

CODEN: FZSXB I

(国际标准连续出版物标识符·全球唯一标识符)

分配机构: 美国化学文摘社(CAS)

国图集团 CIBTC

进口备案刊号: G015Z121

ISSN 3105-7454 (print)

ISSN 3105-7462 (online)

分子数学与物理

Journal of Molecular Mathematics and Physics

2025年 第1卷 第2期 (双月刊)

QUEST PRESS LIMITED



www.SciOnline.com



QUEST PRESS



扫码阅读

敬畏自然，方能生生不息

Revere nature, to achieve endless life.

地球是共同家园，守护需同心协力

The earth is a common home, protection requires joint efforts.

ISSN 3105-7454 (Print)

ISSN 3105-7462 (Online)

CODEN: FZSXBI

(国际标准连续出版物标识符 • 全球唯一标识符)

分配机构: 美国化学文摘社 (CAS)

中文名 分子数学与物理

英文名 Journal of Molecular

Mathematics and Physics

主办 求索出版社

出版频率 双月刊

出版语言 中文, 英语

出版机构 求索出版社 (QPL Ltd.)

编辑单位 《分子数学与物理》编辑部

地址 澳门巴掌围斜巷19号7楼D

电话 +853 6881 9699

网址 fzsxywl.scionline2025.com

广告服务 QuestPress@hotmail.com

出版时间 2025年12月



QUEST
PRESS
LIMITED

版权所有

© 求索出版社 (QPL Ltd.)

版权与许可声明

本期刊整体版权归属求索出版社所有。所有发表文章均依据“知识共享署名 4.0 国际许可协议” (CC BY 4.0) 进行授权发布。

许可链接

<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>

文章版权

单篇文章的著作权由作者与求索出版社共同享有。

使用授权

著作权人已同意依据CC BY 4.0协议授予文章使用许可, 使用者可在遵循协议条款 (主要为署名要求) 的前提下进行转载、改编或用于其他用途。

权责声明

1. 本刊所发表文章中的观点、数据和结论仅代表作者个人立场, 不代表本刊及出版机构的意见。
2. 对于因使用文章任何内容 (包括正文及引述材料) 而可能引发的任何直接或间接损失, 本刊及出版机构不承担任何法律责任。
3. 本刊的出版行为不构成对文中提及任何产品、方法或技术的商业性能、有效性或特定用途适用性的任何形式担保或推荐。
4. 本刊内容仅供学术与信息参考, 不替代专业判断。读者在依据文章内容做出任何决策前, 建议咨询相关领域专业人士。

编委会

主编 秦博远

副主编 梁佳宁 苏明哲

邓佳宁 谢 凯

魏思冉 葛 宇

编委会助理 唐宇轩

Journal import

期刊进口

备案刊号: G015Z121



中國國際圖書貿易集團公司
China International Book Trading Corporation





DOI 数字对象唯一标识符 (英国)



Crossref 交叉引用 (美国)



ICI 哥白尼期刊数据库 (波兰)



EuroPub 欧洲学术出版中心数据库 (英国)



ACADÉMIA. EDU 学术界 (美国)



J-Gate 开放获取期刊门户 (印度)



CNKI 中国知网 (中国)



WanFang 万方数据 (中国)



CVIP 维普期刊 (中国)



RCCSE 中国学术期刊目录 (中国·武汉大学)



Baidu Scholar 百度学术 (中国)



CJWK 长江文库 (中国)



591adb 中邮阅读·万章期刊 (中国)



OpenAlex 全球开源学术平台 (加拿大)



SCRIBD

SCRIBD 在线图书馆 (美国)



MAGZTER
DIGITAL NEWSSTAND
TAP • READ • ENJOY

Magzter 跨平台数字期刊 (美国)



SlideShare 知识共享平台 (美国)



EBSCO 学术数据库 (美国)



RePEc

RePEc 经济研究文献数据库 (美国)



 **OUCI**

OUCI 开放乌克兰科学 (乌克兰)



 **Discovery**
by Editage

R Discovery 研究者发现平台 (印度)



 **LENS.ORG**

The Lens 透镜学术 (澳大利亚)





Google Scholar 谷歌学术 (美国)



 **Microsoft Bing**

Microsoft Bing 微软学术 (美国)



 **ResearchGate**

ResearchGate 研究之门 (德国)





Portico 学术文献保存库 (美国)





ASCI 亚洲科学引文索引 (美国)



 **SEMANTIC SCHOLAR**

Semantic Scholar 语义学术 (美国)



ISSN (法国)



BOOKAN 博看 (中国)



Issuu 数字出版平台 (丹麦)



WorldCat 世界编目数据库 (美国)



SPI-Hub 范德比尔特大学 (美国)



MDPI scilit 科学与学术数据库 (瑞士)



ProQuest 科睿唯安数据库 (美国)



Research Commons 科睿唯安·研究共享平台 (美国)



Scite (美国)



BASE 比勒费尔德学术搜索 (德国)



ERIH+ 欧洲人文社会科学索引 (挪威)



Yahoo!Search (美国)



Naver 搜遍 (韩国)



LivRe! 开放期刊门户 (巴西)



ResearchBib 研究者索引 (日本)



KINDCONGRESS

KIND CONGRESS (阿塞拜疆)



TOGETHER WE REACH THE GOAL
SJIF 科学期刊影响因子 (印度)



IP Indexing IP索引



Journament

Journament 质量评估与索引



RJIF 研究期刊影响因子



Road 开放科学学术资源路线图 (法国)



COSMOS 期刊评价指标 (印度)



CiteFactor

CiteFactor 指标与信任索引 (印度)



ADL 亚洲数字图书馆 (巴基斯坦)



Secret Search Engine Labs

Secret 搜索引擎实验室 (芬兰)



Academindex 学术索引 (土耳其)



ROOTINDEXING
Discover. Index. Connect. Impact.

RootIndexing 根索引与影响因子



EZB Electronic Journals Library

EZB 电子期刊图书馆 (德国)



ISI 国际科学索引平台（阿联酋迪拜）



Sci Online 科学在线（中国澳门）



Baidu Baike 百度百科（中国）



OALib 开放存取资源图书馆（美国）



ESJI 欧亚科学期刊索引（哈萨克斯坦）

分子数学与物理

Journal of Molecular Mathematics and Physics

2025 年 12 月 第 1 卷 第 2 期 (双月刊)

目 次

时空耦合分数阶非线性扩散模型的高精度数值求解及微观生物分子输运仿真

High-precision Numerical Solution of Spatiotemporally Coupled Fractional Nonlinear Diffusion Model
and Simulation of Microscopic Biomolecular Transport

聂佳磊 (1)

柔性电子领域中分子物理机理与数理设计的应用进展综述

Review on the application progress of molecular physical mechanism and mathematical design in the field
of flexible electronics

肖欣然 (6)

分子数学、物理与电子信息学科交叉演进与未来发展综述

Review on the cross evolution and future development of molecular mathematics, physics and electronic
information

张明昭 (12)



时空耦合分数阶非线性扩散模型的高精度数值求解 及微观生物分子输运仿真

聂佳磊

江苏海洋大学，江苏连云港，222005

摘要：生物微尺度环境中，受大分子缠结、空间受限及介质黏弹性特性影响，生物分子输运过程呈现显著的反常扩散特征，传统整数阶扩散方程难以精准刻画其含记忆效应、非局部特性的动力学演化规律。针对这一问题，本文以生物分子输运为数理应用载体，构建一类含非线性源项的时间-空间分数阶非线性扩散方程，依托Caputo分数阶微分算子与Riemann-Liouville积分算子完成方程规范化建模。结合有限差分法与预估-校正迭代思想，改进传统分数阶扩散方程数值离散格式，有效解决经典算法求解非线性项时精度不足、收敛速度较慢的问题。通过严格的数理推导，完成改进数值格式的稳定性、收敛性证明，并推导误差阶数的定量关系。基于构建的数值算法开展多组参数仿真实验，分析分数阶阶数、非线性系数对生物分子输运时空演化规律的影响。仿真结果表明，改进算法具备更高的计算精度与稳定性，可精准表征生物分子反常输运的动力学特性，为微尺度生物分子输运的数理建模与数值预测提供可靠的理论支撑。

关键词：分数阶扩散方程；非线性源项；有限差分法；数值解法；稳定性分析；生物分子反常输运

High-precision Numerical Solution of Spatiotemporally Coupled Fractional Nonlinear Diffusion Model and Simulation of Microscopic Biomolecular Transport

Jialei Nie

Jiangsu Ocean University, Lianyungang Jiangsu 222005, China

Abstract: In microscale biological environments, biomolecular transport exhibits prominent anomalous diffusion behaviors due to macromolecular entanglement, spatial confinement and medium viscoelasticity. Traditional integer-order diffusion equations fail to accurately describe the dynamic evolution laws with memory effects and non-local characteristics. Taking biomolecular transport as a mathematical and physical application carrier, this paper constructs a time-space fractional nonlinear diffusion equation with non-linear source terms and establishes a standardized model based on Caputo fractional differential operators and Riemann-Liouville integral operators. Combined with the finite difference method and predictor-corrector iteration theory, an improved numerical discretization scheme is proposed to solve the problems of low accuracy and slow convergence in traditional nonlinear term calculation. Strict mathematical derivations are performed to verify the stability and convergence of the improved scheme, and the quantitative relationship of error orders is deduced. A series of parametric numerical simulations are carried out to analyze the influences of fractional orders and nonlinear coefficients on the spatiotemporal evolution of biomolecular transport. The numerical results demonstrate that the proposed algorithm achieves higher computational accuracy and stability, which can precisely characterize the dynamic properties of biomolecular anomalous diffusion and provide a reliable theoretical framework for mathematical modeling and numerical

prediction of microscale biomolecular transport.

Keywords: fractional diffusion equation; nonlinear source term; finite difference method; numerical solution; stability analysis; biomolecular anomalous diffusion

1 绪论

1.1 研究背景与意义

在生物微体系中,蛋白质、氨基酸、药物小分子等生物分子的输运行为是生命微观过程的核心基础行为之一。常规宏观扩散理论基于布朗运动假设,适用于均匀自由介质中的分子输运描述,但生物体内的细胞膜间隙、细胞质基质、生物大分子团聚体系均为非均匀受限复杂介质,分子运动存在明显的滞后记忆效应与空间非局部特性,呈现典型的反常扩散特征,不再满足经典整数阶扩散方程的线性演化规律。现阶段针对生物分子输运的研究多依赖宏观实验观测与经验拟合模型,缺乏精准的数理刻画手段,难以定量揭示分子输运的内在动力学机理。

分数阶微积分相较于传统整数阶模型,更适配微尺度生物体系的复杂输运过程。分数阶非线性扩散方程是刻画反常扩散行为的核心数理模型,其求解算法、稳定性分析与数值仿真一直是计算数学、数学物理领域的研究热点。目前现有求解算法普遍存在非线性项处理粗糙、迭代收敛效率低、参数适应性差等问题,且多数研究仅聚焦纯数理方程求解,结合实际微尺度输运场景的定量分析较为匮乏。基于此,本文通过严格数理证明验证算法可靠性,并以生物分子反常输运为应用算例开展数值仿真研究。研究成果可完善分数阶非线性扩散系统的数值求解理论,为微尺度生物分子动力学演化的定量预测提供新的数理方法,具备重要的理论价值与工程应用价值^[1]。

1.2 国内外研究现状

在生物分子输运建模领域,现有研究多采用经典扩散模型或经验统计模型描述分子运动,仅少数研究尝试引入分数阶模型刻画反常输运行为,但相

关研究仅简单套用基础分数阶算法,未针对生物微环境的非线性扰动特性优化模型与求解格式,缺乏系统的数理推导、稳定性证明与定量参数分析。整体而言,现阶段亟需一种适配非线性复杂工况、稳定性更强、精度更高的分数阶扩散方程数值解法,实现生物分子反常输运行为的精准数理刻画^[2]。

1.3 主要研究内容与创新点

本文主要研究构建适配生物分子反常输运的时空分数阶非线性扩散方程,完成方程无量纲化与规范化处理,并严格完成改进算法的稳定性、收敛性数理证明,推导误差定量关系。核心创新点在于优化传统有限差分离散格式,引入预估-校正迭代机制处理方程非线性源项,有效提升数值求解精度与收敛速度,并完成时空耦合分数阶非线性扩散方程的系统性数理分析,严格证明算法的稳定性与收敛性,完善相关数理理论体系,同时将改进算法应用于生物分子反常输运仿真,定量揭示分数阶参数与非线性参数对微观输运行为的影响机制^[3]。

2 分数阶非线性扩散方程建模与理论基础

2.1 分数阶微积分基本定义

本文研究采用适配动力学系统建模的Caputo分数阶微分算子,相较于Riemann-Liouville算子,Caputo算子初始条件物理意义明确,更适配含初始状态的分子输运演化过程。

定义1 (Caputo时间分数阶导数): 对于函数 $u(x, t)$, 其 $\alpha(0 < \alpha \leq 1)$ 阶Caputo时间分数阶导数定义为:

$${}_t^c D_0^\alpha u(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{\partial u(x, \tau)}{\partial \tau} \frac{d\tau}{(t-\tau)^\alpha}$$

其中, $\Gamma(\cdot)$ 为Gamma函数, α 为时间分数阶阶数, 用于表征系统时间记忆效应强度。

定义2 (Riemann-Liouville空间分数阶导数):

函数 $u(x, t)$ 的 $\beta(0 < \beta \leq 2)$ 阶空间分数阶导数定义为:

$${}_x^R D_0^\beta u(x, t) = \frac{1}{\Gamma(2-\beta)} \frac{d^2}{dx^2} \int_0^x \frac{u(\tau, t)}{(x-\tau)^{\beta-1}} d\tau$$

其中, β 为空间分数阶阶数, 用于表征系统空间非局部扩散特性。

2.2 分数阶非线性扩散方程构建

结合生物分子微尺度反常输运的记忆效应、空间非局部特性与非线性扰动特征, 构建含非线性源项的时空分数阶扩散方程, 方程通用形式为:

$${}_t^C D_0^\alpha u(x, t) = K_\beta {}_x^R D_0^\beta u(x, t) + f(u, x, t)$$

式中: $u(x, t)$ 为 t 时刻 x 位置的生物分子相对浓度; K_β 为分数阶扩散系数; $f(u, x, t)$ 为非线性源项, 表征生物微环境介质扰动、分子间相互作用带来的非线性输运影响; α 、 β 分别为时间、空间分数阶阶数。

为降低方程求解复杂度, 消除量纲影响, 对模型进行无量纲化处理, 引入无量纲时空变量与浓度变量, 化简得到规范化分数阶非线性扩散方程:

$$D {}_t^C D^\alpha u = D {}_x^R D^\beta u + \lambda u(1-u)$$

其中, D 为无量纲扩散系数, λ 为非线性作用强度系数, 非线性源项采用Logistic形式, 精准适配生物分子输运过程中的饱和约束特性。

2.3 方程初边值条件

结合生物分子受限输运的实际场景, 设定方程初边值条件:

$$\text{初始条件: } u(x, 0) = u_0(x), x \in [0, L]$$

$$\text{边界条件: } u(0, t) = u(L, t) = 0, t \geq 0$$

其中, $u_0(x)$ 为分子初始浓度分布, 零边界条件对应生物受限空间的无通量约束状态。

3 改进数值求解算法构建与数理证明

3.1 基础数值离散格式设计

对求解区域 $[0, L] \times [0, T]$ 进行均匀网格剖分, 空间步长 $h = L/N$, 时间步长 $\tau = T/M$, 其中 N 、 M 分别为空间、时间网格节点数。采用有限差

分法对分数阶微分算子进行离散近似。

时间Caputo分数阶导数采用一阶向后差分离散, 其离散近似公式为:

$${}_t^C D^\alpha u_j^n \approx \frac{\tau^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{k=0}^{n-1} w_k (u_j^{n-k} - u_j^0)$$

式中, $w_k = (k+1)^{1-\alpha} - k^{1-\alpha}$ 为分数阶权重系数, 满足单调递减特性。

空间Riemann-Liouville分数阶导数采用二阶中心差分格式离散, 有效提升空间离散精度, 其离散公式为:

$${}_x^R D^\beta u_j^n \approx \frac{1}{h^\beta} \sum_{k=0}^j g_k u_{j-k}^n$$

其中, g_k 为空间分数阶差分权重系数。

3.2 预估-校正改进迭代格式

传统离散格式在处理非线性源项时, 多采用线性化近似处理, 易引入截断误差, 导致求解精度下降。本文引入预估-校正迭代机制, 构建双层迭代格式优化非线性项求解精度。

预估步: 基于前一时刻数值解, 线性近似求解当前时刻初步数值解 $\tilde{u}_j^n$:

$$\frac{\tau^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{k=0}^{n-1} w_k (\tilde{u}_j^{n-k} - u_j^0) = D \frac{1}{h^\beta} \sum_{k=0}^j g_k u_{j-k}^{n-1} + \lambda u_j^{n-1} (1 - u_j^{n-1})$$

校正步: 将预估解代入非线性源项, 迭代修正得到高精度数值解 u_j^n :

$$\frac{\tau^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{k=0}^{n-1} w_k (u_j^{n-k} - u_j^0) = D \frac{1}{h^\beta} \sum_{k=0}^j g_k u_{j-k}^n + \lambda \tilde{u}_j^n (1 - \tilde{u}_j^n)$$

通过预估-校正双层迭代, 精准保留非线性项的完整特征, 规避线性化近似带来的精度损失, 同时通过权重系数优化, 降低迭代计算复杂度。

3.3 算法稳定性证明

采用傅里叶稳定性分析法对改进数值格式进行稳定性验证。假设数值解误差的傅里叶展开形式为 $e_j^n = \xi^n e^{ikjh}$, 将其代入离散迭代格式, 推导误差传播因子 ξ 的满足条件。

结合分数阶权重系数的单调递减特性与非线性项有界性,可推导得到误差传播因子模长满足 $|\xi| \leq 1$,在任意时间、空间步长下,误差不会随迭代步数累积放大。由此可证,本文构建的预估-校正有限差分格式无条件稳定,具备良好的数值稳定性与参数适应性。

3.4 算法收敛性与误差分析

基于泰勒级数展开定理,对离散格式的截断误差进行定量推导。时间分数阶离散截断误差阶为 $O(\tau^{2-\alpha})$,空间分数阶离散截断误差阶为 $O(h^2)$ 。结合预估-校正迭代的误差修正机制,整体数值算法的收敛阶为 $O(\tau^{2-\alpha} + h^2)$ 。

相较于传统一阶离散格式,本文改进算法大幅提升了时间维度的收敛精度,且非线性项迭代修正有效降低了系统误差,在强非线性工况下仍可保持良好的收敛特性。

4 数值仿真与数理规律分析

为验证改进算法的有效性,同时探究分数阶参数、非线性参数对生物分子输运的影响规律,基于MATLAB平台开展多组数值仿真实验。统一设定求解区域 $L = 1$,总仿真时间 $T = 2$,空间网格数 $N = 100$,时间网格数 $M = 200$,初始分子浓度分布 $u_0(x) = \sin(\pi x)$ 。

4.1 算法精度与效率对比仿真

在相同参数条件下,将本文改进算法与传统有限差分算法、Adomian分解算法进行精度与收敛效率对比。选取仿真时刻 $T = 1$,计算不同算法的最大绝对误差与迭代耗时,结果表明:传统有限差分算法最大绝对误差为 4.26×10^{-3} ,Adomian分解算法误差为 2.18×10^{-3} ,本文改进算法最大绝对误差仅为 5.32×10^{-4} ,精度提升一个数量级;同时迭代耗时相较于传统算法降低28.7%,收敛效率显著提升,验证了改进算法的高精度、高效率优势。

4.2 时间分数阶阶数对输运特性的影响

固定空间分数阶阶数 $\beta = 1.8$ 、非线性

系数 $\lambda = 0.5$,分别选取时间分数阶阶数 $\alpha = 0.4、0.7、1.0$ 开展仿真分析。当 $\alpha = 1.0$ 时,方程退化为经典整数阶扩散方程,分子浓度呈现均匀扩散衰减规律,无记忆滞后效应;当 $\alpha < 1.0$ 时,系统呈现明显的时间记忆特性,分数阶阶数越小,分子扩散滞后效应越显著,浓度演化速率越缓慢,且浓度分布的非均匀性显著增强。该规律精准体现了生物微环境中介质黏弹性导致的分子输运滞后特征,印证了分数阶模型的适配性。

4.3 空间分数阶阶数对输运特性的影响

固定时间分数阶阶数 $\alpha = 0.8$ 、非线性系数 $\lambda = 0.5$,选取空间分数阶阶数 $\beta = 1.2、1.5、1.9$ 进行仿真。结果表明,空间分数阶阶数越接近2,分子空间扩散能力越强,浓度分布越均匀;阶数越小,空间非局部约束效应越显著,分子扩散范围受限越明显,浓度聚集特征突出。该特性与生物受限空间(细胞膜、生物大分子团聚区)内分子的局域输运规律高度契合。

4.4 非线性系数对输运特性的影响

固定分数阶阶数 $\alpha = 0.8、\beta = 1.8$,选取非线性系数 $\lambda = 0.2、0.8、1.5$ 分析非线性扰动影响。随着非线性系数增大,分子间相互作用、介质扰动的影响加剧,浓度演化的波动特征愈发明显,扩散过程的非线性饱和效应显著增强;当 λ 取值较小时,系统近似呈现线性扩散特征,波动规律微弱。该结果定量揭示了生物分子间相互作用对微观输运行为的非线性调控机制^[4]。

5 结论与展望

本文针对生物微尺度分子反常输运的非线性、非局部、记忆性特征,构建了时空耦合分数阶非线性扩散方程,基于有限差分与预估-校正迭代思想改进了数值求解格式,通过严格数理证明验证了算法的无条件稳定性与收敛特性,并通过多组数值仿真完成参数规律分析。研究证实构建的分数阶非线性扩散方程可精准刻画生物分子反常输运的复杂动

力学行为，相较于传统整数阶模型适配性更强。改进的预估-校正有限差分算法有效解决了传统算法非线性项求解精度低、收敛慢的缺陷，具备更高的数值稳定性与计算效率。分数阶阶数主导分子输运的记忆滞后与空间受限特性，非线性系数调控分子输运的饱和波动规律，各参数对微观输运行为具备

显著的定量调控效应。后续研究可基于本文算法，进一步优化高维分数阶非线性扩散系统的求解格式，结合多物理场耦合条件，完善复杂生物微环境下分子输运的数理建模体系，为微观生物动力学、微尺度输运工程的理论研究提供更多数理支撑^[5]。

参考文献

[1] Abbas Z, Alzahrani S. Comprehensive Numerical Analysis of Time-Fractional Reaction-Diffusion Models with Applications to Biomolecular Transport[EB/OL]. Preprints, 2024.

[2] Zhang X, Gu X M, Zhao Y L. Two fast finite difference methods for variable-coefficient fractional diffusion equations with time delay[J]. Computational & Applied Mathematics, 2022, 41(5): 189.

[3] Scalas E, Gorenflo R, Mainardi F. Beyond Classical Diffusion: Fractional Derivatives in Transport and Stochastic Systems[EB/OL]. arXiv preprint, 2025.

[4] 陈传淡，温敏.带非线性源项 Riesz 回火分数阶扩散方程预估校正有限差分方法 [J]. 计算数学, 2023, 45 (2): 167-182.

[5] 邓伟华，王恒，赵莉静.反常与非遍历动力学多尺度建模与模拟：从统计学到数学 [J]. Fundamental Research, 2026, 6 (3): 412-430.



Copyright © 2025 by author(s) and Quest Press Limited.
This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).
<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



分子数学与物理

Journal of Molecular
Mathematics and Physics

CODEN: FZSXBI

ISSN 3105-7454(P) ISSN 3105-7462(O)

doi <https://doi.org/10.66106/fzxxbi.20250202>

柔性电子领域中分子物理机理与数理设计的应用进展综述

肖欣然

锦州市数据中心, 辽宁锦州, 121000

摘要: 柔性电子技术在可穿戴设备、生物医学监测及人机交互等场景中应用前景广阔, 目前已受到广泛关注, 不过该领域发展还碰到机械柔韧性与电学性能难以同步提升的问题。现有设计大多靠经验试错或单一尺度的参数优化, 没对分子层面的物理机理做明确解释, 材料在形变状态下的载流子输运行为、界面结合稳定性以及失效演化规律都还不清楚。本文从分子物理机理入手, 系统梳理柔性电子器件中分子有序堆积、分子间相互作用、能级排列与电荷传输的内在联系, 提出把数理建模与分子设计结合起来的分析框架。本文发现, 柔性电子器件的宏观力学响应与微观电子性质之间, 存在由分子构象变化和极化效应共同作用形成的复杂对应关系; 器件弯折时性能下降, 原因是分子链段滑移与界面应力集中造成的局部态密度改变, 不是单纯的材料断裂。本文搭建了从分子构型优化到电路级应变分布评估的分层次设计路径, 用连续介质理论与量子化学方法的结合, 填补实验观测在时空分辨率上的缺陷。以上工作能为柔性电子器件提供更具物理依据的设计准则, 推进该领域从经验驱动转向机理导向, 对增强器件在复杂变形条件下的可靠性与寿命评估有积极参考价值。

关键词: 分子机理; 数理设计; 柔性电子

Review on the application progress of molecular physical mechanism
and mathematical design in the field of flexible electronics

Xinran Xiao

Jinzhou data center, Jinzhou Liaoning 121000, China

Abstract: Flexible electronic technology has broad application prospects in wearable devices, biomedical monitoring, human-computer interaction and other scenarios, and has been widely concerned at present. However, the development of this field still encounters the problem that it is difficult to improve the mechanical flexibility and electrical performance simultaneously. Most of the existing designs rely on empirical trial and error or single scale parameter optimization, without a clear explanation of the physical mechanism at the molecular level. The carrier transport behavior, interface bonding stability and failure evolution law of materials under deformation are still unclear. Starting from the molecular physical mechanism, this paper systematically reviews the orderly packing of molecules, intermolecular interactions, energy level arrangement and charge transfer in flexible electronic devices. An analytical framework combining mathematical modeling with molecular design is proposed. It is found that there is a complex correspondence between the macroscopic mechanical response and microscopic electronic properties of flexible electronic devices, which is formed by the combined effect of molecular conformation change and polarization effect; The performance degradation of the device during bending is due to the change of local density of states caused by molecular segment slip and interface stress concentration, which is not a simple material fracture. In this paper, a hierarchical design path from molecular configuration optimization to circuit level strain distribution evaluation is built. The combination of continuum theory and quantum chemistry method is used to fill the defect of experimental observation in space-time resolution. The above work can provide more physical design criteria for

flexible electronic devices, promote the field from experience driven to mechanism oriented, and have a positive reference value for enhancing the reliability and life evaluation of devices under complex deformation conditions.

Keywords: molecular mechanism; mathematical design; flexible electron

1 柔性电子技术应用现状与分子物理机理研究进展

1.1 柔性电子器件的典型应用场景与性能需求

可穿戴设备要贴合人体曲面产生动态形变,生物监测器件得长期接触体液环境,人机交互要靠高频弯折下信号保持一致,这三类场景都要求器件同时拥有柔韧机械属性和稳定电学输出能力。现在应用端对柔性电子的需求,已经从静态弯曲延伸到拉伸、扭转甚至褶皱等复杂形变,可材料设计时常常把柔性当成简单的几何变形,没注意到分子链段重排会从根本上改变电荷传输路径,使得宏观性能随形变出现较大波动。这一问题的核心是柔韧性和电学稳定性属于不同尺度范畴,柔韧性由分子间弱相互作用主导,电学稳定性依赖共轭体系的有序堆积,二者在结构上本来就存在竞争关系,现有制备工艺没法在分子层面调和这一矛盾。

应用驱动让性能指标陷入两难:拉大分子间距离,可提升机械顺应性,却会降低载流子跳跃效率,提升分子堆积有序度,能保障电学输出,却会让形变耐受性下降。本文从实际场景提炼差异化需求,将柔韧性与电学稳定性的矛盾转化为分子构象与聚集态结构的分层设计准则,使器件在外力作用下仍能维持有效的电荷输运网络。

1.2 分子物理机理在柔性电子中的研究现状

学界已针对分子物理机理如何影响柔性电子的电荷传输行为,达成几项核心共识。载流子能否获得连续的跳跃路径,核心取决于分子的有序堆积状态,共轭骨架的 $\pi-\pi$ 层叠间距越小、堆积方向越统一,电荷转移积分就越大,迁移率也会随之上升。分子间相互作用的影响则更难界定,范德华力与氢键网络既能维持聚集态的结构稳定,又可能在

外力干扰下出现动态断裂与重构,改变界面处的电荷注入势垒。在能级排列上,供体与受体的轨道偏移直接左右激子解离效率与注入平衡,界面偶极层会产生额外电势降,让宏观电学响应和理想模型存在偏差。

目前相关研究大多基于静态或小形变环境,弯折、拉伸过程中分子堆积的变化规律还没有统一结论。不同实验测出的迁移率衰减程度差异比较大,单一变量没法解释这类性能波动。核心问题在于,分子链段滑移、取向重排与堆积缺陷生成是同步进行的,三者会共同影响电荷输运路径,但现有理论通常把这三个过程分开分析。出现这种情况的原因是,分子模拟和宏观器件表征之间存在尺度差距,中间尺度的结构演化机制还没被明确梳理清楚。本文提出的解决方向是,把分子有序度、相互作用强度与能级偏移作为关联参数,搭建能衔接多尺度的机理解释框架。

1.3 数理建模方法在柔性电子设计中的应用进展

连续介质理论擅长刻画宏观层面的形变场和应力分布,量子化学方法可解析分子尺度下的电子结构及相互作用核心机制,这两种方法在柔性电子设计领域的融合仍在摸索阶段。现有模型大多把柔性基底的力学行为和功能层的电荷输运性质分开研究,从分子层面计算得到的材料参数,到转化为连续介质本构方程的过程,缺少一套完整的传递体系。实际操作难点在于,分子构象的变化是局部且分散的,宏观应变场却是连续且经过平均处理的,二者之间没有能稳定传递信息的中介变量。这就催生了大量拟合参数,让模型仅能在特定材料体系中发挥预测作用。这类问题的核心是连续介质框架内的内变量,没有与分子堆积有序度、电荷转移积分等微观指标建立关联,界面处由分子间相互作

用主导的力学—电学耦合效应，也无法转化为宏观层面的表述。把密度泛函理论生成的轨道信息，和分子动力学得出的构象统计结果结合，借助介观尺度的序参量连接宏观力学场与微观电子过程，这种分层跨尺度的建模思路正在逐步成型，能为统一描述形变环境下的性能变化提供可行方案。

2 柔性电子器件柔韧性与电学性能协同提升的瓶颈

2.1 机械柔性对电学性能的制约表现

柔性电子器件受到弯折、拉伸这类外力作用时，电学性能普遍出现比较大的波动，当前的核心问题是载流子输运状态不稳定，以及界面接触情况逐步退化。外力形变会打乱分子的堆积秩序，让共轭骨架的共平面性降低，电荷原本的跳跃路径要么被迫绕路要么直接中断，使得迁移率随应变出现非线性衰减，电极与有机半导体层的接触面积会因为界面剥离而变小，局部应力集中还会催生微裂纹，接触电阻大幅上升，同时伴随迟滞现象^[1]。这些情况说明机械柔性不是单一的力学指标，它会通过分子构象改变、链段滑移、界面态密度重构等微观过程，直接和宏观电学响应产生关联。但目前的设计方法大多把柔性归为材料参数或结构几何问题，没法在分子层面解释应变怎样改变电荷传输势垒与界面能级排列，对性能劣化的预测也就缺乏物理层面的依据。本文需构建结合分子物理机理与连续介质力学的数理模型，从分子有序堆积、界面相互作用及能级映射关系入手，为形变条件下的电学稳定性提供可靠设计准则^[2]。

2.2 现有设计方法在分子层面的阐释不足

目前柔性电子器件的设计还是靠经验反复试错，主要靠调整工艺参数、开展宏观力学测试来完成迭代。这类方法把柔性当成材料或者结构自带的属性，用弯曲半径、循环寿命等宏观指标，间接判断器件是否可靠。但形变状态下器件电学性能下降，根源是分子堆积秩序被破坏、链段滑移、界面

态重构等微观过程，宏观参数没法传递这些微观信息^[3]。只在单一尺度做优化，没法建立应变状态和电荷传输势垒之间的物理联系，让设计改进找不到明确方向。

针对这一不足，学界用量子化学计算、分子动力学模拟来获取微观层面信息，只是这类方法大多局限于理想化的孤立体系，还没和器件级力学场分布建立系统关联。构象变化、极化效应和宏观应变之间，存在着明显的多尺度耦合作用，现有设计工具却把不同尺度分开处理，让分子机理没法转化为可落地的工程准则。要填补这一差距，就得搭建“分子物理机理—连续介质力学”的跨尺度描述框架，把分子模拟得到的构象-势垒关系对应到有限元应变场里，为柔性电子器件设计提供有物理依据的预测方法^[4]。

2.3 分子构象变化与极化效应对性能的耦合影响

柔性电子器件的宏观电学响应会呈现非线性与多值性，源于分子链段构象变化和极化效应的相互作用。外力施加后，分子链会出现旋转、伸展或折叠动作，共轭骨架的平面性也跟着改变，这会直接调整载流子跳跃需要的活化能，链段重排带来的局域电场重构还会改变分子能级排列，让极化效应和构象变化相互叠加。构象变化与极化效应不是单独影响电荷输运，而是靠动态的构象-极化互锁机制共同作用于势垒高度和界面注入效率，让实验里观测到的电学性能衰减无法用单一机制解释。这类耦合和瞬态过程高度相关，外力卸载后部分构象恢复会伴随极化弛豫，形成滞后效应，永久滑移的链段则会保留残余极化，两种过程相互交织，让器件响应偏离简单的线性叠加。现有表征手段没法实时区分构象和极化各自的作用，连续介质模型又没法描述分子内坐标，这让定量分离两者的难度比较大。这一问题的核心是构象转变速率和极化弛豫时间尺度相近，两者在外场激励下存在竞争关系，分子堆积的有序程度还会决定耦合强度的空间分布。为解决这一难题，本文需要发展融合分子力场与极化力

场的多尺度描述框架,在分子模拟里实时追踪链段二面角的演化,同步求解局域极化电荷的再分布,建立构象有序度、极化强度与宏观迁移率之间的对应关系,为器件性能预测提供具备分子分辨能力的分析基础^[5]。

3 分子物理机理与数理设计融合的分析框架

3.1 分子有序堆积与电荷传输的内在关联分析

柔性电子材料里载流子的输运路径与效率,完全由分子的有序堆积情况决定。现阶段多数研究重点放在共轭分子平面化堆叠对迁移率的提升上,柔性形变带来的堆积序畸变却常被简化处理。真实环境中的分子排列存在晶界、错位以及动态热振动,让电荷传输同时存在跳迁与能带输运两种机制,过程较为复杂。现有分析大多依靠静态构型,没能系统性阐释堆积有序度与传输效率的耦合关系。这是因为分子间弱相互作用对堆积模式敏感度高,哪怕微小链段转动都能改变轨道重叠积分,改变载流子跃迁几率。解决这一问题要从分子堆积序参量入手,建立有序度与电荷传输效率的定量关联,再用多尺度建模把分子排列特征转化为器件电学响应,给柔性电子设计提供可操作的物理判据。

3.2 分子间相互作用与界面稳定性的数理描述

分子间相互作用能是衡量界面结合稳度的核心物理量,范德华力、氢键及 $\pi-\pi$ 堆叠等作用共同组成该能量,形变状态下界面应力分布会调整分子间距离与排列方向,改变相互作用能的原有平衡状态。当前多数研究用静态能量分解的方式评估界面粘附能力,没考虑应力梯度对局部相互作用势垒造成的不均扰动。应力集中区域常出现分子间滑移与脱粘情况,现有连续介质模型无法体现短程相互作用能的空间涨落。这是因为界面稳定性不能仅用单一能量极小值来表示,要同时考虑分子构象协同重排与应力传播路径的影响。研究方向需建立相互作用能密度与界面应力张量的耦合方程,把分子间扰动转化为界面失稳判断标准,为柔性器件的层间结

合设计提供数理基础。

3.3 能级排列与器件宏观电学响应的映射关系

分子能级排列和器件宏观电学响应之间的联系,目前一般用前线轨道能量、能隙及界面偶极层等参数,对电荷注入与输出特性做定性说明。这类关联分析大多基于静态平衡构型展开,把能级偏移当成线性响应,却没考虑形变引发的分子轨道再杂化与极化涨落。柔性基底弯曲时,能级会随局部应变出现不均匀移动,单一能带模型没法呈现空间分布的离散化特征,宏观电学参数会偏离预期数值。

这种现象的出现,是因为分子能级不是独立的固有数值,会同时受到分子堆积密度、链段取向和界面电荷转移的调控,形变发生时这些因素会一起变化,进而产生能级钉扎和移动相互作用的复杂情况。具体解决方式为引入能级空间分布函数,把局域态密度和应变场关联起来,再借助载流子输运方程,将分布的变化转化为宏观电流响应,完成分子能级到器件电学行为的跨尺度对应。

4 形变条件下柔性电子性能衰减的分子机制与成因剖析

4.1 分子链段滑移引起的载流子输运退化机制

柔性电子器件反复弯折时,分子链段的相对滑移会引发载流子输运性能退化。柔性屏、可穿戴传感器已能在低弯折半径环境下实现基础功能,电学性能却会随弯折次数增加出现明显衰减。弯折产生的剪切应力作用于分子间弱相互作用区域,让共轭链段沿应力方向出现不可逆滑动,局部堆积状态从有序变为无序。相邻链段间的 π 轨道重叠程度会被这种滑移直接改变,局部态密度重新分布,带尾态密度上升,载流子跳跃势垒提高。链段滑移带来的构象畸变还会中断分子内电荷转移路径,拉低载流子迁移率。当前多数设计方法把柔性基底的应变当作连续均匀场,未在分子层面明确链段滑移与电子结构的耦合关系,无法准确预测不同弯折模式下的性能变化。

为解决该问题,需将分子链段滑移轨迹与量子化学计算所得态密度关联,建立“滑移量—局域态密度—宏观输运系数”的映射,并通过分子构象限制或交联策略抑制滑移,从而在弯折条件下维持载流子输运的稳定性。

4.2 界面应力集中与局部态密度改变的关联

柔性电子器件的性能衰减,隐蔽源头是界面的应力集中区域。传统认知里只把裂纹萌生当作失效判定标准,本文则发现,应力集中不一定马上造成断裂,但足够改变局部原子的间距和键角,让电子云出现重排,使得局域态密度分布偏移。原本处于能带边缘的尾态被拉入带隙,形成浅能级缺陷态,这些态会俘获载流子,让局部迁移率下降。机械应力能通过电子结构通道转化为电学性能损失,且这一过程比可见形变晚发生,给可靠性评估造成困难。

本文针对柔韧性与电学性能协同优化的现有设计,大多围绕宏观应变均匀性展开,应力集中引发的电子态非均匀分布,尚未被列为设计考量因素。界面处化学键受压缩或拉伸时,原子轨道重叠程度会发生变化,局域态密度在空间上出现波动,不同位置的载流子跳跃几率也会产生差异。材料性能下降并非因为整体结构断裂,而是这些微区电子态不断退化造成的。应对这一问题的具体方案,是把应力场解析解和量子化学态密度计算结合起来,建立应力集中系数与局域态密度迁移量的解析关系,指导界面材料挑选与分子排列优化,让应力集中区域在电子结构层面拥有自补偿能力。

4.3 性能衰减与结构失效演化的主导因素辨析

性能衰减的核心原因是分子构象变化与界面效应,和宏观断裂那种瞬间损坏的作用逻辑不一样。目前的失效分析大多把裂纹扩展当作失效终点,但实际器件还没出现明显裂痕时,电学性能就已经变差,这是因为循环形变过程中分子链段出现扭转与滑移,打乱了共轭平面的有序堆积,阻断了 π 电子

的离域路径。界面区域对变化的感应比较强,应力集中会让分子间距离出现波动,范德华相互作用变弱,电荷传输跃迁的概率降低。这类原子尺度的变化不断累积,逐步改变能级排列与局域态密度,最终体现为宏观电学响应出现不可逆的偏移。

当前的设计方法比较关注整体的应变承受能力,没把分子构象变化当成单独的失效情况。本文将分子动力学构象统计与界面键合强度评估纳入可靠性准则,把构象恢复率与界面电子耦合保留率当作性能衰减的判断标准,区分实际断裂失效与隐性性能退化,给分层设计指明明确方向。

5 基于分子物理机理的分层次设计策略与应用展望

5.1 从分子构型优化到电路级应变分布评估的设计思路

柔性电子设计领域,分子尺度与电路尺度的方法体系长期互不关联。材料研发侧重分子构型修饰,器件设计依靠连续介质力学模型,两类工作没有有效对接,让复杂形变场景下的性能预测与实测结果出现比较大的偏差。这类问题的核心,是分子构象变化到宏观应变分布的过程中,缺少跨尺度的物理关联机制与参数传递逻辑。本文需搭建分层次设计流程,把几何结构优化、分子堆积行为、载流子输运路径与电路级应变场评估整合进统一框架。上游以分子构型调整为基础,中游搭建构象变化与局部电学响应的映射关系,下游结合应变分布数据修正电路模型,形成自上而下的递进优化闭环。

目前的运作流程里,不同尺度之间大多靠单一向量传递信息,没考虑可逆的反馈机制。分子链段滑移这类微观活动会重新分配局部应力,让电路的应变分布受到反向作用。设计环节要加入反馈迭代机制,让电路级的评估结果能够倒推修正分子构型参数,还要把分子有序度、界面结合强度等指标融入应变分布计算,推进材料到系统的协同优化能力,缓解柔韧性与电学性能相互制约的瓶颈。

5.2 连续介质理论与量子化学方法衔接的互补优势

连续介质理论擅长描述宏观层面的应变与应力分布,量子化学方法能解析分子构象与电子结构的微观特性,二者在柔性电子设计领域原本可形成互补,却长期处于不同的尺度研究范畴。实验观测在时间与空间分辨率上存在局限,形变过程里分子构象变化如何逐步转化为宏观电学响应,一直没有直接证据支撑,使得跨尺度机理的认知存在空白。

这种脱节是因为不同尺度的信息没有顺畅的传递渠道。连续介质模型没法容纳分子层面的极化与堆积信息,量子化学计算也不能直接给出电路级的应变分布。解决办法是搭建衔接机制:把量子化学方法算出的分子间相互作用参数、能级信息,转换成连续介质模型可用的等效输入,再用连续介质计算得到的局部应变状态,倒推分子构象的变化走向。这种双向传递让微观机理与宏观力学行为形成闭环,在实验观测达不到的地方补全物理图像的完整逻辑。

5.3 面向复杂变形条件的可靠性评估与设计准则

复杂变形条件下的可靠性评估,长期存在判定依据单一的问题。现行测试标准大多将宏观应变阈

值或循环次数设为失效判断标准,柔性电子器件承受弯折、拉伸、扭曲等复合载荷时,局部应变状态和整体变形不存在简单的对应关系。处于同一宏观形变水平时,不同分子堆积方式带来的内应力响应有比较大的差异,仅依靠宏观参数,没法准确划分可恢复变形与不可逆损伤的临界边界。出现这一问题是因为失效过程涉及多层次物理变化,分子构象改变、链段滑移、界面脱粘等现象常常一同发生,而现行准则无法直接感知微观结构的演化状态,使得寿命预测结果出现比较大的偏差。

面对这类难题,靠分子物理机理建立的可靠性准则,不能只盯着单一力学指标。设计者可以用量子化学方法,拿到分子间相互作用势和构象转变能垒,再结合连续介质模型给出的应变场分布,找到形变状态下局部内应力和分子稳定性的对应规律。当某区域应变导致分子构象偏离程度快碰到能量回复阈值时,就能确定该处已进入失效风险范围,把器件寿命和分子尺度的可逆性边界绑定到一起。这套准则能给复杂载荷谱下的可靠性评估提供物理层面的支撑,还能帮柔性电子跳过经验设计阶段,搭建机理性寿命预测的方法框架。

参考文献

- [1] 李茸,步文勇.南湖锻造柔性电子产业硬实力[N].浙江日报.2026-06-07.
- [2] 柔性电子关键材料羧基丁腈橡胶(XNBR)研发及首次工业应用[J].石化技术与应用,2026(03):111-114.
- [3] 高建伟,李致朋,李鹏,韩楠楠,肖仪卓,刘宣佑.人工智能赋能的柔性电子前沿交叉学科教学探究[J].北京师范大学学报(自然科学版),2026(02):194-198.
- [4] 胡锦坤,盛鸿伟,马凌霄,李峰峰,毕华盛,邵明娇,雷沛明,张亚雄,兰伟.柔性电子材料与器件的跨学科研究:能源、传感与生物电子[J].中国科学:物理学、力学、天文学,2026(05):198-208.
- [5] 缪春洋.AI技术时代柔性电子力学教师角色重塑研究[J].知识窗(教师版),2026(03):59-69.



Copyright © 2025 by author(s) and Quest Press Limited.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



分子数学与物理

Journal of Molecular
Mathematics and Physics

CODEN: FZSXBI

ISSN 3105-7454(P) ISSN 3105-7462(O)

doi <https://doi.org/10.66106/fzxxbi.20250203>

分子数学、物理与电子信息学科的交叉演进与未来发展综述

张明昭

锦州市数据中心, 辽宁锦州, 121000

摘要: 分子数学、物理与电子信息学科相互交叉融合, 已形成分子结构表征、量子态调控、分子信息处理等多个层次的研究方向, 只是目前各分支还在各自独立发展, 概念体系、数学工具与物理解释之间没建立统一的对应关系, 让跨学科成果难以整合。现有研究大多着眼于具体技术环节, 没从方法论层面系统梳理三者的内在关联, 尤其没能打通从分子尺度信息载体到电子信息功能实现的逻辑链条。出现这一问题, 主要是因为各学科长期遵循不同的范式传统与研究目标, 数学侧重形式结构, 物理关注实在规律, 电子信息强调功能实现, 学科间术语壁垒比较大, 交叉研究多依赖个案探索, 缺少稳定的框架。为了缓解上述困境, 本文以“分子尺度信息处理”作为统一方向, 尝试把分子数学中的代数与拓扑方法、物理中的量子力学与统计力学描述以及电子信息学科中的信号与编码概念放进同一分析框架, 从概念映射、理论对接与功能导向三个层面梳理交叉融合的内在逻辑。

关键词: 分子信息; 交叉演进; 学科整合

Review on the cross evolution and future development of molecular mathematics, physics and electronic information

Mingzhao Zhang

Jinzhou Data Center, Jinzhou Liaoning 121000, China

Absrtact: Molecular mathematics, physics and electronic information disciplines are integrated with each other, and multi-level research directions such as molecular structure characterization, quantum state regulation, and molecular information processing have been formed. However, at present, each branch is still developing independently, and there is no unified corresponding relationship between conceptual system, mathematical tools and physical interpretation, making it difficult to integrate interdisciplinary achievements. Most of the existing researches focus on the specific technical links, and fail to systematically sort out the internal relations of the three from the methodological level, especially fail to get through the logical chain from the molecular scale information carrier to the realization of electronic information functions. The main reason for this problem is that various disciplines have long followed different paradigm traditions and research objectives, mathematics focuses on formal structure, physics focuses on real laws, electronic information emphasizes the realization of functions, inter disciplinary terminology barriers are relatively large, interdisciplinary research relies more on case studies, and lacks a stable framework. In order to alleviate the above difficulties, taking “molecular scale information processing” as the unified direction, this paper attempts to put the algebraic and topological methods in molecular mathematics, the description of quantum mechanics and statistical mechanics in physics, and the concepts of signal and coding in electronic information science into the same analysis framework, and sort out the internal logic of cross integration from the three levels of concept mapping, theory docking and function orientation.

Keywords: molecular information ; cross evolution ; discipline integration

1 交叉演进的研究现状：从分子结构表征到电子信息功能的多层次脉络

1.1 分子结构表征的数学与物理基础

用代数和拓扑方法，能从原子连接方式、对称特性等维度，给分子结构表征搭建一套规范描述体系，量子理论则依托电子波函数、能级结构的分析，为分子相关物理解释筑牢核心依据。这两类方法共同构成分子信息表达的底层框架，但目前数学抽象逻辑与物理实际情况之间，还存在比较大的差距。代数不变量无法直接对应可观测的电子运动状态，量子描述涉及的对称性破缺，要转化为拓扑特征也没有明确规则可循。出现这类问题的核心原因是，数学和物理两门学科长期各自发展，数学领域更关注结构分类，物理领域聚焦相互作用研究，双方的术语、概念体系完全不兼容。要填补这类学科间的割裂，得在分子表征环节搭建代数符号与量子算符的对应关联，让拓扑分类与电子结构描述能共用一套规范语言，为后续分子信息处理提供逻辑自洽的起点。

仔细分析后可以发现，分子拓扑不变量能描述分子骨架的连通性与手性，但没法直接传递电子态的相位信息，量子化学计算得出的电子密度与轨道能级，又没法精简成全局拓扑特征。研究对象的尺度有差异，数学工具侧重普适分类，物理模型依赖具体近似，这些原因共同造成了上述偏差。解决该问题要搭建以分子尺度信息为核心的统一描述框架，把代数拓扑中的同调类与量子态的空间对称性绑定，用群论作为衔接语言，将分子结构表征从静态几何层面升级到动态量子信息层面，让数学与物理在分子电子学研究中实现真正的协同。

1.2 量子态调控与分子信息处理

分子尺度的信息存储与逻辑操作，可依托量子的相干叠加和纠缠特性实现，目前已有研究能在特定分子体系里制备、读取量子态，完成基础的相干操控。分子量子态会和环境耦合，让退相干情况出

现，信息保真度因此存在不足，单分子量子行为向可扩展信息处理架构的过渡，还没有有效的实现方案。这类问题的根源是量子物理与分子工程的研究方向不匹配：量子物理侧重孤立系统的态演化，分子工程关注集成环境下的功能落地，使得相干调控策略和分子设计规则互不关联。本文需把量子态调控融入分子结构设计，以电子自旋与振动模的协同作为信息载体，开发适配分子尺度的纠错与读出机制，让相干性质成为可设计的分子功能参数。

1.3 电子信息功能中的分子技术应用

分子器件的电子输运特性和分子通信的化学信号机制，各自遵循不同的描述逻辑，前者依托量子隧穿与能级匹配，后者依靠扩散反应与分子识别，二者在时间尺度与能量尺度上都存在错位。造成这种情况的原因是，电子信息工程的宏观设计规则无法直接应用到分子层面，分子科学领域又没有针对信息处理的功能抽象框架。打破当前困境，要以分子内电荷转移和构象变化为共通物理基础，搭建统一的信号表征与转换规则，把器件响应与通信协议一同纳入分子信息链路设计，完成从单分子功能到系统集成的跨越。

2 并行发展状态下的整合困境：概念、工具与成果相互割裂

2.1 概念体系与术语对应缺失

不同学科研究分子时，各自用一套独立的概念体系，数学靠图论或拓扑语言刻画分子结构，物理从哈密顿量或态密度切入定义电子行为，电子信息主要研究分子器件的等效电路与信号传输参数。同一分子在不同学科的文献里是完全不同的形式化对象，让跨学科读文献时没法建立对应关系，也不能直接套用彼此的模型。这种术语割裂不是简单的命名不一样，而是各学科长期发展中围绕自身研究问题搭建了自洽的抽象层，抽象层之间没有明确的转换规则。数学里的连通性、曲率等概念，和物理里的能级、跃迁矩等物理量之间没有系统的映射关

系, 电子信息常用的阻抗、增益等指标, 也没法对应到分子结构的具体数学表征。破解这一困境, 要以分子本体为核心, 理清各学科概念的适用范围与操作含义, 搭建分层的术语对应表, 再形成同义概念的统一描述, 为跨学科交流打造共同的概念基础。

2.2 数学工具与物理解释脱节

现在的分子研究里, 数学工具和物理诠释各自发展。代数拓扑与群论能细致描述分子对称性与连接关系, 可它的抽象结构常和哈密顿量的具体谱项不相关, 没法说明对应哪种能级劈裂或跃迁选择定则。量子态密度与跃迁偶极矩等物理量缺少简洁的代数载体, 让从分子波函数到器件电流-电压特性的推导环节, 每一步都得靠人工近似。这种脱节的根本原因是两套体系的历史分工: 数学侧重结构完备性, 物理关注可观测量的演化规律, 两者从没一起建立共同的研究对象。电子信息学科要提取载流子迁移率、阈值电压等工程参数时, 量子态信息往往没法直接对应成等效电路模型里的元件值, 工程师只能回到唯象拟合。解决方式是用分子量子化学计算做中间环节, 把代数不变量和谱学可观测量逐个对应, 再经粗粒化处理得出宏观输运参量, 建立从数学结构到物理解释再到工程参数的明确转换规则。

2.3 跨学科成果缺乏有效整合

当前分子信息处理的各研究分支, 大多只在自身学科领域内发表成果、开展验证, 不同分支的研究内容没有关联。结构表征、量子态操控与电子信息应用这三个方向, 各自形成独立的研究体系, 都依照本领域的标准来验证成果有效性, 跨环节的衔接机制缺失。分子信息处理原本要覆盖从结构编码到量子操作再到电学读出的完整流程, 可当前各分支得出的结论无法兼容, 局部环节的验证结论不能支撑整个流程的逻辑成立。造成这种情况的原因是, 学科发表体系更认可本领域内的研究成果, 跨学科整合需要额外投入成本转换专业语言、开展验

证, 却很难获得同等程度的学术认可^[1]。解决问题要以分子尺度的信息流为核心, 搭建统一的验证框架, 让各分支的研究成果成为信息链上可对接的组成模块, 还可设置交叉验证节点检验环节衔接的一致性, 实现各分支研究的真正整合。

3 范式差异与交叉方式: 目标分殊导致个案化探索

3.1 学科范式与研究目标差异

数学范式把公理化形式结构作为核心, 看重抽象层面的一致性与逻辑上的完备性, 物理范式主要关注可观测的客观规律, 重视因果机制的梳理与实验环节的验证, 电子信息范式围绕信号传输与功能落地来展开, 追求系统效能提升与工程层面的可行性。面对同一个分子研究对象, 三类范式的问题切入点完全不同: 数学家会着重研究分子拓扑与对称群, 物理学家会探究电子态及粒子间的相互作用, 电子信息领域的研究者则直接关注分子能不能当作逻辑开关或存储单元。目前三类范式都已积累大量研究成果, 但极少在同一研究场景下开展相互校准^[2]。

这种差异不是观察角度的表层区别, 而是研究目标的本质分歧。数学的成立无需依托物理层面的具象呈现, 物理规律不会随着具体器件的变化而改变, 电子信息的功能实现也不对数学的严谨程度提硬性要求。交叉研究大多只能针对具体个案推进, 既没有统一的评价标准, 也缺乏通用的转换规则。学科分化的发展历程让不同领域的研究者养成了固定的思维模式, 现有的评价机制又让各学科之间的边界变得更清晰。打破当前的困局, 要把分子尺度信息处理作为共同的核心锚点, 搭建概念映射与术语对应的体系, 让数学形式可以精准表述物理过程, 物理模型能够直接服务功能实现, 最终构建出可共享的分析框架^[3]。

3.2 术语壁垒与知识转换规则缺失

不同学科分子科学文献各有一套体系, 同一个概念常会被给不同名字, 或是同一个术语在不

同场景下指代不同事物。数学文献用符号定义和定理来表述内容,物理文献重点关注可观测量与哈密顿量,电子信息文献则运用能带、开关比或信号完整性等工程术语。跨学科阅读相关文献时,读者得自己推断概念或术语的对应关系,可这类推断没有统一标准,很容易出现误读和无效引用。学科边界处积累的知识没法被可靠复用,相关成果看起来不少,却很难融入彼此的论证逻辑,这就是当前存在的问题^[4]。

出现这种情况的原因是,各学科在长期研究实践中形成了只在内部通行的默会知识,术语的具体含义和特定的研究问题绑定,没特意为跨领域的读者预留理解通道。本文提出的解决方案是构建明确的概念映射表与术语转换规则,让数学形式、物理量纲和工程参数在分子尺度信息处理框架下拥有统一的转换标准,降低跨学科协作时的理解难度,为知识共享搭建可落地的规则基础。

3.3 交叉节点依赖个案式探索

现在在分子层面开展电子信息研究,已有不少成功案例,但这些成果大多绑定特定材料体系与实验条件,没法推广到其他体系。不同研究团队为解决自身面临的问题,常会在数学表达、物理图像与工程参数之间临时搭建对应关系,这类关系藏在具体操作里,没形成能公开核验的规则。案例数量看起来不少,可真正能被后续研究借鉴的却不多。出现这一问题,是因为不同学科对“有效”的判定标准存在比较大的差异,数学看重结构的普适性,物理看重机制的可观测性,电子信息看重功能的稳定性,三者在同一个案例里相互让步,却没沉淀出通用的对接层级。解决问题的思路是从成功实践里提取跨案例的抽象共性,建立覆盖建模、计算、表征、验证各环节的方法论指导,让交叉领域的探索从单个案例的经验,转变为可学习、可复制的规范流程。

4 深层成因追溯:学科分化历史与认识论惯性

4.1 学科长期分化形成研究惯性

近代以来,数学、物理、电子信息这三门学科各自独立建立体系,形成了比较封闭的知识积累模式。分子结构表征在数学领域属于图论与群论范畴,在物理领域依靠量子力学方法开展,在电子信息领域则重点关注信号编码与器件响应,三者研究的是同一个分子对象,但受学科边界限制很少开展交流。这种学科分化让研究者习惯在本学科现有范式内解决问题,不会主动去对接跨领域的概念。当出现分子尺度信息处理的需求时,现有学科框架没办法直接覆盖相关内容,让数学工具、物理模型与工程实现之间出现对接缺口。学科分化不仅划分了知识分类的方式,还固化了问题求解的固定路径,让研究者更倾向从本学科经典案例里找答案,而非重新构建跨学科问题。要打破这一惯性,可从学科教育阶段开始建立分子的共识性描述,设置跨领域轮转机制,让知识积累模式从封闭转向开放。

4.2 学术评价与交流机制制约交叉研究

现行学术评价体系里,期刊分区、项目指南基本按学科边界划分,分子数学、物理、电子信息领域的相关成果常被归到不同类别。跨学科研究成果很难划入单一学科目录,参与评审时总会遇到归属不清、评判标准不符的问题。项目资助机构更愿意支持本学科核心研究方向,像分子尺度信息处理这类交叉领域的选题,会被他们当成边缘项目。学术交流也受这种体系限制,各领域的会议、期刊、课题体系相互独立,研究者没有共同的交流语言和成果展示平台。这类问题的根源是固化的评价指标和同行评议制度,它们框定了学科边界,交叉成果没法在单一学科框架里衡量价值,合作双方也没法提前确定成果归属和学术收益。这种顾虑会降低研究者开展跨界合作的意愿,还会让研究方法、数据、结论没法在学术共同体里流通。解决这类问题可搭

建跨学科评审专家库，完善专项交流机制，制定交叉成果认定规则，调整评价体系里只以传统学科为基准的惯性，为共享研究空间提供制度保障。

4.3 方法论层面缺少统一分析框架

分子数学、物理与电子信息都已形成完善的形式体系，但一直没有建立起从分子尺度信息处理切入的元理论与组织原则。数学聚焦结构抽象，物理侧重量子态演化，电子信息关注功能实现，三者对核心对象“信息”的定义、度量与操作方式存在差异：数学里的符号关系没法对应物理中的可观测量，物理中的态叠加也没法直接转化为电学中的逻辑状态。缺乏统一框架的情况下，跨尺度的映射与转换只能依靠研究者的个人经验，方法可迁移性弱，成果呈现碎片化特征。

这一问题的出现，是因为学科长期分化后，各自形成了不同的概念起点和论证标准，数学以代数结构为基础，物理从哈密顿量切入研究，电子信息则依托能带与输运展开工作，学科间缺少能互通的底层表述方式。解决该问题可从分子信息单元着手，明确最小信息状态及其变换规则，让数学结构、物理机制与电学功能在同一体系里一一对应，建立共享术语表与转换规范，在课程内容中加入跨学科方法论训练，推进元理论转化为各方可共用的分析工具。

5 未来路径构建：以分子尺度信息处理为核心的统一框架

5.1 概念映射与术语规范化

分子数学、物理、电子信息三类学科交叉研究时，不同学科概念体系不兼容，已成为科研人员直接的沟通阻碍。同一个数学对象，在不同学科里的叫法和实际含义常常不一样，比如希尔伯特空间在物理领域用来描述量子态，在电子信息领域对应的是信号空间，分子结构表征里的构型空间又和前两者有部分重合。这类术语对应关系不明确，让研究者没法精准传递问题核心，还阻碍分子信息处理理

论的统一搭建。

各学科长期独立发展，各自形成一套自洽但无法互通的语言体系，这是当前困境的核心缘由。数学聚焦抽象结构，物理看重可观测的量，电子信息主打信号变换与编码，针对同一个分子对象，不同学科提取的核心要素完全不一样。本文要建立一套跨学科术语对照体系，围绕分子尺度信息处理展开，逐一梳理态矢量、特征值、能级和比特、调制、映射的对应关系，明确概念层级与限定条件，让不同学科背景的研究者能在统一框架下开展协作。

5.2 理论对接与数学物理框架统一

代数拓扑、量子描述与信息编码现在各自遵循一套独立的形式化体系，分子结构的不变量表述、电子态演化的算符语言和信号传递的编码规则，三者之间没有能互通的数学基础。同一物理过程没法在这三种框架里得到相同的表述，同调群用来描述形状，密度矩阵用来描述状态，码本用来描述比特关系，它们既没有共同的范畴对象，也没有一致的态射规则。造成这种情况的原因是，各领域在构建形式化体系时，只围绕自身可观测目标展开，没有提前设置跨领域对接的接口。

本文搭建一套围绕分子尺度信息处理的统一形式框架，把分子拓扑不变量设为信息编码的语义限制条件，把量子态用作信息的物理承载载体，把代数算符定为状态转换的生成元。用代数拓扑里的同调类标识分子结构类型，用量子力学的酉演化刻画态空间内的信息流转，用编码理论中的代数结构明确可区分与可纠错的判定标准。三种语言在范畴层面归整为对象、态射与函子的对应关系，让分子结构表征、量子操控目标与信息传输需求能对应到同一数学对象的不同维度，为跨学科理论对接提供可落地的形式基础。

5.3 功能导向的协作与教育路径

现在跨学科协作大多围绕自身课题开展，电子信息领域的功能需求只是作为应用场景被提出来，

没真正带动不同学科的理论融合。分子结构表征、量子态调控与信息编码在课程和项目里相互独立,学生和研究者只掌握各自领域的部分工具,没法把功能目标转化为统一的理论设计标准。目前没有以功能为核心的知识整合方式,这让数学、物理与电子信息学科的研究成果,没法在同一个设计任务里衔接起来。出现这种情况是因为现有培养体系按照学科逻辑设置课程,不是根据功能需求倒推需要用到的概念与方法。以电子信息的功能需求为核心,可以搭建反向课程映射体系:从分子器件的信息处理指标入手,推导需要用到的分子结构不变量、量子演化规则与编码约束,再把这三者整合成结构化的知识模块。课程设定时设置分子尺度信息处理综合项目,让学生在同一个问题中,同时运用代数拓

扑标记分子特征、量子算符描述态演化、编码理论定义可区分性,还能在功能验证过程中实现不同学科概念的互通。我们可以建立跨学科工作坊,由电子信息方向明确功能约束,数学与物理方向提供形式化工具,共同设计接口规范,逐步形成共享术语表与转换规则,让功能需求真正成为理论整合与协作路径的核心。

6 结语

本文开展这项研究,是为多学科交叉找出一套可复制的整合方案,帮研究者弄清不同知识体系的转换规则与互补条件,为电子信息技术的分子化发展提供理论参考,还为相关课程教学及后续研究搭建结构化的知识框架。

参考文献

- [1] 侯园园. 基于深度学习的分子物理属性预测[D]. 中国优秀硕士学位论文全文数据库,2022.
- [2] 孟庆田. 原子分子物理与光物理学研究进展概述[J]. 山东师范大学学报(自然科学版),2020(01):25-29.
- [3] 薛敏珉. 纳米和生物界面结构及性能调控的分子物理力学研究[D]. 中国博士学位论文全文数据库,2018.
- [4] 周天寿,唐云. 分子系统生物学的数学建模与分析[J]. 数学建模及其应用,2017(01):52-58.



Copyright © 2025 by author(s) and Quest Press Limited.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>





长江文库

综合性学术知识服务平台



· 长江文库 · 智汇知识 · 赋能学术

期刊·图书·古籍·学位论文·地方志·会议文献
覆盖全学科·服务全机构



「长江文库」一个汇聚海量学术资源的综合性知识服务平台。集期刊、古籍、地方志、图书、年鉴、会议论文、报纸于一体，覆盖自然科学、农业科学、医药科学、工程与技术科学、人文与社会科学五大学科。从专业出版服务到公共知识传播，我们连接历史与未来，服务全球学术研究与文化传承。

访问官网：www.cjwk.cn



龙源网APP
「名刊甄选」套餐会员



读杂志,就上龙源网

可回溯往期杂志,还可阅享1000多种精品期刊数字内容

【限时活动】订阅「龙源网」app「名刊甄选套餐」年会员,可专享“**第二年会费1元**”

【套餐介绍】套餐内囊括180+种热门杂志

详细杂志清单可扫描右侧二维码了解

【费用说明】首年会费198元/年,第二年1元,合计199元

扫码立即订阅



龙源网阅读卡专门针对机构以及企业用户采购使用。内含付费阅读余额可购买龙源期刊网网页端以及移动端相关知识付费服务内容。并享受企业用户采购折扣价。

订卡企业微信

