УДК 5172, 536.93

НЕЛИНЕЙНЫЕ МОДЕЛИ ПЕРЕНОСА В НАНОСИСТЕМАХ

© 2026 В. С. Дрякина, Л. А. Уварова

Московский государственный технологический университет «СТАНКИН»

Статья поступила в редакцию 26.04.2026

В статье рассматривается возможность моделирования процессов переноса в наноразмерных системах на основе модификации нелинейного уравнения Шредингера, в которое был введен параметр, играющий роль коэффициента диффузии. Рассмотрено солитонное решение в виде бризера и влияния на него частоты этого параметра. Проведённое сравнение с результатами квантово-химических исследований водных кластеров выявило качественное соответствие наблюдаемых закономерностей, прежде всего, наличие немонотонных зависимостей характеристик системы от её размера. Полученные результаты указывают на перспективы использования нелинейных солитонных моделей для анализа процессов переноса в нанообъектах.

Ключевые слова: наносистемы, процессы переноса, нелинейное уравнение Шрёдингера, солитоны.

DOI: 10.37313/1990-5378-2026-28-4-178-187
EDN: JEKNSK

Данная работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (госзадание, проект № FSFS- 20240007).

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы наноразмерные системы и наноструктуры активно исследуются в связи с их широким применением в различных областях науки и техники. Наноматериалы используются в электронике, оптоэлектронике, медицине, энергетике и других областях, что обусловливает необходимость изучения физических процессов, происходящих в системах наномасштаба [1, 2]. В работах, посвящённых исследованию наноматериалов и наноструктур, отмечается, что их свойства существенно отличаются от свойств макроскопических систем. Это связано с проявлением размерных эффектов, увеличением роли поверхности и особенностями взаимодействия частиц в системах малого размера [3, 4].

При уменьшении характерного размера системы L до нанометровых значений ($L \sim 1 - 100$ нм) в материальных системах начинают проявляться физические эффекты, отсутствующие или пренебрежимо малые в макроскопических телах. Эти эффекты математически выражаются в резком изменении относительного вклада поверхностных величин, в появлении квантовой дискретизации уровней энергии и в изменении характера процессов переноса.

При рассмотрении газовых сред переходному режиму соответствует число Кнудсена порядка единицы ($Kn = \frac{l}{L}$, l – средняя длина свободного пробега, L – характерный размер системы, что приводит к рассмотрению двух режимов при описании, например процессов массо- и теплопереноса, а именно, к диффузионному и свободно -молекулярному режимам). Для описания наносистем частично можно применять классические методы моделирования процессов переноса, а в других случаях для получения более правильного решения необходимо применять квантовые подходы, такие, как методы теории функционала плотности [5], метод валентных схем, модель поверхности потенциальной энергии и многие другие.

Вместе с тем в нелинейных волновых системах, в частности, в нелинейных гамильтоновых уравнениях [12] возникают частицеподобные решения. Они ведут себя как устойчивые структуры подобные частицам. В нелинейном уравнении Шрёдингера

$$i\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right) + |u|^2 u = 0,$$

Дрякина Виктория Сергеевна, аспирант. E-mail: vadryakina@yandex.ru
Уварова Людмила Александровна, доктор физико-математических наук, профессор кафедры прикладной математики. E-mail: uvar11@yandex.ru

такие решения появляются из-за баланса между дисперсионным членом $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$ и нелинейным членом $|\psi|^2\psi$. В результате такого баланса появляются солитоны. Они сохраняют форму при столкновении с другими солитонами и сохраняют свою структуру при свободном распространении. Пример такого частице-подобного решения для темного солитона

$$i\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)-|u|^2u=0,$$

$$u(x,t)=\eta\,\mathrm{sech}[\eta(x-vt-x_0)]\cdot e^{i\left[vx+\frac{\eta^2-v^2}{2}t+\phi_0\right]},$$

где $\eta>0$ – амплитуда, v – скорость, x_0 – начальное положение, ϕ_0 – начальная фаза.

Частице-подобные решения уравнении Синус-Гордона

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}-\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)+\sin\phi=0,$$

имеют топологическую природу. Самый распространенный частный случай решения уравнения Синус-Гордон – это решение в виде кинка

$$\phi(x,t)=\phi_0+4\arctan\left\{e^{\left[\pm\frac{x+vt}{\sqrt{v^2-1}}+\delta\right]}\right\},$$

где δ – произвольная постоянная. Кинк-решения представляют собой устойчивые переходы между различными вакуумными состояниями поля, возникающие благодаря нелинейному потенциалу $\sin\phi$. Эти структуры характеризуются топологическим зарядом и не могут быть уничтожены непрерывными возмущениями. Наряду с ними существуют связанные пары «кинк – антикинк», представляющие локализованные осциллирующие конфигурации. Таким образом, нелинейная структура уравнений в ряде случаев вскрывает дуальную природу решений, которые имеют свойства волны и частицы.

С другой стороны, в работах [6, 7] было показано на примере нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих процессы переноса, что структура уравнения влияет на функциональную или структурную зависимость коэффициентов переноса от искомой функции. Такое влияние можно объяснить тем, что вывод уравнений переноса часто связан с соответствующим законом сохранения. В продолжение идеи фундаментального влияния структуры дифференциального уравнения не только на получение его решения, но и на другие характеристики и закономерности в моделируемой системе, рассмотрим возможность моделирования процессов в наноразмерных системах с помощью нелинейных дифференциальных уравнений, особыми решениями которых являются солитоны.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Современные исследования процессов переноса в наноразмерных и макроскопических системах сталкиваются с необходимостью поиска универсальных моделей, способных описывать поведение частиц и волн в различных масштабах. В квантовой механике фундаментальным принципом является принцип корпускулярно-волнового дуализма, согласно которому микрообъекты проявляют одновременно свойства частиц и волн. Однако в макроскопических средах подобное поведение в явном виде наблюдается в редких случаях и требует специального теоретического описания и обоснования.

Солитонные решения нелинейных дифференциальных уравнений представляют интерес в данном вопросе, так как обладают устойчивостью и локализованностью, а также сочетают в себе признаки как волновых, так и квази-частичных объектов. Несмотря на широкое применение солитонов в нелинейной оптике и теории переноса, вопрос о возможности их интерпретации как аналогов корпускулярно-волнового дуализма в макромире остаётся недостаточно исследованным и вызывающим научный интерес.

Таким образом возникает проблема: в какой мере нелинейные модели, в частности основанные на уравнении Шрёдингера, позволяют рассматривать солитоны как объекты, обладающие одновременно волновыми и частице-подобными свойствами, и могут ли они служить эффективным инструментом описания процессов переноса в наноразмерных системах, описывая, в том числе, квантовые эффекты, которые в таких системах возникают. В более общем случае возникает проблема применимости решений нелинейных уравнений переноса, обладающих некоторыми аналогиями с решениями, имеющими место в микромире, для проведения количественных оценок для наноразмерных структур, коррелирующими с квантовыми расчётами.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

При рассмотрении пространственных солитонов общее волновое уравнение имеет вид:

$$\nabla^2 E - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 E}{\partial t} = \left(\frac{1}{\varepsilon_0 c^2}\right)\frac{\partial^2 P}{\partial t^2}, \quad (1)$$

где E – напряжённость электрического поля, c – скорость света в вакууме, ε_0 – проницаемость вакуума, P – поляризация среды, которая состоит из двух частей

$$P(r,t) = P_{lin}(r,t) + P_{nl}(r,t),$$

где P_{lin} – линейная часть, P_{nl} – нелинейная часть.

Решение уравнения (1) представляется в стандартной комплексной форме

$$E(r,t) = \frac{1}{2}\hat{x}[E(r,t)e^{-i\omega_0 t} + \text{к.с.}], \quad (2)$$

где i – мнимая единица, ω_0 – круговая частота, $\hat{x}$ – единичный вектор поляризации поля, амплитуда поля задается как

$$E(r,t) = A(r)e^{i\beta_0 Z}.$$

При распространении волн в оптических волноводах и в других системах, в которых имеет место электромагнитное излучение, постоянная распространения –

$$\beta_0 = k_0 n_0 = \frac{2\pi n_0}{\lambda},$$

где n_0 – линейный показатель преломления, выражается через длину электромагнитной волны

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega_0}.$$

Предполагается, что распространение происходит вдоль оси Z, а по поперечным направлениям X и Y наблюдается дифракция. X, Y и Z – пространственные координаты, составляющие r. Функция $A(X,Y,Z)$ описывает изменение огибающей пучка волн и в линейном случае она остается неизменной.

Вторую производную $\frac{d^2A}{dZ^2}$ можно не учитывать как величину второго порядка с учетом нелинейности среды и дифракционных эффектов, а также при выполнении параксиального приближения (когда изменение огибающей по Z происходит медленно по сравнению с длиной волны). В результате получается нелинейное уравнение параболического типа:

$$2i\beta_0\frac{\partial A}{\partial Z} + \left(\frac{\partial^2 A}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial Y^2}\right) + 2\beta_0 k_0 n_{nl}(I)A = 0. \quad (3)$$

При рассмотрении керровской нелинейности можно предположить, что

$$n_{nl}(I) = n_2 I$$

где n_2 – керровский коэффициент для нелинейной среды, зависящий от интенсивности излучения $I = |E|^2$. Введем безразмерные переменные

$$\begin{aligned} x &= \frac{X}{w_0}, \\ y &= \frac{Y}{w_0}, \\ z &= \frac{Z}{L_d}, \\ u &= (k_0|n_2|L_d)^{\frac{1}{2}}A, \end{aligned} \quad (4)$$

где w_0 – поперечный масштаб, связанный с шириной пучка волны на входе, а $L_d = \beta_0 w_0^2$ – дифракционная длина. В этих безразмерных переменных соотношение (3) принимает форму стандартного $(2+1)$-мерного нелинейного уравнения Шрёдингера:

$$i\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) \pm |u|^2 u = 0. \quad (5)$$

Знак перед нелинейным слагаемым определяется знаком коэффициента n_2. Знак минус говорит о случае самодефокусировке. Тогда нелинейное уравнение Шрёдингера обладает размерностью $(2+1)$, при этом 2 означает число поперечных измерений, а +1 указывает направление распространения z [13].

В квантовой механике уравнение Шредингера записывается с использованием времени, в нелинейной оптике в качестве эволюционной переменной обычно используется координата Z. При этом координату можно представить так:

$$Z = \left(\frac{c}{n_0}\right)t.$$

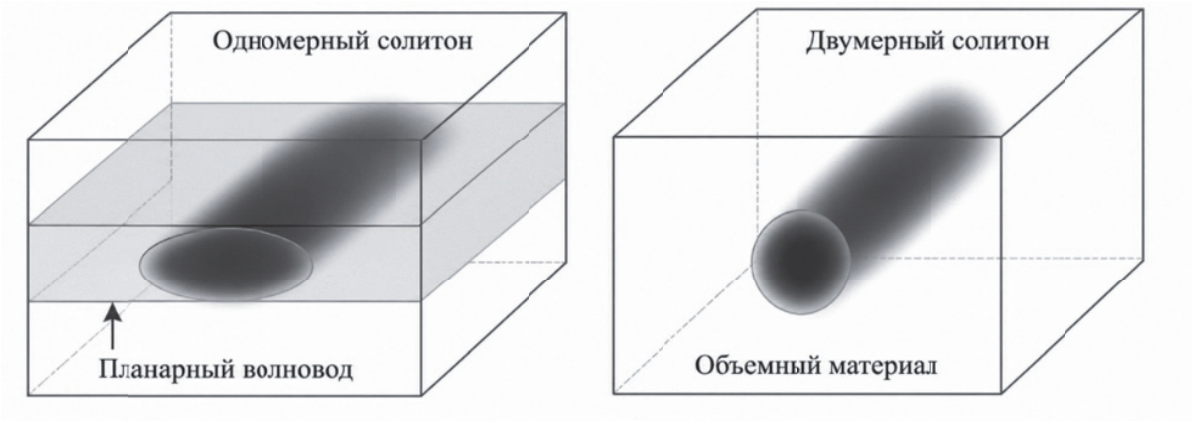


Рис.1. Геометрия одномерных и двумерных солитонов

Размерность нелинейного уравнения Шрёдингера зависит от геометрии среды. Например, в планарном волноводе поле ограничено в одном из поперечных направлений (по оси y), поэтому дифракция проявляется только вдоль x, как это показано на рис. 1. Такой волновод может поддерживать конечное число мод, и часто выбирается режим, при котором распространяется лишь фундаментальная мода. Тогда поле (1) можно записать в виде (2), где

$$E(r,t) = A(X,Z)B(Y)e^{i\beta_0 Z}, \tag{6}$$

функция $B(Y)$ описывает амплитуду моды, а β_0 – соответствующая постоянная распространения. В этом случае нелинейное уравнение Шрёдингера упрощается и из (5) получается

$$i\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \pm |u|^2 u = 0. \tag{7}$$

При положительном знаке реализуются светлые солитоны, а при минусе – темные. Такой вариант записи нелинейного уравнения Шрёдингера, который называют $(1+1)$ – мерным, представляет простейшую форму нелинейного уравнения Шрёдингера.

Отметим, что такое нелинейное дифференциальное уравнение, как Синус - Гордон имеет солитонные решения в виде кинка и антикинка. Это уравнение и его решение в виде пары
«кинк – антикинк», в частности, используется для моделирования движений открытых состояний (области пар оснований с разорванными водородными связями) вдоль молекулы ДНК, что подтверждено экспериментами [8].

Следуя работе [13], введем переменные для решения уравнения (7)

$$z = t,$$
$$x' = \sqrt{2}x,$$

где x' – масштабированная переменная. Тогда

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sqrt{2}\frac{\partial}{\partial x'},$$
$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = 2\frac{\partial^2}{\partial x'^2}. \tag{8}$$

Подставляем (8) в уравнение (7) при этом вынося мнимую часть влево

$$i\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{1}{2} * 2\frac{\partial^2 u}{\partial x'^2} \mp |u|^2 u,$$

то есть

$$i\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial^2 u}{\partial x'^2} \mp |u|^2 u,$$

Переопределим переменную $t \to -t$ и введем параметр γ, который будет обозначать и при положительном значении светлые солитоны, а при отрицательном темные солитоны. Тогда нелинейное уравнение Шрёдингера имеет вид [9, 10]:

$$i\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \gamma u|u|^2. \tag{9}$$

Замена

$$z = x - c_0 t,$$
$$u = \mathrm{e}^{ipx - i\delta t}V(z)$$

при условиях:

$$2p + c_0 = 0,$$
$$\alpha = \delta + p^2,$$

позволяют получить в качестве одного из решений для $V(z)$ бризер:

$$V(z) = \sqrt{\frac{2\alpha}{\gamma}}\frac{1}{ch(z\sqrt{\alpha})}. \quad (10)$$

Таким образом, уравнение (9) имеет решение, обладающее свойствами как волны, так и частицы. Уравнение (9) применяется для описания процессов переноса в различных средах, в том числе, для моделирования распространения кноидальных волн и солитонов в оптических волноводах. Здесь уравнение (9) записано для безразмерных переменных.

Наноструктуры занимают промежуточное положение между молекулами и макротелами. Поэтому применение для моделирования процессов в таких системах нелинейных уравнений, включающих как волновые, так и частице-подобные решения представляется обоснованным. Учитывая важную роль поверхности для мезо- и наносистем, модифицируем уравнение (9) путем введения в него коэффициента переноса, играющего роль коэффициента диффузии, D:

$$i\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \gamma u|u|^2. \quad (11)$$

В уравнении (11) переменные t и x имеют смысл времени и координаты соответственно. Далее введем безразмерные переменные:

$$\tilde{t} = \frac{t}{t_0}, \qquad \tilde{x} = \frac{x}{l},$$

где t_0 – характерное время и l – характерный размер наносистемы. Введём эти величины в (9) и получим:

$$i\frac{\partial u}{\partial \tilde{t}} = D\frac{t_0}{l^2}\frac{\partial^2 u}{\partial \tilde{x}^2} + t_0\gamma u|u|^2. \quad (12)$$

Для нахождения солитонного решения используются подстановки:

$$\tilde{z} = \frac{x}{l} - \frac{c_0\tilde{t}}{l\gamma},$$
$$u = e^{ikl\tilde{x} - i\delta\tilde{t}}V(\tilde{z}),$$
$$\delta = \frac{\omega l}{c_0}, |c_0| = 2kD,$$

где параметры k, ω имеют размерность волнового числа и частоты соответственно. Решение в виде бризера запишется следующим образом:

$$V(\tilde{z}) = \sqrt{\frac{lc}{\gamma} + \frac{2D\omega^2}{\gamma c^2}} \times \frac{1}{\mathrm{ch}\left(l\tilde{z}\sqrt{\frac{\gamma cl}{2D^2} + \frac{\omega^2}{c^2}}\right)}. \quad (13)$$

Такое решение вместе с параметрами волнового числа и частоты колебаний позволяет проводить оценки характеристик для систем различных размеров. В частности, можно проводить сравнение с волной де Бройля, которая равна:

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{2mkD}, \quad (14)$$

где h – постоянная Планка, m – масса наночастицы или кластера. Выразим частоту ω из с помощью уравнений Максвелла для амплитуд электромагнитных волн:

$$\omega = \frac{kc}{\sqrt{\varepsilon}},$$

где ε – диэлектрическая проницаемость.

Тогда солитонное решение, в которое введена волна де Бройля имеет вид:

$$V(\tilde{z}) = \sqrt{\frac{lc}{\gamma} + \frac{2Dk^2}{\gamma\varepsilon}} \times \frac{1}{\mathrm{ch}\left(l\tilde{z}\sqrt{\frac{\gamma cl}{2D^2} + \frac{k^2}{\varepsilon}}\right)}. \quad (15)$$

ЧИСЛЕННОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Рассмотрим решение (14) и проведем его сравнение с результатами, полученными квантовыми методами.

В работе [11] приведены расчёты для дипольных моментов изомеров воды, полученные методом теории функционала плотности. Зависимость дипольного момента от числа молекул n имеет пики при нечётных n (рис.2). Подобные пики можно получить из решения (14), вводя смещение для кластера соответствующего размера $(\tilde{z} - \widetilde{z_\mu})$, $\mu = 2n - 1$.

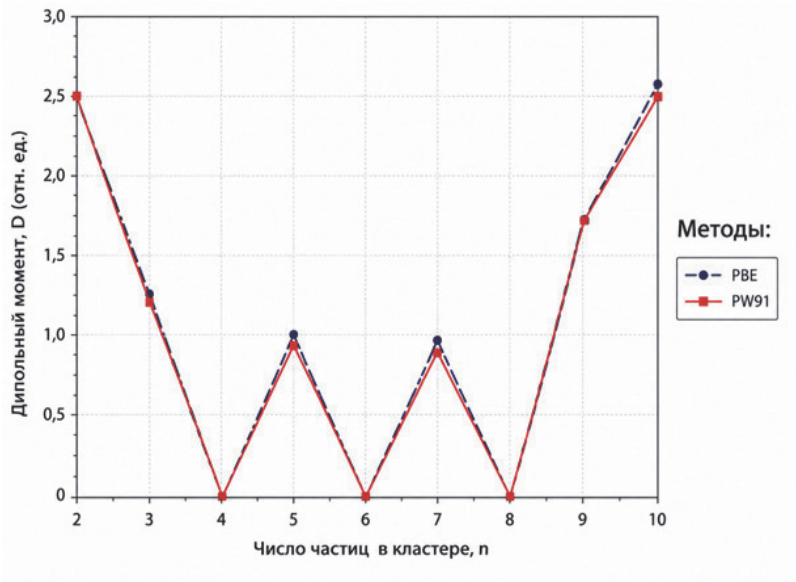


Рис. 2. Сравнение дипольных моментов (выраженных в Дебаях) i-меров, вычисленных с использованием методов PW91 и PBE

Данная зависимость возникает при сравнении дипольных моментов водных кластеров $(H_2O)_n$, рассчитанных методами теории функционала плотности (DFT) с использованием обобщенных градиентных приближений PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) и PW91 (PERDEW-Wang 1991) в базисе aug-cc-pVTZ начиная с размера кластера $n = 2$. Наблюдаемая зависимость дипольного момента от размера кластера носит выраженный немонотонный, осциллирующий характер. С увеличением числа молекул воды в кластере происходит чередование возрастания и убывания дипольного момента, что обусловлено изменениями геометрической структуры кластеров и взаимной ориентации молекул.

Минимальные значения дипольного момента, близкие к нулю, наблюдаются при размерах кластера $n = 4, 6, 8$. Данный эффект связан с формированием симметричных циклических структур, в которых происходит взаимная компенсация дипольных моментов отдельных молекул. При размерах кластера, содержащего n = 3,5,7,9 молекул, имеют место большие значения дипольных моментов, а при n = 5,7 фиксируются локальные максимумы дипольного момента, что обусловлено асимметричной упаковкой молекул воды в кластере и, как следствие, неполной компенсацией их дипольных вкладов.

В указанной выше работе [11] проведены также квантовые расчёты для энергетических характеристик водных кластеров, в частности свободной энергии Гиббса. Показана немонотонная зависимость энергии от величины изомера. Квантово-химические методы указывают на существование минимума при $n = 4$. Немонотонный характер функции V от величины l следует и из выражения (13). Из условия $\frac{dV}{dl} = 0$ определяется уравнение для нахождения экстремального значения l^*:

$$\frac{c^2\gamma}{2D^3\left(\frac{3\gamma c l^*}{2D^2}+\frac{\omega^2}{c^2}\right)^2} = \left(\frac{l^* c}{D}+\frac{2D\omega^2}{\gamma c^2}\right)\mathrm{th}^2\left(l^*\sqrt{\frac{\gamma c l^*}{2D^2}+\frac{\omega^2}{c^2}}\right). \tag{16}$$

Поскольку в данном случае важной являлась величина кластера, то при получении (16) полагалось, что $\tilde{z} = 1$. Разлагая гиперболический тангенс в ряд Тейлора до второго порядка, можно получить следующую приближённую формулу для определения l^*:

$$l^* \approx \frac{1}{k}\sqrt{\frac{\gamma^2 c^8}{16D^4\omega^6 - \gamma^2 c^8}} \tag{17}$$

Как следует из (16)-(17), экстремальный размер кластера зависит от параметров D и ω.

Рассмотрим далее влияние на V этих параметров. Предварительно рассмотрим реальные коэффициенты диффузии в различных средах.

1. Плазменные среды. В рамках кинетической теории газов и плазмы данный коэффициент может быть выражен через температуру, массу частиц и частоту их столкновений. Таким образом получаем

$$D = \frac{k_B T}{m\nu}, \tag{18}$$

где k_B – постоянная Больцмана, T – температура плазмы, ν – частота столкновений. Такое соотношение указывает на то, что при увеличении температуры увеличивается хаотическое движение частиц и соответственно увеличивается D. При этом увеличение массы приводит к снижению диффузии.

Если зафиксировать температуру и частоты столкновений частиц зависимость будет

$$D = \frac{C}{m}, \tag{19}$$

где C – постоянная величина при заданных условиях. Зависимость в данном случае носит гиперболический характер и свидетельствует о резком уменьшении коэффициента диффузии с ростом массы частицы.

Полученные уравнения зависимости коэффициента диффузии D от массы частиц (18), (19) напрямую отражают структуру модифицированного уравнения Шрёдингера (11), в котором параметр D выполняет роль дисперсионного (кинетического) члена. Изменение массы частиц приводит к изменению «квантовой подвижности» системы, чем больше масса частиц, тем слабее проходит диффузия. Смоделируем эксперименты подтверждающих данное высказывание.

Для количественного анализа данной зависимости было выполнено численное моделирование тяжелых ионов, на примере протона (p^+), дейтрона (D^+) и альфы частицы (α) в высокотемпературной плазме. При проведенные компьютерного моделирования брали следующие параметры $T = 1\,000\,000$ К, $\nu = 10^9 \frac{1}{c}$, $k_B = 1{,}38 \cdot 10^{-23}\ \frac{\text{Дж}}{\text{К}}$, тогда константа $C = \frac{k_B T}{\nu} = 1{,}38 \cdot 10^{-26}\ \frac{\text{м}^2 \cdot \text{кг}}{c}$, в соответствии с формулой (19) $D = \frac{1{,}38 \cdot 10^{-26}}{m}$. Рассчитана аналитически диффузия частиц: протон, дейтрон и альфа-частица, результаты занесены в таблицу № 1.

Таблица 1. Коэффициент диффузии в высокотемпературной плазме

Частица	Масса, кг	D, $\frac{\text{м}^2}{\text{с}}$
p^+	$1{,}673 \cdot 10^{-27}$	8,249
D^+	$3{,}344 \cdot 10^{-27}$	4,127
α	$6{,}645 \cdot 10^{-27}$	2,077

Для более наглядного представления зависимости коэффициента диффузии от массы частиц и одновременного отображения всех рассматриваемых элементов, произведено логарифмирование обеих частей уравнения (19). Так была получена линейная зависимость для корректного отображения данных в диапазоне значений (рис. 3).

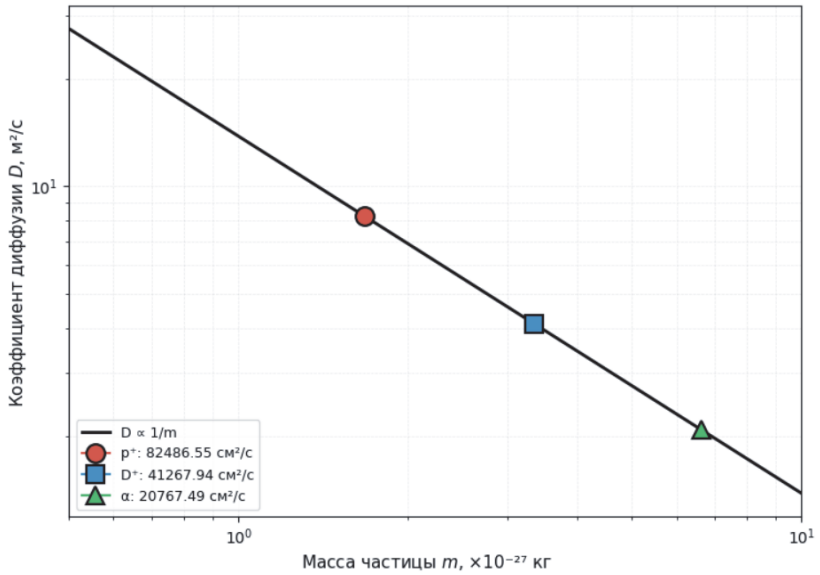


Рис. 3. Зависимость коэффициента диффузии от массы частиц на примере протона (p^+), дейтрона (D^+) и альфа частицы (α) в высокотемпературной плазме

2. Жидкие среды. Проведем численное и компьютерное моделирование для исследования зависимости коэффициента диффузии D от длины волны де Бройля λ_{DB} в воде H_2O и в жидких кластерах $(H_2O)_n$.

Коэффициента диффузии в водной среде выражается через уравнение Стокса-Эйнштейна

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta r}, \tag{20}$$

где k_B – постоянная Больцмана, η – вязкость жидкости, r – радиус частиц.

Для численного и компьютерного моделирования возьмем: $k_B = 1{,}38 \cdot 10^{-23}\,\frac{Дж}{К}$, температура воды $T = 50℃ = 323{,}15$ К, динамическая вязкость жидкости H_2O $\eta = 5{,}494 \cdot 10^{-4}$ Па · с, постоянная Планка $h = 6{,}626 \cdot 10^{-34}$Дж · с, скорость света $c = 3 \cdot 10^8\,\frac{м}{с}$, частота колебаний $f = 10^{14}$ Гц, циклическая частота $\omega = 2\pi f = 2 \cdot \pi \cdot 10^{14} = 6{,}28 \cdot 10^{14}$ с$^{-1}$, размерность волнового числа примем $k = \frac{6{,}28 \cdot 10^{14}}{3 \cdot 10^8} = 2{,}09 \cdot 10^6$ м$^{-1}$. Рассчитанная длина волны λ_{DB} и диффузия D для некоторых частиц радиус, которых измеряется в диапазоне от 2 нм до 50 нм представлена в таблице №2. Для уравнения (14) массу наночастиц можно найти как

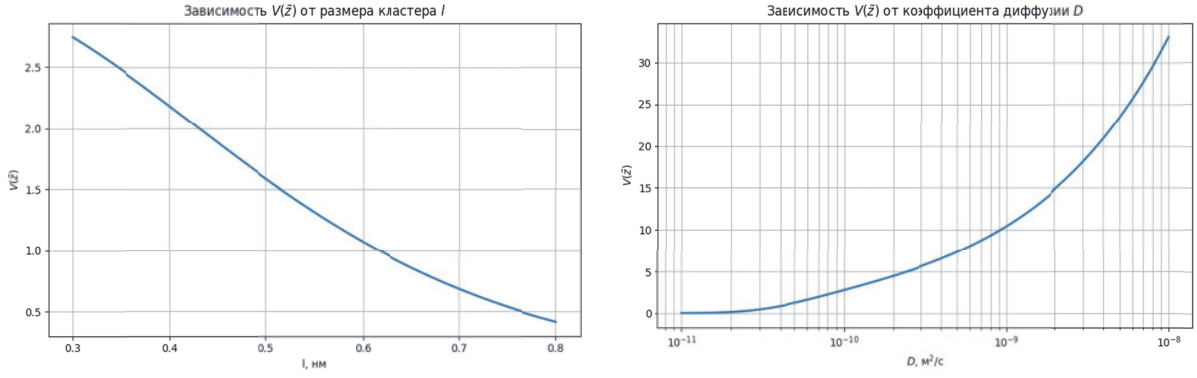
$$m = \frac{4}{3}\pi r^3 \rho,$$

где ρ – плотность наночастицы.

Таблица 2. Коэффициент диффузии в жидкости

Частица	**Радиус (r), нм**	**Плотность (ρ), $\frac{кг}{м^3}$**	**Масса (m), кг**	**Коэффициент диффузии D, $\frac{м^2}{с}$**	**Длина волны де Бройля λ_{DB}, м**
SDS мицелла	2	1000	$3{,}35 \cdot 10^{-23}$	$2{,}153 \cdot 10^{-10}$	$4{,}73 \cdot 10^{-18}$
Золотая наночастица	10	19300	$8{,}08 \cdot 10^{-20}$	$4{,}306 \cdot 10^{-11}$	$1{,}96 \cdot 10^{-21}$
SiO_2, наночастица	50	2200	$1{,}15 \cdot 10^{-18}$	$8{,}612 \cdot 10^{-12}$	$1{,}38 \cdot 10^{-22}$

В уравнении (15) выясним как ведет себя $V(\tilde{z})$ при изменении размера кластера l и как ведет $V(\tilde{z})$ при изменении коэффициента диффузии D. Для этого возьмем характерный размер наносистемы: скорость света $c = 3 \cdot 10^8\,\frac{м}{с}$, параметр зависит от нелинейного коэффициента преломления, по величине приближённо можно взять $\gamma = 1\frac{1}{c}$, $\tilde{z} = 1$, диэлектрическая проницаемость среды для воды $\varepsilon = 80$, частота колебаний $f = 10^{14}$ Гц, циклическая частота $\omega = 2\pi f = 2 \cdot \pi \cdot 10^{14} = 6{,}28 \cdot 10^{14}$ с$^{-1}$, размерность волнового числа примем $k = 2{,}09 \cdot 10^6$ м$^{-1}$. Для первого моделирования возьмем диапазон размера кластера $0{,}3 \cdot 10^{-9}$ м $\leq l \leq 0{,}8 \cdot 10^{-9}$ м (рис. 4 (а)) и коэффициент диффузии $D = 10^{-11}\,\frac{м^2}{с}$. Для второго моделирования возьмем диапазон значений диффузии $10^{-11}\,\frac{м^2}{с} \leq D \leq 10^{-8}\,\frac{м^2}{с}$ (рис. 4 (б)) и размер кластера $l = 0{,}3 \cdot 10^{-9}$ м.



(а) (б)

Рис. 4. Зависимость $V(\tilde{z})$ от размера кластера l (а) и от диффузии D (б)

На рис. 4 (а) наблюдается немонотонное изменение величины $V(\tilde{z})$ в диапазоне размера кластера $0{,}3 \cdot 10^{-9}$ м $\leq l \leq 0{,}8 \cdot 10^{-9}$ м. Наличие экстремума согласуется с аналитическим условием (16) – (17), согласно которому существует характерный размер l^*, соответствующий наиболее устойчивому состоянию системы.

На рис. 4 (б) представлена зависимость функции $V(\tilde{z})$ от коэффициента диффузии D в диапазоне $10^{-11}\frac{\text{м}^2}{\text{с}} \leq D \leq 10^{-8}\ \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$. На графике показано, что увеличение коэффициента диффузии приводит к росту амплитуды решения. Такое поведение связано с тем, что параметр D входит как в амплитудный множитель, так и в аргумент гиперболической функции в выражении (15). Полученный результат показывает, что изменение интенсивности процессов переноса существенно влияет на характеристики солитонного решения.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Полученные результаты показывают, что нелинейное уравнение Шрёдингера с введённым коэффициентом переноса позволяет описывать локализованные решения солитонного типа и анализировать влияние параметров среды на характеристики процессов переноса в наноразмерных системах. Аналитическое решение в виде бризера демонстрирует зависимость амплитуды и пространственной локализации от коэффициента диффузии, характерного размера системы и волновых параметров.

Сравнение модели с результатами квантово-химических расчётов водных кластеров показало качественное совпадение ряда закономерностей. В частности, как в квантовых расчётах, так и в рамках предложенной модели наблюдаются немонотонные зависимости характеристик системы от её размера. Это свидетельствует о том, что нелинейные модели способны отражать структурные перестройки и коллективные эффекты, возникающие в нанообъектах.

Результаты моделирования для плазменных сред демонстрируют ожидаемое уменьшение диффузионной подвижности с ростом массы, что согласуется с кинетической теорией. Аналогично для жидких сред показано, что увеличение размеров наночастиц приводит к уменьшению коэффициента диффузии и длины волны де Бройля, отражая переход от более выраженного волнового поведения к преобладанию классических свойств.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрена возможность применения нелинейных моделей переноса для описания процессов в наноразмерных системах на основе модифицированного нелинейного уравнения Шрёдингера. Показано, что солитонные решения данного уравнения, зависящие, в том числе от коэффициента диффузии, обладают одновременно волновыми и частице-подобными свойствами, что делает их перспективным инструментом для моделирования объектов, занимающих промежуточное положение между микроскопическими и макроскопическими системами.

Получено модифицированное нелинейное уравнение Шрёдингера с коэффициентом переноса, интерпретируемым как коэффициент диффузии среды. Найдено аналитическое решение в виде бризера и установлены зависимости его характеристик от параметров системы. Выполнены численные расчёты для плазменных и жидких сред, показавшие влияние массы частиц, коэффициента диффузии и характерного размера наносистемы на свойства решения.

Проведённое сравнение с результатами квантово-химических исследований водных кластеров выявило качественное соответствие наблюдаемых закономерностей, прежде всего, наличие немонотонных зависимостей характеристик системы от её размера. Это позволяет рассматривать предложенный подход как возможный инструмент для предварительных оценок свойств нанообъектов и анализа процессов переноса в условиях, когда необходимо учитывать как волновые, так и квазичастичные эффекты.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Цао, Г.* Наноструктуры и наноматериалы. Синтез, свойства и применение / Г. Цао, Ин Ван. – Научный мир, 2012. – 520 с.
2. *Гусев, А. И.* Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии / А. И. Гусев. – 2-е изд., испр. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. – 416 с.
3. *Федоров, А. В.* Физика наноструктур. Учебное пособие / А. В. Федоров, А. В. Баранов, В. Г. Маслов, А. О. Орлова, Е. В. Ушакова, М. Ю. Леонов, В. Г. Голубев . – СПб: Университет ИТМО, 2014. – 130 с.
4. *Смирнов, В. И.* Физические основы нанотехнологий и наноматериалы: учебное пособие / В. И. Смирнов. – Ульяновск: УлГТУ, 2017. – 240 с.

5. *Сатанин, А. М.* Введение в теорию функционала плотности. Учебно-методическое пособие / А. М. Сатанин. – Нижний Новгород, 2009. – 64 с.
6. *Аниконов, Д. С.* Единственность совместного определения двух коэффициентов уравнения переноса / Д. С. Аниконов // ДАН СССР. 1984. – Т. 277. – № 4. – С. 777-779.
7. *Uvarova, L. A.* About the placing of transport coefficients under the control of the structure of differential-difference equations / L. A. Uvarova // Научные ведомости БелГУ. – 2013. – № 26(169):33. – С. 142-144.
8. *Якушевич, Л. В.* Динамические характеристики кинков и антикинков ДНК // Компьютерные исследования и моделирование / Л. В. Якушевич, А. А. Рясик. – 2012. – № 4(1). – С. 209-217.
9. *Абловиц, М.* Солитоны и метод обратной задачи / М. Абловиц, Х. Сигур. – М.: Мир, 1987. – 479 с.
10. *Кудряшов, Н. А.* Методы нелинейной математической физики: Учебное пособие / Н. А. Кудряшов. – М.: МИФИ, 2008. – 352 с.
11. *Романова, Е. Ю.* Математическое моделирование структуры и процессов взаимодействия электромагнитного излучения с некоторыми типами мезо- и нанообъектов: автореф. дисс. … канд. физ.-мат. наук: 05-13-18, 02-00-04 / Е. Ю. Романова. – М., 2007. – 22 с.
12. *Тахтаджян, Л. А.* Простая связь геометрического и гамильтонова представлений интегрируемых нелинейных уравнений / Л. А. Тахтаджян, Л. Д. Фаддеев // Зап. научн. сем. ЛОМИ. – 1982. Т. 115. – С. 264–273.
13. *Кившарь Ю. С.* Оптические солитоны. От волоконных световодов до фотонных кристаллов [пер. с англ. под ред. Н.Н. Розанова] / Ю. С. Кившарь, Г. П. Агравал. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. – 648 с. – ISBN 5-9221-0584-1.

NONLINEAR TRANSPORT MODELS IN NANOSYSTEMS

© 2026 V.S. Dryakina, L.A. Uvarova

Moscow State Technological University “STANKIN”, Moscow, Russia

This article examines the possibility of modeling transport processes in nanoscale systems using a modification of the nonlinear Schrödinger equation, introducing a parameter acting as a diffusion coefficient. A soliton solution in the form of a breather and the effect of this parameter’s frequency on it are considered. A comparison with the results of quantum chemical studies of water clusters revealed a qualitative correspondence between the observed patterns, most notably the presence of nonmonotonic dependences of the system’s characteristics on its size. The obtained results indicate the potential for using nonlinear soliton models to analyze transport processes in nanoscale objects.

Keywords: nanosystems, transport processes, nonlinear Schrödinger equation, solitons.

DOI: 10.37313/1990-5378-2026-28-4-178-187
EDN: JEKNSK

REFERENCES

1. *Cao, G.* Nanostruktury i nanomaterialy. Sintez, svojstva i primenenie / G. Cao, In Van. – Nauchnyj mir, 2012. – 520 s.
2. *Gusev, A. I.* Nanomaterialy, nanostruktury, nanotekhnologii / A. I. Gusev. – 2-e izd., ispr. – M.: FIZMATLIT, 2009. – 416 s.
3. *Fedorov, A. V.* Fizika nanostruktur. Uchebnoe posobie / A. V. Fedorov, A. V. Baranov, V. G. Maslov, A. O. Orlova, E. V. Ushakova, M. Yu. Leonov, V. G. Golubev . – SPb: Universitet ITMO, 2014. – 130 s.
4. *Smirnov, V. I.* Fizicheskie osnovy nanotekhnologij i nanomaterialy: uchebnoe posobie / V. I. Smirnov. – Ul’yanovsk: UlGTU, 2017. – 240 s.
5. *Satanin, A. M.* Vvedenie v teoriyu funkcionala plotnosti. Uchebno-metodicheskoe posobie / A. M. Satanin. – Nizhnij Novgorod, 2009. – 64 s.
6. *Anikonov, D. S.* Edinstvennost’ sovmestnogo opredeleniya dvuh koefficientov uravneniya perenosa / D. S. Anikonov // DAN SSSR. 1984. – T. 277. – № 4. – S. 777-779.
7. *Uvarova, L. A.* About the placing of transport coefficients under the control of the structure of differential-difference equations / L. A. Uvarova // Nauchnye vedomosti BelGU. – 2013. – № 26(169):33. – S. 142-144.
8. *Yakushevich, L. V.* Dinamicheskie harakteristiki kinkov i antikinkov DNK // Komp’yuternye issledovaniya i modelirovanie / L. V. Yakushevich, A. A. Ryasik. – 2012. – № 4(1). – S. 209-217.
9. *Ablovic, M.* Solitony i metod obratnoj zadachi / M. Ablovic, H. Sigur. – M.: Mir, 1987. – 479 s.
10. *Kudryashov, N. A.* Metody nelinejnoj matematicheskoj fiziki: Uchebnoe posobie / N. A. Kudryashov. – M.: MIFI, 2008. – 352 s.
11. *Romanova, E. Yu.* Matematicheskoe modelirovanie struktury i processov vzaimodejstviya elektromagnitnogo izlucheniya s nekotorymi tipami mezo- i nanoob»ektov: avtoref. diss. … kand. fiz.-mat. nauk: 05-13-18, 02-00-04 / E. Yu. Romanova. – M., 2007. – 22 s.
12. *Tahtadzhyan, L. A.* Prostaya svyaz’ geometricheskogo i gamil’tonova predstavlenij integriruemyh nelinejnyh uravnenij / L. A. Tahtadzhyan, L. D. Faddeev // Zap. nauchn. sem. LOMI. – 1982. T. 115. – S. 264–273.
13. *Kivshar’ Yu. S.* Opticheskie solitony. Ot volokonnyh svetovodov do fotonnyh kristallov [per. s angl. pod red. N.N. Rozanova] / Yu. S. Kivshar’, G. P. Agraval. – M.: FIZMATLIT, 2005. – 648 s. – ISBN 5-9221-0584-1.

Viktoriya Dryakina, Graduate Student. E-mail: vadryakina@yandex.ru
Liudmila Uvarova, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Department of Applied Mathematics. E-mail: uvar11@yandex.ru