт возможность рассматривать пентамерные нанокластеры с дискретным распределением положительного заряда ионного остова в разных геометрических конфигурациях (в частности, линейной и плоско-квадратной):

$$\hat{H} = \sum_{m=1}^5 \varepsilon_m a_m^+ a_m + \sum_{m,n=1}^5 V_{mn} a_m^+ a_n + \sum_{m=1}^5 g_m q_m a_m^+ a_m + \sum_{m=1}^5 e \vec{E} \vec{r}_m \cos(\Omega t) a_m^+ a_m + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^5 (p_m^2 + \omega_m^2 q_m^2) \hat{I}, \quad (1)$$

где: a_m^+ , a_m – операторы рождения и уничтожения электрона на m -м узле кластера; p_m и q_m – импульс и координата локальной внутрикластерной колебательной моды; ε_m – энергия электрона на m -м узле (центре); V_{mn} – константа туннельного переноса с m -го узла на n -й узел; g_m – константа электрон-колебательного взаимодействия на m -м узле кластера; \hat{I} – единичный оператор; $e \vec{E} \vec{r}_m \cos(\Omega t)$ – энергия взаимодействия электрона на m -м узле кластера с внешним периодическим электрическим полем. Вектор \vec{r}_m отсчитывает положение электрона на m -м узле относительно начала координат, которое удобно выбрать в центре симметрии пентамера. Далее делаем некоторые упрощающие расчёт допущения: все узлы считаем энергетически эквивалентными ($\varepsilon_m = \varepsilon$) и начало отсчёта энергии выбираем от уровня ε .

Также считаем, что волновая функция $\Psi(t)$ обобществлённого электрона в пентамере является суперпозицией локализованных на узлах волновых функций ψ_m и, соответственно, имеет вид:

$$\Psi(t) = \sum_{m=1}^5 c_m(t) \psi_m. \quad (2)$$

С учётом сделанных допущений, используя модельный гамильтониан (1), получаем временные уравнения для амплитуд вероятности $c_m(t)$ обнаружения электрона на центрах пентамера:

$$i \frac{dc_m}{dt} = \sum_{n=1}^5 V_{mn} c_n + g_m q_m c_m + e \vec{E} \vec{r}_m \cos(\Omega t) c_m. \quad (3)$$

Уравнение для соответствующей m -й колебательной моды имеет следующий вид:

$$\ddot{q}_m + \omega_m^2 q_m = -g_m |c_m|^2. \quad (4)$$

В приближении $\dot{q}_m \ll \omega_m^2 q_m$ колебательные степени свободы могут быть исключены из рассмотрения. Это соответствует применению метода медленно меняющихся амплитуд для колебаний лигандного окружения на центрах пентамера, который является одним из базовых методов при рассмотрении сложных колебательных систем [20] и широко используется при исследовании кластерных систем, например, для димеров [21, 22] и линейных цепочек [21]. Таким

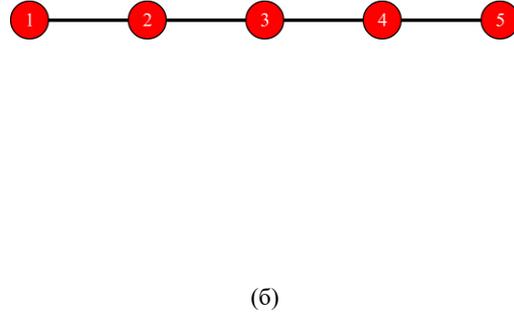
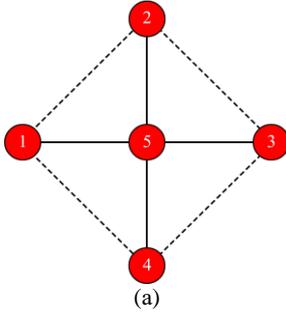


Рис. 1. Плоско-квадратная конфигурация пентамера (а); линейная конфигурация пентамера (б).

образом, из уравнения (4), пренебрегая второй производной от q_m , получаем выражение для координаты m -й колебательной моды и подставляем его в уравнение (3). Далее для колебательной подсистемы считаем, что колебательные моды, созданные лигандным окружением центров, имеют одинаковые частоты $\omega_m = \omega$ и одинаковые константы электрон-колебательного взаимодействия на m -м узле пентамера $g_m = g_0$. При этом удобно ввести обозначение: $g_m^2 / \omega_m^2 = g$. В результате при численном моделировании используются безразмерные величины для времени и частоты, то есть все частоты выражаются в единицах характеристической частоты ω_0 , а время – в единицах $1/\omega_0$. Отметим также, что все слагаемые в выражении (1) представлены в единицах $\hbar\omega_0$. Сделанные допущения вполне оправданы как для линейных, так и для плоско-квадратных пентамерных нанокластеров, имеющих одинаковое лигандное окружение на эквивалентных центрах.

В итоге уравнения для электронной подсистемы пентамера принимают следующий вид:

$$i \frac{dc_m}{dt} = \sum_{n=1}^5 V_{mn} c_n + g |c_m|^2 c_m + e \vec{E} \vec{r}_m \cos(\Omega t) c_m. \quad (5)$$

Полученная система уравнений (5) является нелинейной (нелинейность третьей степени), и она решается численно для пентамеров двух геометрических конфигураций – линейной и плоско-квадратной, которые схематически показаны на рис. 1.

Для плоско-квадратного пентамера рассмотрены два случая: одно электрическое поле, направленное вдоль оси от центра (узла) 3 к центру 1 на рис. 1а, и два скрещенных электрических поля. Второе поле перпендикулярно первому и направлено вдоль оси от узла 4 к узлу 2 на рис. 1а. Величины амплитуд напряжённости (E_1, E_2) и частоты (Ω_1, Ω_2) заданных электрических полей выбраны одинаковыми, то есть $E_1 = E_2 = E$ и $\Omega_1 = \Omega_2 = \Omega$. Для линейного

пентамера внешнее электрическое поле направлено вдоль его оси (от узла 5 к узлу 1 на рис. 1б).

ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЁТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Используемое в данной модели приближение $\ddot{q}_m \ll \omega_m^2 q_m$ было проверено в [23] отдельным численным расчётом, и его корректность была подтверждена. Общее решение колебательного уравнения (4) с вынуждающей силой для m -й моды содержит два вклада – собственное высокочастотное колебание с малой амплитудой и медленно меняющуюся огибающую с высокой амплитудой, определяемую вынуждающей силой: $-g_m |c_m|^2$. На рис. 2–6 представлены результаты численного расчёта системы дифференциальных уравнений (5) для пентамеров плоско-квадратного и линейного типов, соответственно. Временные зависимости вероятности обнаружения электрона на центрах пентамера рассчитаны при различных значениях модельных параметров и разных начальных состояниях локализации электрона в пентамере. В выполненных расчётах, из всевозможных вариантов межцентрового переноса, учитывалась возможность туннелирования только между ближайшими центрами ($m = n \pm 1$) в линейном пентамере, а в плоско-квадратном пентамере – с центра 5 на каждый из четырёх периферийных центров и обратно. Значение параметра туннелирования V_{mn} взято равным v , и этот параметр во всех расчётах не менялся ($v = 0,2$), а значения параметров внешнего электрического поля (E и Ω) и параметра g варьировались. Отметим также, что в целях практического применения наноструктурированных материалов, содержащих такого рода нанокластеры, использование низкочастотных электрических полей технологически более приемлемо, нежели высокочастотных. Более того, с теоретической точки зрения учёт влияния низкочастотных электрических полей позволяет остаться в рамках используемого в работе метода медленно меняющихся амплитуд.

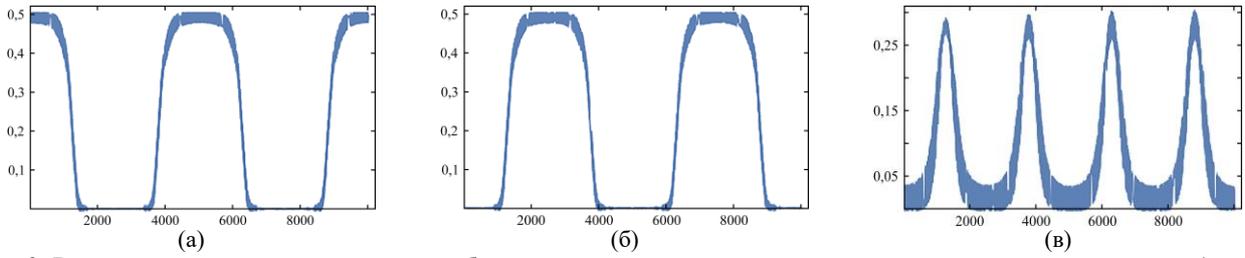


Рис. 2. Временные зависимости вероятности обнаружения электрона на m -м центре плоско-квадратного пентамера (в отн. ед. времени ωt) для $\nu = 0,2$, $g = 4$, $\Omega = 1/800$, $dE = 5$, $c_1(0) = c_2(0) = 1/\sqrt{2}$, скрещенные поля. Соответственно: для $m = 1$ и 2 (а); для $m = 3$ и 4 (б); для $m =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

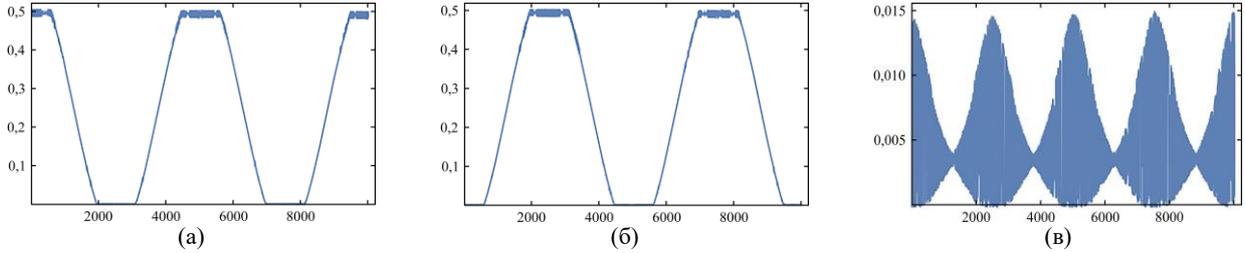


Рис. 3. Временные зависимости вероятности обнаружения электрона на m -м центре плоско-квадратного пентамера (в отн. ед. времени ωt) для $\nu = 0,2$, $g = 30$, $\Omega = 1/800$, $dE = 10$, $c_1(0) = c_2(0) = 1/\sqrt{2}$, скрещенные поля. Соответственно: для $m = 1$ и 2 (а); для $m = 3$ и 4 (б); для $m = 5$ (в).

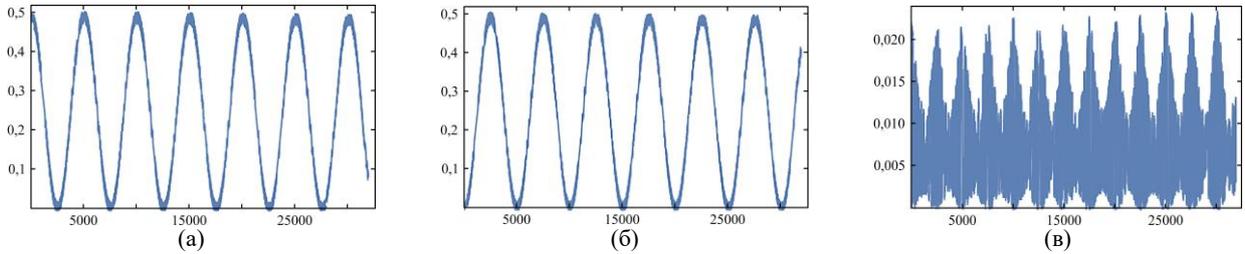


Рис. 4. Временные зависимости вероятности обнаружения электрона на m -м центре плоско-квадратного пентамера (в отн. ед. времени ωt) для $\nu = 0,2$, $g = 16$, $\Omega = 1/800$, $dE = 4$, $c_1(0) = c_2(0) = 1/\sqrt{2}$, скрещенные поля. Соответственно: для $m = 1$ и 2 (а); для $m = 3$ и 4 (б); для $m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

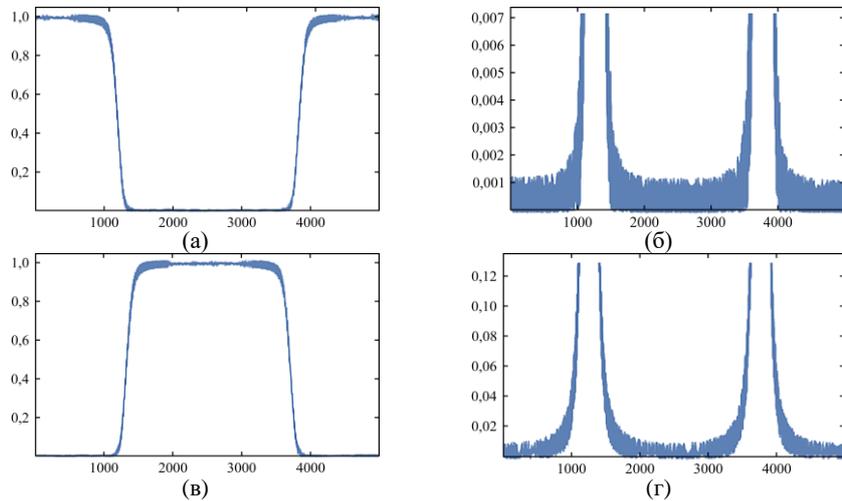


Рис. 5. Временные зависимости вероятности обнаружения электрона на m -м центре плоско-квадратного пентамера (в отн. ед. времени ωt) для $\nu = 0,2$, $g = 0,5$, $\Omega = 1/800$, $dE = 5$, $c_1(0) = 1$. Соответственно: для $m = 1$ (а); для $m = 2$ и 4 (б); для $m = 3$ (в); для $m = 5$ (г).

Переходя к обсуждению и анализу результатов, представленных на рис. 2–6, отметим общий факт: найденные режимы распределения электронной плотности являются периодически и устойчивыми. Рис. 2–5 показывают режимы распределения электронной плотности в пентамере плоско-квадратной конфигурации, а

рис. 6 – в пентамере линейной конфигурации. На рис. 2–4 представлены временные зависимости вероятности обнаружения обобществлённого электрона на каждом из центров пентамера при условии начальной ($t = 0$) равновероятной локализации электрона на центрах 1 и 2.

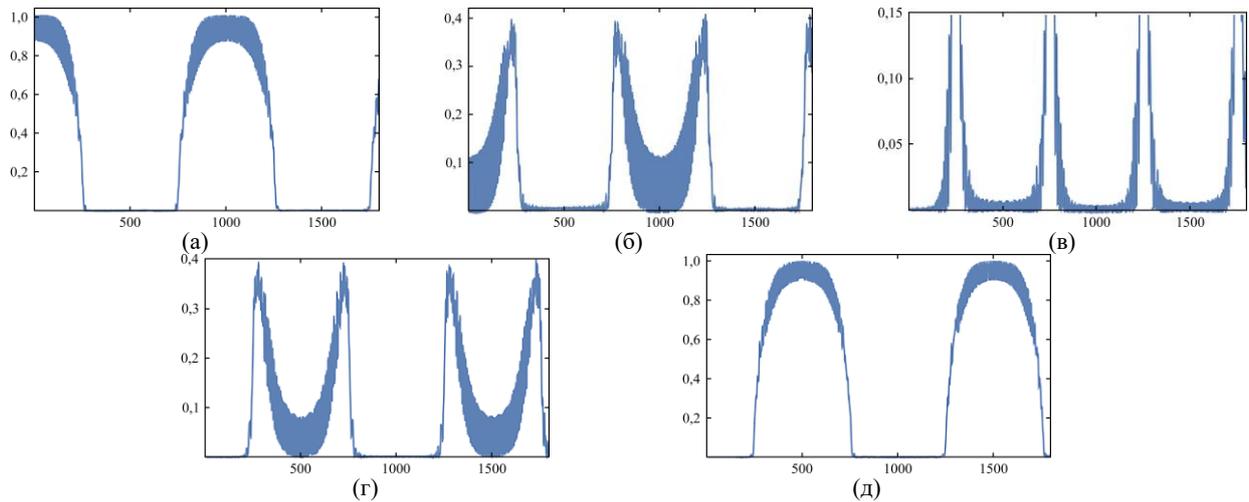


Рис. 6. Временные зависимости вероятности обнаружения электрона на m -м центре линейного пентамера (в отн. ед. времени ωt) для $\nu = 0,2$, $g = 1,5$, $\Omega = 1/160$, $dE = 2,5$, $c_1(0) = 1$. Соответственно: для $m = 1$ (а); для $m = 2$ (б); для $m = 3$ (в); для $m = 4$ (г); для $m = 5$ (д).

Рис. 5 и 6 соответствуют расчётам указанных временных зависимостей при использовании условия начальной ($t = 0$) локализации электрона только на центре 1 пентамера.

Режим, представленный на рис. 2, интересен тем, что центры 1 и 2, как и центры 3 и 4, заселяются синхронно, так что происходит периодическое переключение пентамера из состояния с равной населённостью центров 1 и 2 в состояние с равной населённостью центров 3 и 4, и обратно. При этом центр 5, через который идёт туннелирование электрона, заселяется максимум на 30% в моменты переключения. Такой режим можно назвать режимом парного переключения населённости центров с частичным заселением промежуточного центра 5. Следует отметить, что в данном режиме электрон фактически остаётся делокализованным на паре центров, при этом процесс переключения электронной плотности на противоположную пару центров начинается плавно, а затем идёт достаточно быстро.

В режиме, приведённом на рис. 3, как и на рис. 2, центры 1 и 2, так же как и центры 3 и 4, заселяются синхронно. Пентамер обратимо переключается из состояния с равной населённостью центров 1 и 2 в состояние с равной населённостью центров 3 и 4. В этом случае чрезвычайно важно, что населённость центра 5 остаётся практически нулевой. Такой режим можно назвать режимом прозрачности промежуточного центра при парном переключении населённости центров. В этом режиме электрон также остаётся делокализованным на паре центров, а процесс переключения электронной плотности на противоположную пару центров начинается резко и идёт далее с постоянной скоростью, но несколько меньшей, чем на рис. 2.

Следует отметить, что аналогичный режим прозрачности был обнаружен и в тетрамере (для двух промежуточных центров) под действием одного электрического поля [23].

В режиме, показанном на рис. 4, так же как на рис. 2 и 3, происходит обратимое парное (синхронное) переключение населённости центров пентамера. Это тоже режим прозрачности промежуточного центра, как и на рис. 3, но в отличие от предыдущих режимов изменения населённости плавные (кривая почти синусоидальная). Также важно, что в этом режиме длительность сохранения стабильного значения населённости гораздо короче, чем длительность парного переключения населённости – это отличает данный режим от двух предыдущих.

В представленном на рис. 5 режиме учитывалось только одно электрическое поле, напряжённость которого направлена вдоль оси 3–1. Отметим, что электрон, находясь на центрах 2, 4 и 5, не взаимодействует с электрическим полем при таком его направлении. Отличительной чертой этого режима является то, что переключение населённости происходит между центрами 1 и 3, а центры 2, 4 и 5 заселяются лишь частично, максимум на 30%. При этом существенно, что изменения электронной плотности на этих центрах синхронизированы: на центрах 2 и 4 – полностью, а на центре 5 – приблизительно. В этом режиме длительность сохранения стабильного значения населённости заметно больше, чем в режимах на рис. 2 и 3, а длительность переключения населённости короче.

Для режима, приведённого на рис. 6, как и для режима на рис. 5, учитывалось только одно электрическое поле, напряжённость которого направлена вдоль оси 5–1. Отличительной чертой этого режима является то, что переключе-

чение населённости происходит между крайними центрами 1 и 5, а центры 2, 3 и 4 заселяются асинхронно, в неравной мере, достигая максимума до 40%. При этом переключение электронной плотности на каждый последующий центр происходит эстафетно. Данный режим можно назвать режимом обратимой эстафетной передачи электронной плотности. Следует отметить, что качественно аналогичный режим был обнаружен в тетрамере под действием одного электрического поля [23], несмотря на меньшее число кластерных центров.

В завершение анализа представленных режимов отметим, что для обеих конфигураций пентамера соответствующим подбором модельных параметров также может быть реализован и режим запираания электрона на центре 1, аналогичный режимам, полученным для линейного и циклического тетрамера [23].

ВЫВОДЫ

Теоретическая модель, представленная в работе, позволяет описывать динамику электронной локализации в пентамерных нанокластерах с учётом их геометрической конфигурации. Получена система дифференциальных уравнений относительно временных зависимостей амплитуд вероятности локализации электрона на каждом из центров пентамера. Рассмотрены случаи линейной и плоско-квадратной конфигураций пентамера. Численные расчёты для этих двух конфигураций выполнены при условии $g \gg v$. При этом сильное электрон-колебательное взаимодействие, соответствующее высоким значениям параметра g , является важным фактором, способствующим установлению и удержанию локализации электрона на центрах нанокластера. Таким образом, рассматривались пентамеры, в которых центры являются слабо туннельно-связанными, а электрон-колебательное взаимодействие обобществлённого электрона с лигандным окружением на каждом из центров существенно. При данном условии анализ результатов численного моделирования показал, что в пентамере, при вариации параметров внешнего электрического поля и параметра g , могут быть реализованы различные характерные режимы в динамике локализации электрона:

- периодический режим переключения электронной плотности между центрами пентамера (форма временной зависимости – ступенчатая);
- режим с эффектом прозрачности промежуточного центра (этот режим также периодический и его форма временной зависимости может быть ступенчатой или синусоидальной);
- режим запираания электрона на центре 1.

При этом важно, что в случае двух скрещенных электрических полей обнаруженные режимы характеризуются синхронными изменениями электронной плотности, делокализованной на паре центров пентамера.

В результате в ходе анализа численных данных выяснено, как надо менять модельные параметры для пентамеров разного типа, чтобы в них имели место указанные режимы динамики электронной локализации. Показана возможность реализации подобных режимов распределения электронной плотности в пентамерах разных конфигураций. Из полученных результатов следует, что соответствующий выбор значений модельных параметров обеспечивает подобие режимов для линейных и плоско-квадратных пентамеров. Важно также, что аналогичные режимы распределения электронной плотности были выявлены и для тетрамерного нанокластера (линейного и циклического) [23], несмотря на меньшее число центров и на различие в способах учёта туннелирования в плоско-квадратных конфигурациях нанокластеров: в тетрамере учитывается, что туннелирование идёт по периферии, а в пентамере – только через центральный узел.

Выявлена управляющая роль электрического поля, позволяющая реализовать как режимы с локализацией электрона, так и режимы с делокализацией электрона. Показано, как варьирование частоты и амплитуды напряжённости электрического поля регулирует форму временной зависимости распределения электронной плотности, длительность электронной локализации на кластерных центрах и скорость переключения пентамерного нанокластера между состояниями с различной локализацией электрона.

В заключение отметим, что поскольку динамику распределения электронной плотности в многоцентровом нанокластере можно задавать в разных режимах и изменять режим, варьируя амплитуду и частоту электрического поля, то тем самым можно эффективно управлять дипольным моментом нанокластера, что перспективно для микро- и оптоэлектронных приложений. Отметим также, что представленная модель может быть использована для описания нанокластерных систем, содержащих в качестве кластерных включений туннельно-связанные квантовые точки вместо туннельно-связанных атомарных и молекулярных комплексов.

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. Коттон, Ф.А., Уолтон, Р., *Кратные связи металл-металл*. М.: Мир, 1985. 535 с.
2. Губин, С.П., *Химия кластеров. Основы классификации и строение*. М.: Наука, 1987. 263 с.
3. Суздаев, 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. Лахно, В.Д., *Кластеры в физике, химии, биологии*. Ижевск: НИЦ "РХД", 2001. 253 с.
6. Yevdokimov, Y.M., Salyanov, V.I., Katz, E.I. and Skuridin, S.G., Gold nanoparticle clusters in quasinematic layers of liquid-crystalline dispersion particles of double-stranded nucleic acids, *Acta Naturae*, 2012, vol. 4, no. 4, p. 78.
7. Плюснин, Н.И., Формирование нанофазного смачивающего слоя и рост металла на полупроводнике, *Письма в ЖТФ*, 2018, т. 44, № 21, с. 64.
8. Борисова, С.Д., Русина, Г.Г., Кластеры Pb на поверхности Al (001): равновесная структура и колебательные свойства, *Физика металлов и металловедение*, 2021, т. 122, № 11, с. 1103.
9. Малышев, К.В., Зондовая нанотехнология сборки кластеров из наночастиц, *Труды Международного симпозиума «Надежность и качество»*, 2012, т. 2, с. 411.
10. Albarqi, H.A., Wong, L.H., Schumann, C., Sabei, F.Y., et al., Biocompatible nanoclusters with high heating efficiency for systemically delivered magnetic hyperthermia, *ACS Nano*, 2019, vol. 13, no. 6, p. 6383.
11. Петров, Ю.И., *Кластеры и малые частицы*. М.: Наука, 1986. 366 с.
12. Непийко, С.А., *Физические свойства малых металлических частиц*. Киев: Наукова думка, 1985. 246 с.
13. Губин, С.П., Кособудский, И.Д., Металлические кластеры в полимерных матрицах, *Успехи химии*, 1983, т. 52, № 8, с. 1350.
14. Borisova, S.D. and Rusina, G.G., Structure and vibrations of free Ni_n clusters (n ≤ 20), *Physical Mesomechanics*, 2024, vol. 27, no. 2, p. 197.
15. De Heer, W.A., The physics of simple metal clusters: experimental aspects and simple models, *Rev. Mod. Phys.*, 1993, vol. 65, no. 3, p. 611.
16. Brack, M., The physics of simple metal clusters: self-consistent jellium model and semiclassical approaches, *Rev. Mod. Phys.*, 1993, vol. 65, no. 3, p. 677.
17. Иванов, В.К., Харченко, В.А., Ипатов, А.Н., Жижин, М.Л., Оптимизированная модель "желе" для металлических кластеров, *Письма в ЖЭТФ*, 1994, т. 60, № 5, с. 345.
18. Ivanov, V.K., Ipatov, A.N. and Kharchenko, V.A., An optimized "jellium" model for metallic clusters with screened Coulomb interaction, *JETP*, 1996, vol. 82, no. 3, p. 485.
19. Calvayrac, F., Reinhard, P.-G., Suraud, E. and Ullrich, C.A., Nonlinear electron dynamics in metal clusters, *Phys. Rep.*, 2000, vol. 337, no. 6, p. 493.
20. Заславский, Г.М., Мейтлис, В.П., Филоненко, Н.Н. *Взаимодействие волн в неоднородных средах*. Новосибирск: Наука, 1982. 177 с.
21. Kenkre, V.M., An ecumenical nonlinear von Neumann equation: fluctuations, dissipation, and bifurcations, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 1993, vol. 68, no. 1, p. 153.
22. 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.
23. 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.

Summary

A minimal theoretical model for describing the dynamics of localization of a shared electron in a pentamer nanocluster in an external low-frequency electric field, taking into account the electron-vibrational interaction, is proposed. Based on the given model, the system of differential equations was obtained regarding the time dependences of amplitudes of the probability of finding an electron on different centers of a pentamer. This model was used to describe the pentamers of linear and square-planar configurations. For those two types of the pentamer configuration, the numerical calculations were performed at different values of model parameters. The proposed model is characterized by the fact that the centers of the nanocluster are considered as weakly tunnel-coupled, and the electron-vibrational coupling with the ligand environment on each of its centers plays a significant role. Moreover, tunneling is taken into account only between the nearest centers of the nanocluster while the cluster centers are considered equivalent. The control role of an external electric field was revealed so that the variations of its amplitude and frequency allowed to realize the various electron localization regimes in the pentamer nanocluster. By setting up the values of those electric field parameters, the duration of the full localization of an electron at a certain cluster center (or centers) was regulated, as well as the rate of switching the localization of an electron to another cluster center (or centers), and the overall distribution of electron density in the nanocluster.

Keywords: pentamer nanocluster, ligand environment, electron-vibrational interaction, low-frequency electric field, electron localization