

В этом выпуске:

ГРАФЕН

Дефект Стоуна-Уэльса в графеноподобных нитрид-борных/углеродных гетероструктурах

Дефект Стоуна-Уэльса представляет собой дефект в углеродных наноструктурах, образующийся при повороте одной связи С–С относительно ее центра на угол 90°. Оригинальная работа Э. Стоуна и Д. Уэльса [1] посвящена исследованию такой трансформации в фуллерене C₆₀, поэтому изначально дефект Стоуна-Уэльса считался особенностью лишь углеродных систем: фуллеренов, нанотрубок, графена. С появлением графеноподобных 2D-материалов, таких как гексагональный нитрид бора, силицен и фосфорен, а также “фуллеренов” и “нанотрубок” на их основе, дефект Стоуна-Уэльса (SW) можно трактовать более широко, определив его аналогичным образом, в том числе и для этих соединений. В работе [2] наши соотечественники из Иркутска (ИГУ) рассмотрели образование дефектов SW в нитрид-борных/углеродных гетероструктурах (GBNC) и с помощью компьютерного моделирования в рамках теории функционала плотности определили их структурные характеристики, энергию образования и химическую активность. GBNC представляет собой графеноподобный двумерный материал с четкой границей раздела между фазами графена и нитрида бора (рис. 1).

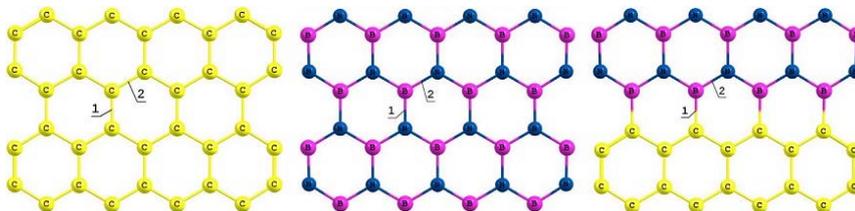


Рис. 1. Фрагменты графена (слева), гексагонального нитрида бора (в центре) и графеноподобной нитрид-борной/углеродной гетероструктуры (справа). Цифрами 1 и 2 обозначены “прямые” и “наклонные” связи, соответственно.

Дефекты SW авторы получали посредством поворота на 90° связи В–С (SWI) (или В–N (SWII)), ближайшей к границе раздела (рис. 2).

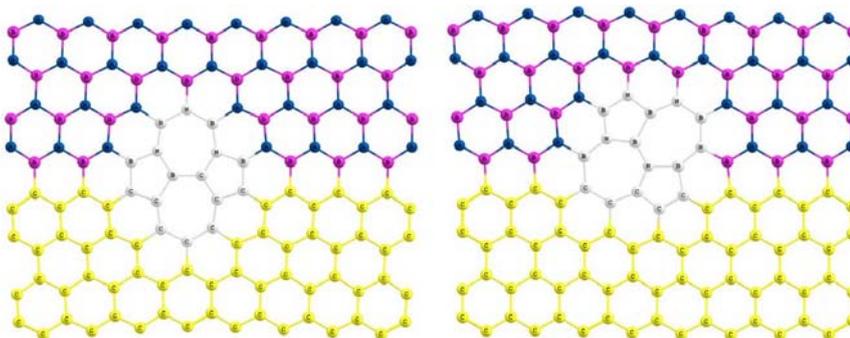


Рис. 2. Оптимизированные GBNC (C₆₈B₃₄N₃₄H₃₂) с дефектами Стоуна-Уэльса, образующимися при повороте “прямой” 1 (слева) и “наклонной” 2 (справа) связей (см. рис. 1). Дефекты Стоуна-Уэльса помечены серым цветом.

И далее ...

МУЛЬТИФЕРРОИКИ

- 2 Чисто антиферромагнитная память – отменяя все лишнее

НАНОТЕХНОЛОГИИ

- 3 Нанобионика растений.
Добавки углеродных нанотрубок в листья шпината позволяют обнаружить взрывчатые вещества в почве

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

- 5 Нитрид-борные фуллерены для литий-ионных аккумуляторов

ТОРЖЕСТВО

- 5 Кручинину
Сергею Павловичу – 60 лет!

КОНФЕРЕНЦИИ

- 6 25th International Symposium “Nanostructures: Physics and Technology”, June 26-30, 2017, St. Petersburg, Russia

The New Generation in Strongly Correlated Electron Systems, September 4-8, 2017, ICFO, Barcelona, Spain

VI International Symposium Topical Problems of Biophotonics – 2017, 28 July – 03 August 2017, St. Petersburg – Nizhny Novgorod, Russia

Оказалось, что по сравнению с чистыми графеном и нитридом бора длины межатомных связей в GBNC дефекте SW немного больше, а энергии их формирования в GBNC занимают “промежуточное” положение между соответствующими величинами составляющих ее 2D-материалов. При этом энергии образования как дефекта типа SWI, так и SWII возрастают при увеличении эффективных размеров рассматриваемых образцов. Химическую активность авторы оценивали по энергии реакции присоединения радикала $\text{CH}_2\cdot$ в различных точках границы раздела как к идеальной GBNC, так и GBNC, содержащей дефект Стоуна-Уэльса. Энергию связи, определяли стандартно как разность полной энергии соответствующего двумерного материала с адсорбированным радикалом и суммы энергий составляющих компонентов. Они выяснили, что даже бездефектные GBNC гетероструктуры проявляют повышенную химическую активность по сравнению с графеном и гексагональным нитридом бора, а наличие дефекта SW, независимо от его ориентации, способствует еще большему ее увеличению. Таким образом, дефекты Стоуна-Уэльса можно рассматривать в качестве так называемых точек привязки на GBNC гетероструктурах для их дальнейшего агрегирования с различными соединениями, что может оказаться полезным для создания устройств современной микро- и нанoeлектроники. *М.Маслов*

1. *A.J. Stone and D.J. Wales, Chem. Phys. Lett. 128, 501 (1986).*
2. *I.K. Petrushenko and K.B. Petrushenko, Comp. Mater. Sci. 128, 243 (2017).*

МУЛЬТИФЕРРОИКИ

Чисто антиферромагнитная память – отменяя все лишнее

С самого открытия магнитоэлектрического эффекта в середине прошлого века ему прочили применения в компьютерной памяти. Однако нашлось множество причин, препятствующих его внедрению: относительно малые величины эффекта при комнатных температурах, малая или полностью отсутствующая спонтанная намагниченность, утечки за счет конечной проводимости. В попытках бороться с этими негативными факторами конструкция прототипов ячеек памяти постепенно становилась все более сложной и многослойной. Команда ученых из университетов Германии и Швейцарии [1] решила вернуться к изначальной простоте: слой магнитоэлектрика, электроды и никаких дополнительных магнитных слоев. Что показательно, в качестве демонстрации принципа они выбрали не “раскрученный” мультиферроик феррит висмута, а самый первый из открытых магнитоэлектриков – Cr_2O_3 .

Зачем вообще, ранее требовались дополнительные слои? Дело в том, что магнитоэлектрики, как и большая часть мультиферроиков, относятся к антиферромагнитным материалам, в которых магнитные подрешетки полностью компенсируют друг друга (как в Cr_2O_3) или характеризуются слабым ферромагнетизмом, как в феррите висмута. Поскольку наличие заметной намагниченности считалось необходимым атрибутом запоминающего устройства, то большая часть усилий была направлена на создание гетероструктур, в которых слой мультиферроика был бы обменно связан со слоем ферромагнетика (см. обзор [2]).

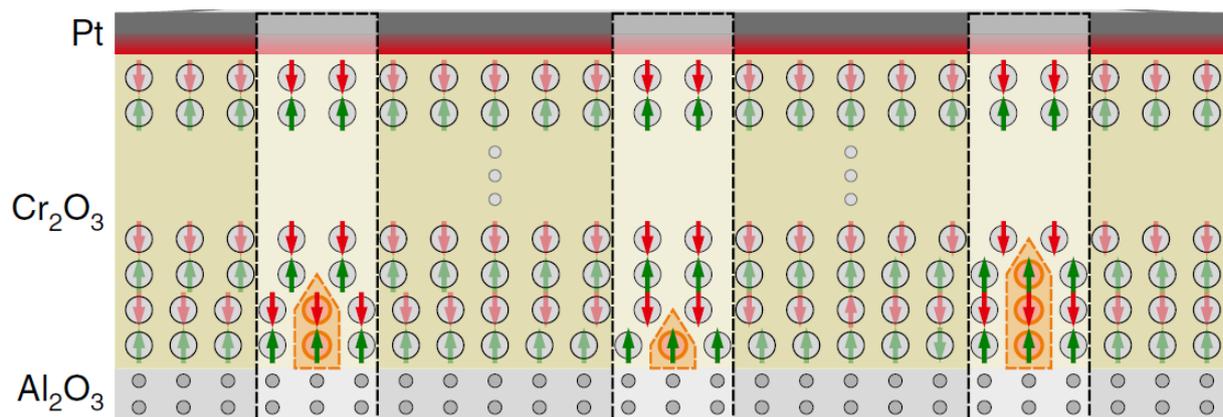


Рис. 1 Элемент магнитоэлектрической памяти произвольного доступа: Pt – электрод из платины, Cr_2O_3 – магнитоэлектрический слой, Al_2O_3 – подложка.

Однако антиферромагнитный параметр порядка может сохранять память о состоянии элемента ничуть не хуже намагниченности, и уже найден способ считывания этого состояния – с помощью аномального эффекта Холла [3]. Тогда отсутствие макроскопического магнитного момента превращается

из недостатка в достоинство: исчезает взаимное воздействие соседних битов друг на друга за счет магнитных полей рассеяния, а также на два порядка снижаются управляющие напряжения, необходимые для переключения элемента: с сотни до полувольта [1].

Таким образом, в антиферромагнитной памяти ферромагнетизм переходит из разряда желаемых эффектов в паразитные, возникающие при выращивании Cr_2O_3 на подложке с иной постоянной решетки. Образовавшиеся дислокации, при нечетном числе атомов, выступают как источники нескомпенсированных магнитных моментов (рис.1). Как показали авторы [1], варьируя материал подложки можно добиться уменьшения паразитного магнетизма на два порядка.

А. Пятаков

1. T.Kosub et al., *Nature Comm.* **8**, 13985 (2017).
2. M.Trassin, *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 033001 (2016).
3. T.Kosub et al., *Phys. Rev. Lett.* **115**, 097201 (2015).

НАНОТЕХНОЛОГИИ

Нанобионика растений. Добавки углеродных нанотрубок в листья шпината позволяют обнаружить взрывчатые вещества в почве

Шпинат может передавать людям информацию о взрывчатых веществах в почве. Достаточно добавить в листья одностенные углеродные нанотрубки (ОСНТ). Таков результат исследований американских ученых [1].

Точнее, сенсором являются нанотрубки, “обёрнутые” пептидом Vombolitin-II. В своих предыдущих работах исследователи показали, что присоединение нитроароматических взрывчатых веществ к комплексу ОСНТ-Vombolitin меняет структуру пептида, и это приводит к тушению флуоресценции нанотрубок в ближней ИК-области [2]. В новой работе такие наносенсоры с помощью безыгольного шприца были внедрены в листья живого растения, обычного шпината. ОСНТ, покрытые поливиниловым спиртом, ввели в другую половинку листа в качестве эталонного сенсора, т.к. их флуоресценция не меняется в присутствии нитроароматических веществ. В почву добавили пикриновую кислоту (2,4,6 тринитрофенол), которая обычно используется во взрывчатых веществах. Вместе с почвенными водами это соединение проникло в корни и примерно через 10 мин добралось по стеблю до наносенсоров в листьях (там пикриновая кислота концентрируется, т.к. испаряется медленнее воды), рис. 1.

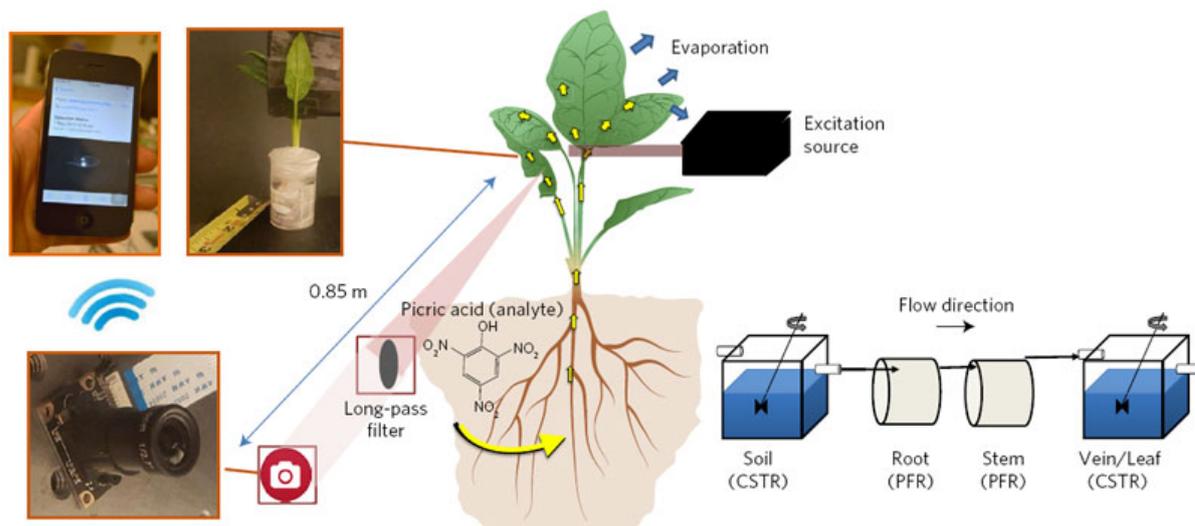


Рис. 1. Дистанционное обнаружение пикриновой кислоты в почве с помощью нанобионического шпината. На листья с нанотрубками воздействует лазерное излучение (785 нм, 15 мВт). Показана Raspberry Pi CCD камера, передающая сигнал пользователю. Справа – модель растения в виде последовательных реакторов, имитирующих почву, корень, стебель, прожилку/лист (CSTR – непрерывного действия с перемешиванием, PFR – идеального вытеснения).

Флуоресценцию наносенсоров, возникающую под действием лазерного излучения (785 нм, 15 мВт), регистрировали на расстоянии 0.85 м с помощью камер двух типов. Для лабораторных испытаний использовали камеру Princeton Instruments OMA V с InGaAs детектором. Для демонстрации возможности дистанционного детектирования с помощью

недорогого портативного устройства использовали миниатюрный (размером с банковскую карту) компьютер Raspberry Pi с CCD камерой, ИК-фильтр которой был удален (этот вариант показан на рис. 1). Важно, что изображения в реальном времени можно периодически передавать по электронной почте пользователю, находящемуся на большом

расстоянии (Raspberry Pi поддерживает Wi-Fi). Для обеих камер использовали 900 нм фильтр, пропускающий только флуоресценцию нанотрубок в ближней ИК-области.

С помощью InGaAs детектора интенсивность флуоресценции наносенсоров для нескольких растений измеряли в течение 80 мин с интервалом в 1 минуту (рис. 2). В контрольном опыте, когда в почву до-

бавляли раствор без пикриновой кислоты, интенсивность флуоресценции обоих наносенсоров в течение всего времени не менялась (рис. 2а). В опыте с пикриновой кислотой интенсивность флуоресценции комплекса ОСНТ-Vombolitin заметно снизилась, а эталонного сенсора не изменилась (рис. 2б,с).

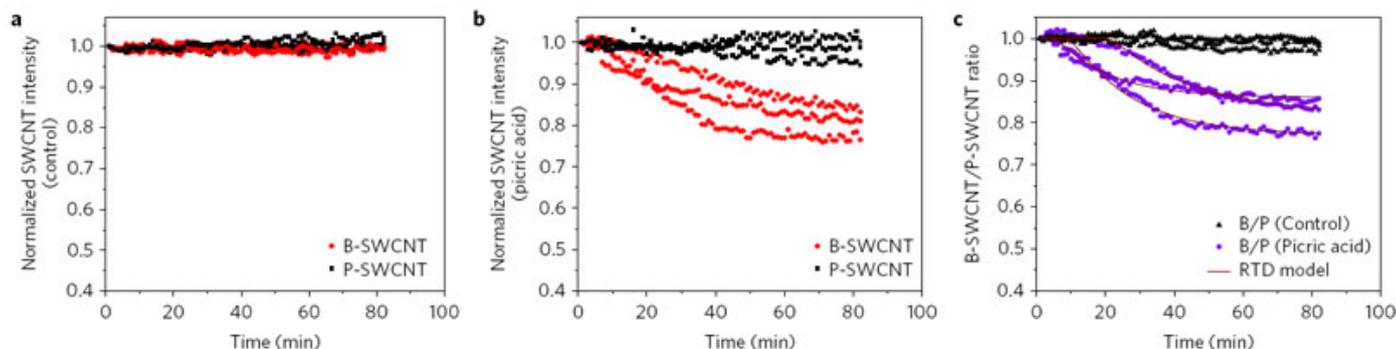


Рис. 2. Измерение интенсивности флуоресценции эталонного сенсора (P-SWNT) и модифицированного сенсора (B-SWNT). На листья с нанотрубками воздействует лазерное излучение (785 нм, 15 мВт). **а.** В почву введен контрольный раствор. Интенсивность флуоресценции не меняется. **б.** Пикриновая кислота приводит к тушению флуоресценции комплекса ОСНТ-Vombolitin. **с.** Отношение интенсивностей В/Р. Приведена также расчетная кривая (модель RTD).

С помощью системы Raspberry Pi с Si детектором тоже можно контролировать изменение интенсивности флуоресценции в присутствии пикриновой кислоты в почве. Результаты представлены на рис. 3. Съемку вели каждые две минуты. Снижение отношения интенсивностей В/Р несколько меньше, чем для детектора InGaAs. По-видимому, это связано с тем, что Si детектор чувствителен к длинам волн до 1100 нм, а InGaAs – до 1600 нм.

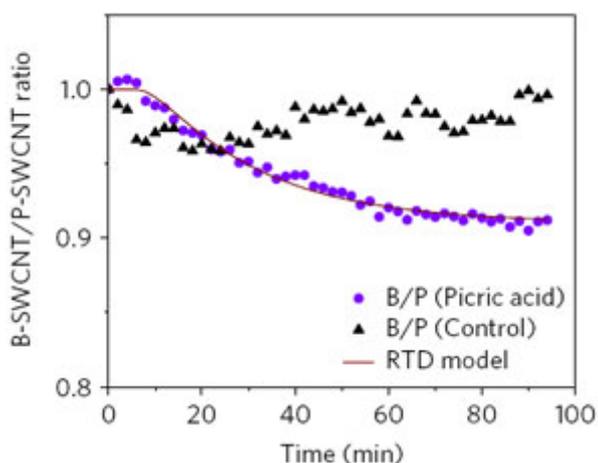


Рис. 3. Отношение интенсивностей флуоресценции В/Р для контрольного опыта и опыта с пикриновой кислотой. Использована система Raspberry Pi с CCD камерой без ИК-фильтра. Сплошная линия соответствует расчетам по модели RTD.

Авторы предложили RTD (residence time distribution) модель растения в виде последовательности реакторов двух типов (непрерывного действия с перемешиванием CSTR и идеального вытес-

нения PFR (рис. 1)) и рассчитали распределение времени передвижения пикриновой кислоты по разным частям растения. Суммарное время передвижения по корням и стеблю по оценкам оказалось равным 8.3 мин, а по листу пикриновая кислота перемещалась со скоростью 1.9 мм/мин. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными (рис. 2с и рис. 3).

Авторы [1] впервые продемонстрировали, что нанотрубки можно использовать для создания из растений нанобионических* сенсоров для обнаружения взрывчатых веществ в почве в реальном времени. Контролировать изменение интенсивности флуоресценции можно с помощью недорогого оборудования. В принципе годится смартфон, только с камерой без ИК-фильтра. Подход можно распространить и на другие соединения, попавшие в почву. Дикорастущие растения способны реагировать на малейшие изменения в почве или воде, и предложенные авторами [1] сенсоры могут осуществлять экологический мониторинг. Но это, скорее всего, дело отдаленного будущего. Более реальное использование – получение биологами и агрохимиками новой информации о жизни растений.

* *Нанобионика растений – новое направление в науке, которое позволяет благодаря использованию нанотехнологий/наноматериалов придать растениям дополнительные, не свойственные им функции*

О. Алексеева

1. M.H.Wong et al., *Nature Mater.* **16**, 264 (2017).
2. D.A.Heller et al., *PNAS* **108**, 8544 (2011).

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

Нитрид-борные фуллерены для литий-ионных аккумуляторов

Сразу два независимых коллектива из Ирана предлагают использовать фуллерены на основе бора в качестве элементов литий-ионных батарей [1, 2]. В рамках теории функционала плотности авторы рассмотрели взаимодействие чистого фуллерена B_{40} с атомами и ионами лития (рис. 1) [1], а также предприняли попытку улучшить производительность аккумуляторных блоков с помощью химической модификации нитрид-борных фуллеренов $B_{12}N_{12}$ путем пассивации атомов бора водородом и внедрения ионов фтора в фуллереновую клетку (рис. 2) [2].

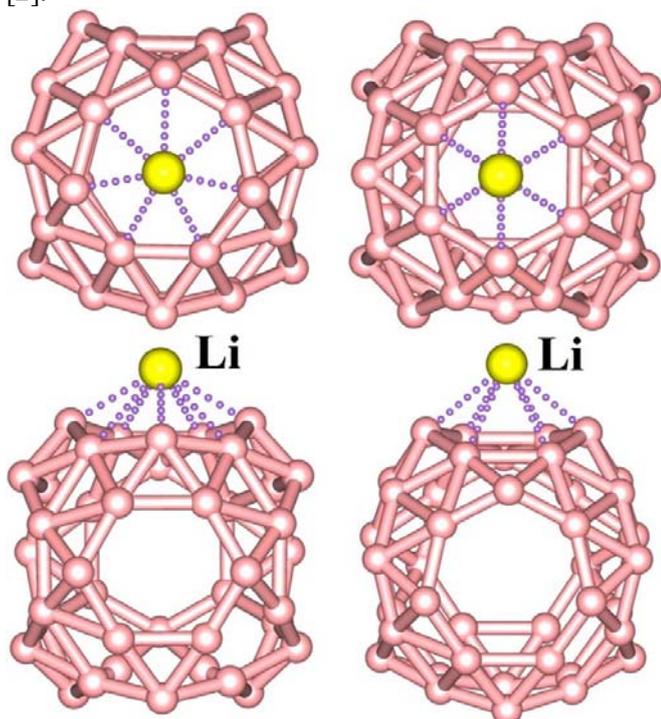


Рис. 1. Атом лития, адсорбированный на поверхности борного фуллерена B_{40} : вид сверху и сбоку

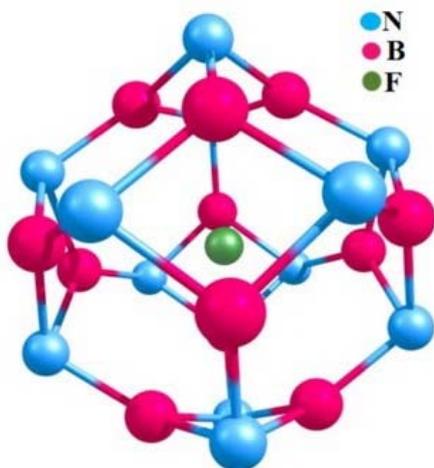


Рис. 2. Молекулярная структура эндоэдрального комплекса $F^-@B_{12}N_{12}$

Все расчеты в обоих случаях исследователи проводили в программе GAMESS. Однако, если для моделирования чистого B_{40} использовался целый набор функционалов B3LYP, M06-L, M06, M06-2X и M06-HF и базис 6-31G(d), то для исследования структур на основе $B_{12}N_{12}$ применялся лишь традиционный B3LYP с аналогичным базисом. В итоге, проанализировав взаимодействие Li и Li^+ с B_{40} , авторы работы [1] пришли к выводу, что взаимодействие фуллерена с катионом лития значительно сильнее, чем с нейтральным атомом металла. Дополнительный анализ электронных и энергетических характеристик фуллеренов B_{40} свидетельствует о том, что они вполне подходят для применения в литий-ионных батареях в качестве материала анода. При этом, напряжение ячейки оценивается в ~ 530 мВ. В работе [2] показано, что нитрид-борный фуллерен $B_{12}N_{12}$ демонстрирует большую производительность с электрохимическим напряжением ячейки порядка 1 В. Внедрение же отрицательно заряженного иона фтора внутрь фуллереновой клетки еще повышает напряжение до 3 В (гидрирование, напротив, не приводит к какому-либо усиливающему эффекту), что, по заверениям авторов [2], существенно выше, чем у классических фуллеренов, углеродных нанотрубок и функционализированных VN-слоев. Таким образом, вполне возможно, что нитрид-борные фуллерены в будущем займут определенную нишу при создании литий-ионных аккумуляторов нового поколения.

М.Маслов

1. M. Moradi et al., *Physica E* **89**, 148 (2017).
2. J. Hosseini et al., *J. Mol. Liq.* **225**, 913 (2017).

ТОРЖЕСТВО

Кручинину Сергею Павловичу – 60 лет!



Кручинин С.П. – хорошо известный физик-теоретик в области ядерной физики, теории твердого тела, сверхпроводимости, нанофизики; ученик академика НАН Украины Давыдова А.С.

Кручинин С.П. – автор и соавтор 100 научных работ, опубликованных в известных научных журналах. Также им опубликованы монография “Modern aspects of superconductivity: theory of superconductivity” (изд-во “World Scientific”, Сингапур) и учебники “Теория поля” и “Введение в квантовую и атомную физику” (НАУ).

Под его редакцией было издано 7 книг в издательстве “Springer” (Германия), два научных журнала в “World Scientific” (Сингапур) и научный журнал в издательстве “Quantum Matter” (США).

Кручинин С.П. является членом редакционных коллегий международных журналов “Quantum Matter” (США), “Reviews in Theoretical Science” (США),

“Progress in Nanotechnology and Nanomaterials” (США).

Поздравляем Сергея Павловича с юбилеем, желаем ему крепкого здоровья и дальнейших творческих успехов на благо физической науки!

КОНФЕРЕНЦИИ

25th International Symposium “Nanostructures: Physics and Technology”, June 26-30, 2017, St. Petersburg, Russia

The annual International Symposium on Nanostructures is chaired by two Nobel Prize laureates — Professor Zh. Alferov and Professor L. Esaki, and organized together with the St Petersburg Academic University, Submicron Heterostructures for Microelectronics Research and Engineering Center of the RAS, Foundation for Support of Education and Science (Alferov's Foundation), Ioffe Institute and ITMO University which are pioneering in many directions of this impetuously developing area.

The aim of the 25th Symposium is to focus on the newest achievements in physics, technology and applications of solid state and life nanostructures and bring together various scientific groups actively working in these very important directions. The Symposium scientific program will cover a wide spectrum of physical phenomena, studied by the participants from both basic and applied point of view. The technological aspects related to nanostructures are also presented.

Topics

The symposium program will cover different aspects of semiconductor nanostructure research. We are seeking for contributions in the following list of topics:

- Technology of Nanostructures: Growth, Self-Organization and Nanopatterning
- Atomic-scale Characterization of Nanostructures
- Electrical, Magnetic and Optical Properties of Nanostructures (including Spin-Related Phenomena, Graphene, Many Particle Effects, Infrared and THz Phenomena)
- Nanostructure Device Applications in Electronics, Spintronics and Computing
- Nanophotonics, Microcavity and Photonic Crystals: Properties, Characterization and Applications
- Emerging Materials in Nanostructures (including Semiconductors, Oxides, Metals, Ferromagnetics, Carbon-based, Polymer and Biomaterials)

- Nanostructures and Life Sciences
- Metamaterials

Please, note that the last abstract submission deadline is **March 3, 2017**.

By March 3, 2017 authors are requested to:

1) fill in the online Registration Form

<http://nano.spbau.ru/>

2) upload a pdf-file of an extended abstract, which will be evaluated by the Program Committee.

For further information about the Symposium and details of abstract submission please visit the Symposium website at <http://www.ioffe.ru/NANO2017/>

The New Generation in Strongly Correlated Electron Systems, September 4-8, 2017, ICFO, Barcelona, Spain

Topics

- * Non-Equilibrium Quantum Dynamics
- * Correlation effects in Topological Insulators and Spin-Orbit Coupled systems
- * Strong correlations in nanoscopic systems
- * Quantum Magnetism
- * Unconventional Superconductivity

Abstract submission now open – closing date for oral submissions is 18th May.

Website: <http://ngscs2017.icfo.eu>

VI International Symposium Topical Problems of Biophotonics – 2017, 28 July – 03 August 2017, St. Petersburg – Nizhny Novgorod, Russia

We invite you to take part in the International Symposium “Topical Problems of Biophotonics” (TPB-2017) to be held in Russia this summer. It is a continuation of the previous TPB symposia held in the period from 2007 to 2015 that attracted leading experts in the field from around the world. The upcoming Symposium will be devoted to recent progress in the interrelated fields of biophotonics with applications to systems of different origin. Following the established tradition it will include several topical conferences and workshops.

Deadline for submitting registration forms and summaries **05 March, 2017**.

Website: <http://www.biophotonics.sci-nnov.ru/index.html>

Экспресс-бюллетень ПерсТ издается совместной информационной группой ИФТТ РАН и НИЦ «Курчатовский институт»

Главный редактор: И.Чугуева, e-mail: ichugueva@yandex.ru

Научные редакторы К.Кугель, Ю.Метлин

В подготовке выпуска принимали участие О.Алексеева, М.Маслов, А.Пятаков

Выпускающий редактор: И.Фурлетова

Адрес редакции: 119296 Москва, Ленинский проспект, 64^а