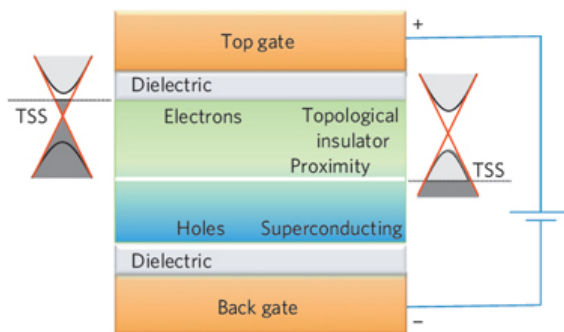


В этом выпуске:

СВЕРХПРОВОДНИКИ

BaBiO₃: от сверхпроводника к топологическому диэлектрику

Известно, что при дырочном допировании диэлектрика BaBiO₃ (например, при частичном замещении Ba/K или Bi/Pb) в нем возникает сверхпроводимость с достаточно высокой критической температурой $T_c \approx 30$ К. Расчеты из первых принципов показали [1], что при электронном допировании (например, при частичном замещении O/F) внутри запрещенной зоны должны образовываться топологические поверхностные состояния (TSS), которые представляют интерес для квантовой информатики и спинтроники. Если же из BaBiO₃ изготовить *p-n* переход (см. рис.), то эффект близости может индуцировать в TSS сверхпроводящую щель.



Схематическое изображение планарного контакта между топологическим диэлектриком (вверху) и сверхпроводником (внизу).

1. B. Yan et al., *Nature Phys.* **9**, 709 (2013).

КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ

Долгая жизнь квантовых битов в кремнии-28

Для практической реализации квантовых вычислений требуется надежная “квантовая память”, то есть способность кубитов сохранять свою когерентность в течение как можно более длительного времени. У ядерных спинов нейтральных атомов фосфора, играющих роль доноров в кремнии, это время может достигать $T_2 \approx 180$ с, но только при сверхнизких температурах. Нагрев даже до 10 К приводит к падению T_2 до нескольких миллисекунд. В работе [1] (Канада, Великобритания, Германия) показано, что ионизация доноров ³¹P в купе с изотопической очисткой ²⁸Si приводит к резкому росту T_2 – до 39 минут при комнатной температуре и нескольких часов при гелиевой. Причина в том, что удаление электронного спина (см. рис.) устраняет канал декогерентизации, связанный с флуктуациями электрического поля на электродах и на границе Si/SiO₂. Интересно, что при термоциклировании в интервале 4.2 К ↔ 300 К когерентность выживает.

И далее ...

- 2 Перепутывание света с механическим осциллятором

ГРАФЕН

- 2 Дефектообразование в октаграфене

МУЛЬТИФЕРРОИКИ

- 3 Магнитоэлектрики становятся разносчиками лекарств

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

- 4 Углеродные нанотрубки из...полиэтиленовых пакетов

- 6 Магия одностенных нанотрубок

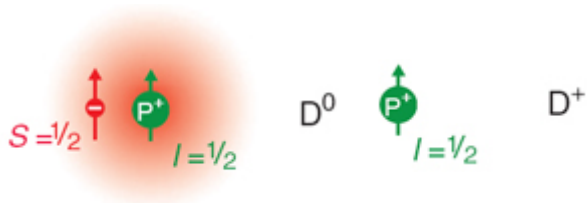
- 7 Получение УНТ в газовом разряде при различных ориентациях электродов

КОНФЕРЕНЦИИ

- 8 The European Conference Physics of Magnetism 2014 (PM'14), June 23-27, 2014, Poznan, Poland

Семинар по физике конденсированного состояния, 4 декабря 2013 г.

Авторы [1] рассматривают также возможность использования вместо фосфора других доноров, например халькогенов.



Спины и распределение заряда в нейтральном (D^0) и ионизированном (D^+) донорах фосфора.

1. K.Saeedi et al., *Science* **342**, 830 (2013).

Перепутывание света с механическим осциллятором

Мы уже привыкли к сообщениям о создании, исследовании и даже практическом использовании запутанных состояний квантовых объектов, таких как фотоны и атомные спины. Запутанность является специфической чертой квантовых систем, не имеющей аналога в классике. Тем интереснее результат, полученный в работе [1], авторы которой запутали СВЧ-излучение с механическим мезоскопическим устройством – осциллятором (алюминиевой мембраной диаметром 15 мкм и толщиной 100 нм, см. рис.).

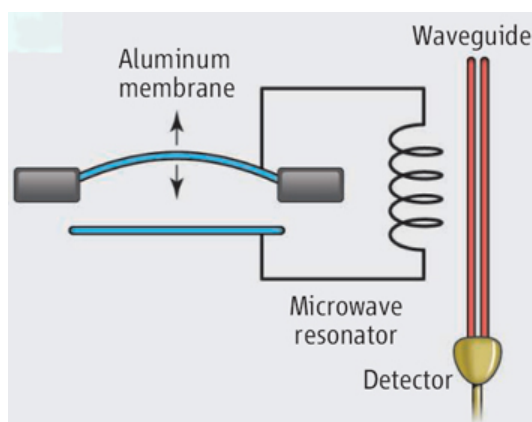


Схема эксперимента [1]

Нужно, конечно, понимать, что свет (фотоны) перепутывался не с осциллятором как таковым, а с его колебательными состояниями (фононами), которые при низких температурах (20 мК в [1]) подчиняются квантовым законам. Оптомеханическая запутанность может найти применение в квантовой информатике (например, для конструирования квантовой памяти).

По материалам заметки
 “Quantum mechanics tackles mechanics”,
 K.Hammerer, *Science* **342**, 702 (2013).

1. T.A.Palomaki et al., *Science* **342**, 702 (2013).

ГРАФЕН

Дефектообразование в октаграфене

Недавно был теоретически предсказан [1] новый квазидвумерный аллотроп углерода – октаграфен, в котором связи С-С образуют не шестиугольники, как в графене, а восьмиугольники и квадраты (рис. 1).

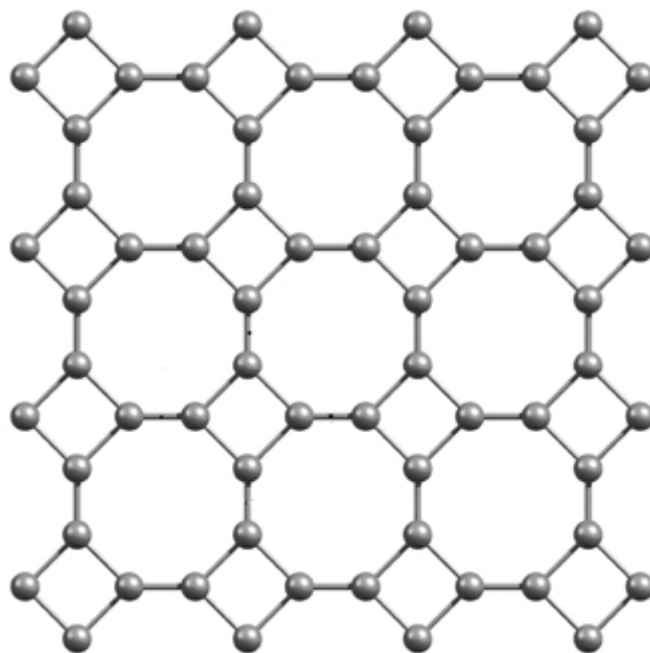


Рис. 1. Фрагмент октаграфена.

Согласно расчетам [1], энергия октаграфена в расчете на один атом больше, чем у графена, то есть он метастабильен по отношению к графену. Вопрос заключается в том, насколько такая метастабильная атомная конфигурация устойчива к нагреванию, и до каких температур октаграфен сохраняет свою структуру. Как показало численное моделирование методом молекулярной динамики [2], дефекты в октаграфене образуются при разрыве связей С-С, общих для смежных квадратов и восьмиугольников. Энергия активации разрыва одной такой связи довольно велика – около 2 эВ, поэтому даже при комнатной температуре скорость дефектообразования очень низкая, порядка 10^{-18} /(сек·связь). Казалось бы, термическая устойчивость октаграфена достаточно высока как для всестороннего исследования его физико-химических свойств, так и для практического использования. Однако выяснилось [2], что (в отличие, например, от графена и фуллерена C_{60}) дефекты в октаграфене не только не отжигаются, но и не остаются изолированными, а инициируют лавинообразное возникновение новых дефектов (рис. 2), причем за очень короткое время ~ 0.1 нс/дефект. Поэтому одного-единственного дефекта оказывается достаточно для почти мгновенного разупорядочения всего образца.

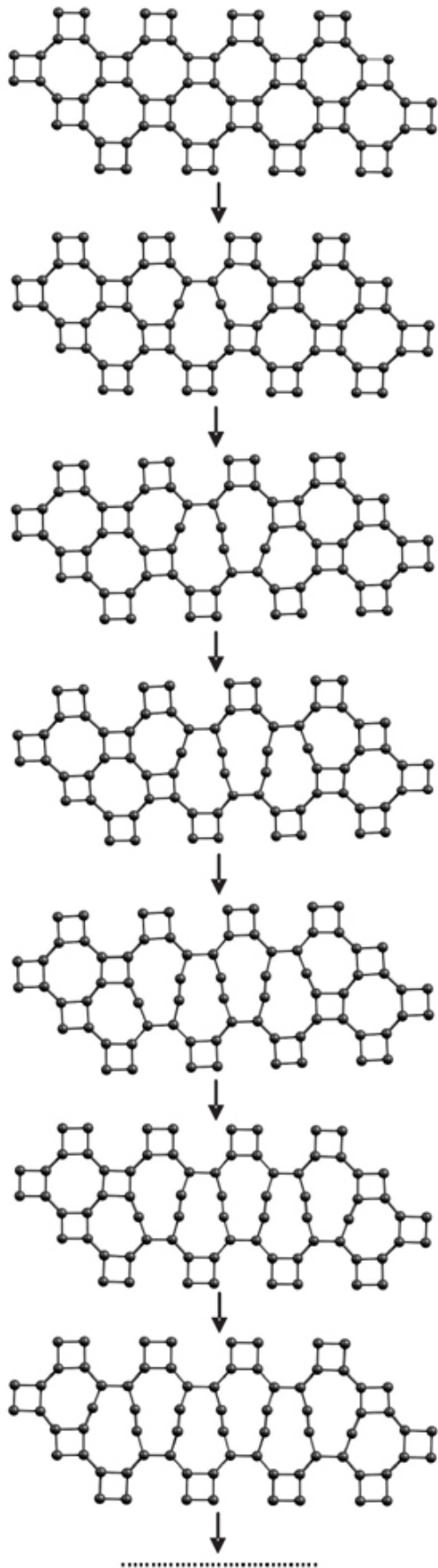


Рис. 2. Динамика развития дефектной структуры октаэдра после образования первого дефекта.

Л. Опенов

1. *J. Appl. Phys.* **112**, 074315 (2012).
2. *ФТТ* **55**, 2464 (2013).

МУЛЬТИФЕРРОИКИ

Магнитоэлектрики становятся разносчиками лекарств

К многочисленным “профессиям”, в которых обещают проявить себя магнитоэлектрические материалы, добавилась еще одна – доставка лекарств внутрь пораженных болезнью клеток: именно такое направление развивают американские исследователи из Florida International Univ. (США) [1].

Адресная доставка лекарств с помощью наночастиц является самой быстроразвивающейся областью приложений нанотехнологий в медицине. Наночастицы позволяют реализовать идею основоположника химиотерапии Пауля Эрлиха о “волшебной пуле” – лекарстве, которое избирательно воздействует на пораженные ткани, практически не оказывает влияния на здоровые клетки и тем самым существенно снижает побочные эффекты химиотерапии.

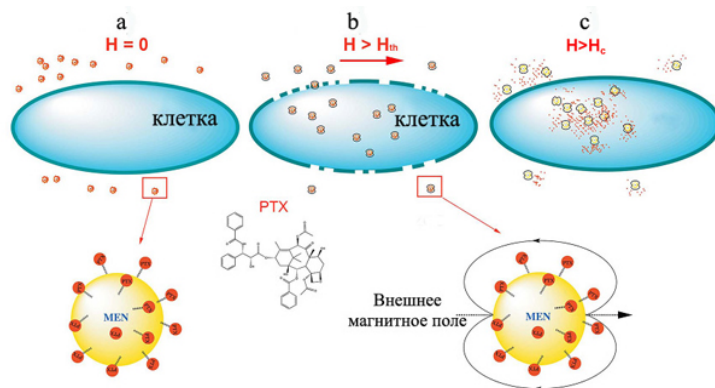


Рис. Механизм адресной доставки лекарства с помощью магнитоэлектрических наночастиц (MEN):

- а – магнитоэлектрические наночастицы, покрытые лекарственным препаратом паклитаксел (PTX), группируются вокруг клетки;
- б – при подаче магнитного поля выше порогового $H_{th} = 30$ Э частицы за счет своих локальных электрических полей проникают сквозь мембрану;
- с – сброс лекарства в поле больше критического $H_c = 70$ Э [1].

В случае внутриклеточной доставки лекарств этот процесс должен включать три стадии:

- 1) локализация наночастиц, несущих лекарство, на поверхности клетки;
- 2) проникновение частиц сквозь клеточную мембрану;
- 3) дистанционно управляемый сброс лекарства.

Как показали исследования [1], управляемые магнитным полем композитные частицы диаметром 30 нм с ядром из ферромагнетика $CoFe_2O_4$ и сегнетоэлектрической оболочкой из титаната бария $BaTiO_3$, прекрасно справляются с этими задачами (см. рис.). Локализации частиц может способствовать притяжение в области неоднородного магнитного поля (хотя медики обычно полагаются на более надежный способ – покрытие поверхности ан-

тителами, специфичными к антигенам вируса или злокачественного новообразования). Задача проникновения сквозь клеточную оболочку решается методом электроперфорации: магнитоэлектрические наночастицы оказываются замечательными преобразователями внешнего магнитного поля в сильно неоднородное электрическое поле высокой напряженности. Достаточно приложить постоянное магнитное поле всего в несколько десятков эрстед, чтобы получить электрическое поле, необходимое для образования поры в мембране. Наконец, управляемый магнитным полем сброс лекарства осуществляется также с помощью магнитного поля выше критической величины $H_c = 70$ Э, превышающей пороговое поле перфорации $H_{th} = 30$ Э. При этом важно не затронуть здоровые ткани, поэтому H_c не должно превышать H_{th} нормальных клеток, которое составляет величину 200Э, благодаря их большей сопротивляемости внешним воздействиям. Как показали эксперименты на колонии опухолевых клеток эпителия яичников эффективность доставки лекарств с использованием магнитоэлектрических наночастиц намного выше, чем во всех традиционно используемых способах, таких как непосредственное введение лекарства в питательную среду, использование наночастиц с покрытием из антител и магнитных наночастиц, разогреваемых переменным магнитным полем.

А. Пятаков

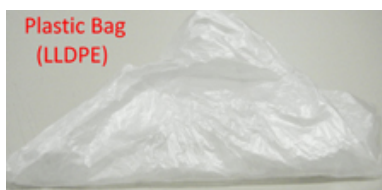
1. R.Guduru et al., *Scientific Reports*, 3, 2953 (2013).

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

Углеродные нанотрубки

из...полиэтиленовых пакетов

Загрязнение нашей планеты мусором в третьем тысячелетии стало глобальной экологической проблемой.



Заметную часть неразлагаемых отходов составляют полиэтиленовые пакеты. Это фасовочные пакеты в супермаркетах и других магазинах, пакеты для мусора и т.п. Каждый год в мире выбрасывают триллионы пакетов, несмотря на то, что в 40 государствах уже действуют запрет или ограничения на их производство и продажу. Гибнут птицы, животные, морские обитатели. В России официальных ограничений пока нет. По информации «РИА Новости» только в Москве ежегодно используется около ста тысяч тонн пластиковых пакетов, и лишь треть из них поступает на полигоны твердых бытовых отходов [1]. Оригинальный вклад в борьбу с неразлагаемым пластиковым мусором внесли ученые из Univ. of Adelaide (Австралия) и Taif Univ. (Саудовская Аравия) [2]. Они предложили «утилизировать»

полиэтиленовые пакеты, превращая их в ценный продукт – углеродные нанотрубки (УНТ).

Ученые собрали тонкие фасовочные пакеты в бакалейном магазине недалеко от университета в Австралии и использовали их как источник углерода (это пакеты из линейного полиэтилена низкой плотности LLDPE, один из них показан на фотографии в начале статьи). Нанотрубки получали методом CVD без катализатора в нанопорах предварительно синтезированной мембраны на основе анодного оксида алюминия NAAM (nanoporous anodic alumina membrane). Пакеты мыли жидким мылом, сушили, разрезали на кусочки 1 см^2 и помещали в CVD реактор вместе с NAAM. Схема нанотехнологического процесса представлена на рис. 1.

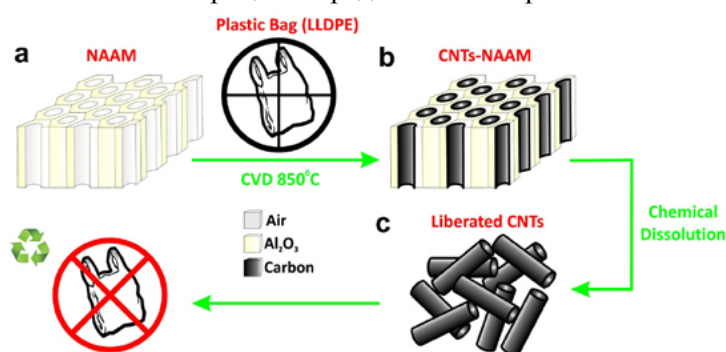


Рис. 1. Схема процесса синтеза УНТ:

а – NAAM, полученная путем электрохимического анодирования Al чипов;
 б – нанотрубки синтезированы в порах мембраны методом CVD при 850°C ;
 в – свободные УНТ после растворения матрицы в результате химического травления.

Полученные образцы изучали с помощью электронной микроскопии (рис. 2, 3), рамановской и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, элементного анализа EDXS.

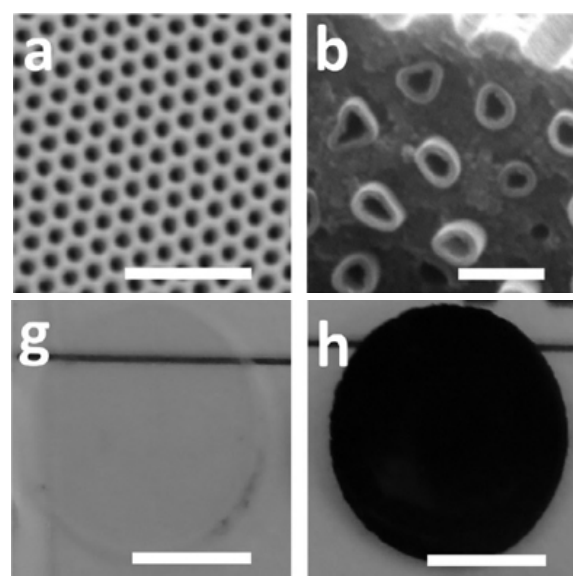


Рис. 2. SEM изображения (вид сверху): а – NAAM, шкала 500 нм; б – NAAM с углеродными нанотрубками, шкала 100 нм. Фотографии мембран до (г) и после (h) CVD процесса. Шкала 0.5 см.

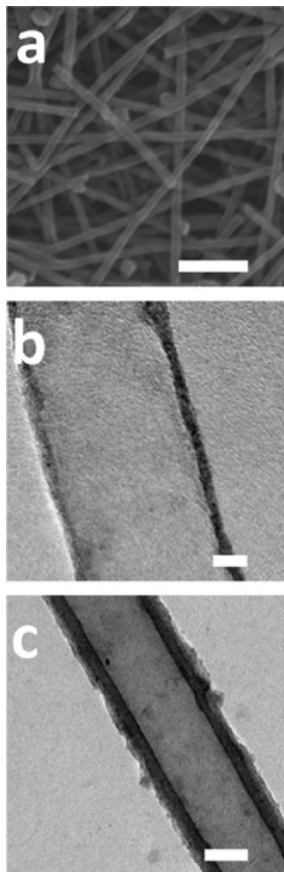


Рис. 3. SEM и TEM изображения свободных нанотрубок: а – SEM изображение;

б, с – TEM изображения УНТ при длительности синтеза 30 мин (шкала 10 нм) и 60 мин (шкала 20 нм), соответственно.

Толщина NAAM 52 мкм, диаметр пор 51 нм. В результате 30-минутного CVD синтеза при 850°C в порах формируются многостенные углеродные нанотрубки с толщиной стенок 4 нм. При увеличении времени синтеза до 60 мин толщина стенок достигает 9 нм, а внутренний диаметр, соответственно, уменьшается. Возможность менять диаметр важна для процессов разделения жидкостей и газов. Элементный анализ показал, что каких-либо посторонних примесей в материале мембраны нет. После растворения матрицы остаются свободные многостенные УНТ с открытыми концами (рис. 3), которые можно использовать для медицины, электроники и др. Исследователи подчеркивают, что применение пакетов из других типов полиэтилена даст тот же результат, т.к. химическая структура сходна. Предложенный метод синтеза углеродных нанотрубок имеет ряд преимуществ. Не требуются катализаторы и растворители – нет выделения вредных веществ. Процесс можно масштабировать. Не нужны дорогие источники углерода (например, газы высокой чистоты), их заменяют пакеты, загрязняющие природу.

Углеродные нанотрубки, благодаря своим уникальным транспортным свойствам, являются перспективным материалом для создания мембран для разделения газов, опреснения воды и других процессов (см., например ПерсТ [3,4]).

Авторы работы [2] изучили диффузию молекул через синтезированную ими мембрану NAAM с углеродными нанотрубками в порах. Они использовали водные растворы трех красителей (RosB^{2-} , $\text{Ru}(\text{BPY})_3^{3+}$ и RhoB как моделей отрицательно заряженных, положительно заряженных и нейтральных молекул, соответственно. Схема эксперимента показана на рис. 4. Градиента давления нет (обе ячейки заполнены раствором – на входе 3 мл раствора красителя, за мембраной 3 мл воды). Диаметр мембраны 2 мм.

Углеродные нанотрубки, благодаря своим уникальным транспортным свойствам, являются перспективным материалом для создания мембран для разделения газов, опреснения воды и других процессов (см., например ПерсТ [3,4]).

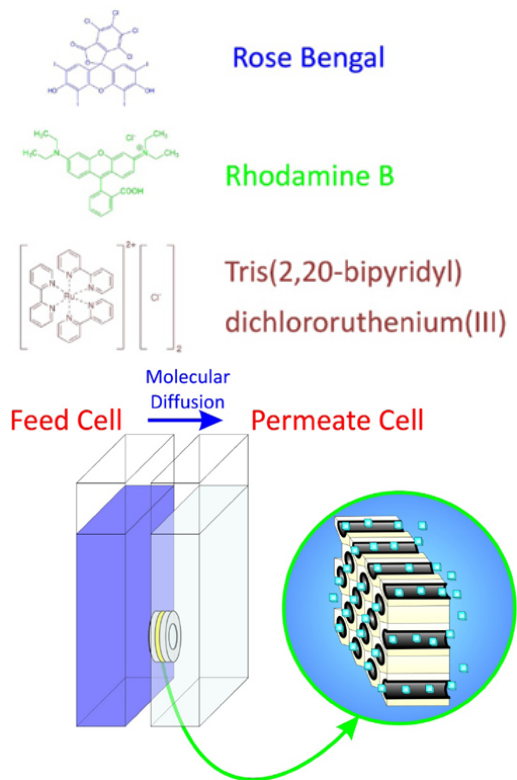


Рис. 4. Схема измерений молекулярной диффузии. Вверху структуры молекул красителей (RosB^{2-} , RhoB , $\text{Ru}(\text{BPY})_3^{3+}$ (сверху вниз).

Измерения показали, что диффузия молекул (RosB^{2-}) через мембрану с углеродными нанотрубками идет в 3 раза быстрее, чем через исходную NAAM (рис. 5а). Диффузия разных молекул через УНТ-мембрану происходит с разной скоростью; самая высокая у отрицательно заряженных молекул (RosB^{2-}) (рис. 5б). Отжиг при 900°C в атмосфере Ar приводит к снижению концентрации кислорода в УНТ (по данным XPS полученные нанотрубки содержат 13.5% кислорода, а после отжига около 5%) и, соответственно, к росту гидрофобности и увеличению скорости диффузии молекул $\text{Ru}(\text{BPY})_3^{3+}$ (рис. 5с).

На основании полученных результатов исследователи предположили, что мембраны с углеродными нанотрубками, синтезированными из полиэтиленовых пакетов, можно использовать для сложного процесса разделения смешанных растворов. Эксперимент со смесью $\text{Ru}(\text{BPY})_3^{3+}$ и RhoB (1:1) подтвердил это предположение – скорость диффузии $\text{Ru}(\text{BPY})_3^{3+}$ заметно выше, чем RhoB (рис. 5д). Интересно, что диффузия $\text{Ru}(\text{BPY})_3^{3+}$ из смеси происходит быстрее, чем из однокомпонентного водного раствора.

Конечно, было бы наивно предполагать, что найдено решение для утилизации пластиковых пакетов во всем мире. Тем не менее, предложенный нанотехнологический подход позволяет использовать часть вредных отходов для создания ценной продукции – углеродных нанотрубок и мембран на их основе.

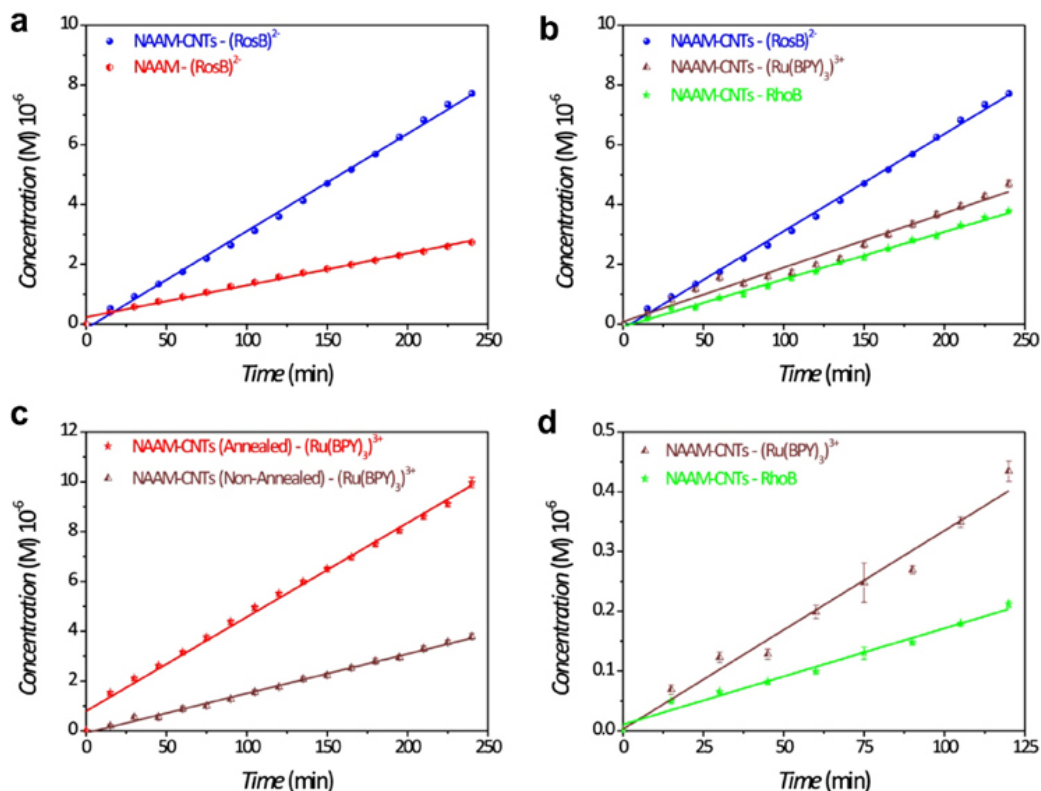


Рис. 5. а – Диффузия $(\text{RosB})^{2-}$ через NAAM и через мембрану с нанотрубками; б – диффузия $(\text{RosB})^{2-}$, $\text{Ru}(\text{BPY})_3^{3+}$ и RhoB через мембрану с нанотрубками; в – диффузия $\text{Ru}(\text{BPY})_3^{3+}$ через мембрану с нанотрубками до и после отжига; д – диффузия смеси RhoB и $\text{Ru}(\text{BPY})_3^{3+}$ через мембрану с нанотрубками.

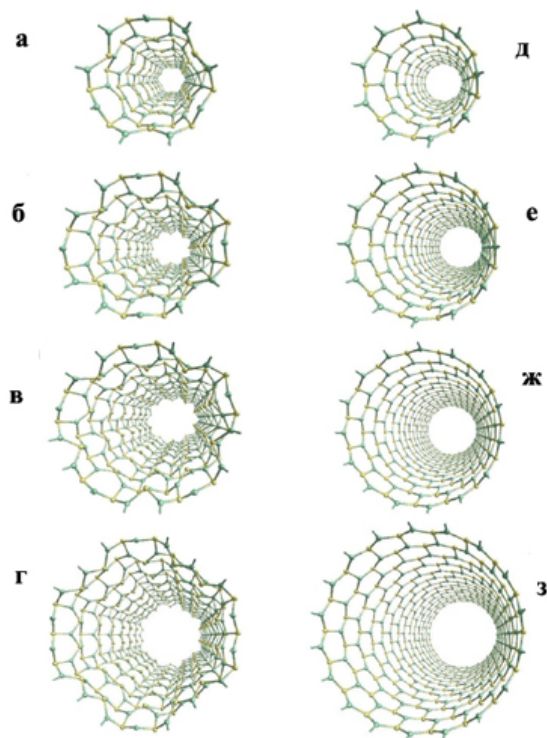
О. Алексеева

1. <http://lenta.ru/news/2013/06/03/ban/>
2. T. Altalhi et al., *Carbon*, **63**, 423 (2013).
3. *ПерсТ* **14**, вып. 22/23, с. 9 (2007).
4. *ПерсТ* **20**, вып. 19, с. 3 (2013).

Магия одностенных нанотрубок

Сразу стоит оговориться, что речь в работе [1] идет не о привычных углеродных нанотрубках, а о квазиодномерных наноструктурах сульфида цинка (ZnS). Авторы представляют подробный анализ энергетических и структурных свойств одностенных нанотрубок ZnS кресельного типа (m,m) с $m = 3-11$ и типа “зигзаг” ($n,0$) с $n = 3-18$. Все расчеты исследователи проводили в рамках теории функционала плотности (DFT) с использованием периодических граничных условий с помощью программного пакета VASP. Первоначальные геометрии трубок авторы получали, сворачивая графеноподобные гексагональные листы ZnS, которые затем подвергали особой механической деформации – моделировали, так называемый, механический отжиг и проводили процедуру структурной оптимизации (см. рис). В итоге исследователи обнаружили, что величина энергии деформации кресельных нанотрубок монотонно уменьшается с ростом диаметра. Результат вполне закономерный, подтверждающий сложившийся тренд, установленный ранее для углеродных нанотрубок, а также структур на основе нитрида бора (BN), сульфида молибдена (MoS_2) и диоксида титана (TiO_2). Однако для трубок типа

“зигзаг” зависимость энергии деформации от диаметра претерпевает осцилляции. Так, наиболее устойчивыми являются нанотрубки с индексами хиральности $(3a,0)$ с $a = 3-6$, а именно, $(9,0)$, $(12,0)$, $(15,0)$ и $(18,0)$ (см. рисунок).



Структура “идеальных” одностенных нанотрубок сульфида цинка $(9,0)$, $(12,0)$, $(15,0)$ и $(18,0)$ (а–г) и соответствующих деформированных (“магических”) образцов (д–з).

В данном случае просматривается явная параллель с атомными кластерами. Напомним, что число атомов, при котором кластер химического элемента обладает повышенной устойчивостью, называют “магическим” числом. В данном случае можно говорить о “магических” индексах хиральности. Кроме того, авторы отмечают, что помимо повышенной устойчивости для этих нанотрубок характерна максимальная величина диэлектрической щели. По мнению исследователей, это первый случай выявления “магической” числовой закономерности для квазиодномерных наносистем. Будем надеяться, что на этом магия не закончится.

М. Маслов

I. N. Krainara et al., J. Phys. Chem. C 117, 22908 (2013).

Получение УНТ в газовом разряде при различных ориентациях электродов

Один из наиболее распространенных способов получения однослойных углеродных нанотрубок (УНТ) основан на применении газового разряда с графитовыми электродами в атмосфере He с использованием металлических катализаторов. При этом, как показывают результаты ранних работ, важную роль в механизме синтеза УНТ играет процесс свободной конвекции газа в разрядной камере, благодаря которому атомы углерода, образованные в горячей области разряда, попадают в более холодные области, где происходит образование УНТ. В такой ситуации важную роль может играть ориентация газоразрядной камеры относительно направления гравитационного поля, которое вызывает свободную конвекцию. Детальное исследование зависимости эффективности получения однослойных УНТ от взаимной ориентации электрического, гравитационного и внешнего магнитного полей выполнено недавно в Shizuoka Univ. (Япония) [1].

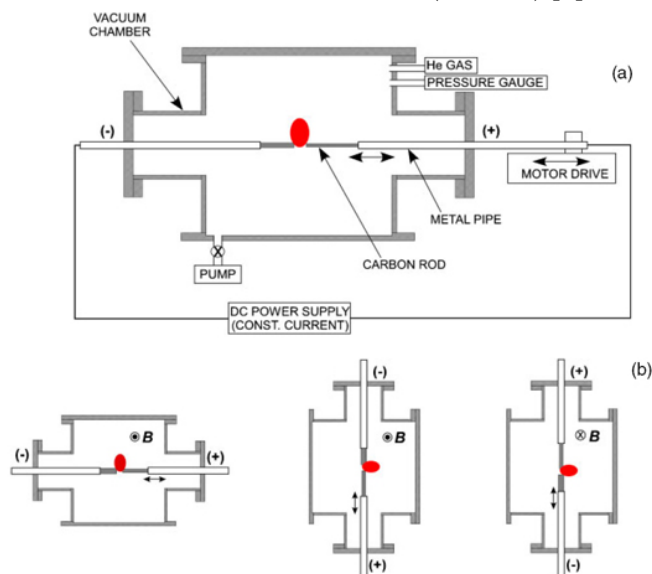


Рис. 1. а – Схема экспериментальной установки; б – взаимные направления электрического и магнитного полей, использованные в эксперименте.

Схема экспериментальной установки показана на рис. 1а. Реактором служила цилиндрическая разрядная камера диаметром 20 см и высотой 18 см. Графитовый катод имел форму стержня длиной 35 мм и диаметром 15 мм. В качестве анода использовали прямоугольный стержень размерами 6×6×40 мм³, изготовленный из композита С-Ni-Y с содержанием Ni 4.2% (по массе) и Y 0.9%. Анод был заземлен и мог перемещаться с помощью моторчика для стабилизации межэлектродного расстояния на уровне 5 мм. Синтез УНТ происходил в дуговом разряде при напряжении 25 В, токе 50 А и давлении He около 0.6 атм. Магнитное поле с индукцией 3 мТл создавали с помощью пары ферритовых магнитов прямоугольной формы с размерами 6×8×10 см³. Направление магнитного поля было перпендикулярно направлению протекания разрядного тока. Сажа, полученная в результате термического распыления материала анода и содержащая однослойные УНТ, осаждалась на стенках разрядной трубки. Количество жгутов УНТ определяли на основании прямого подсчета на изображении площадью 4 мкм², полученном с помощью просвечивающего электронного микроскопа с увеличением X50000. Результаты измерений скорости наработки сажи показаны на рис. 2.

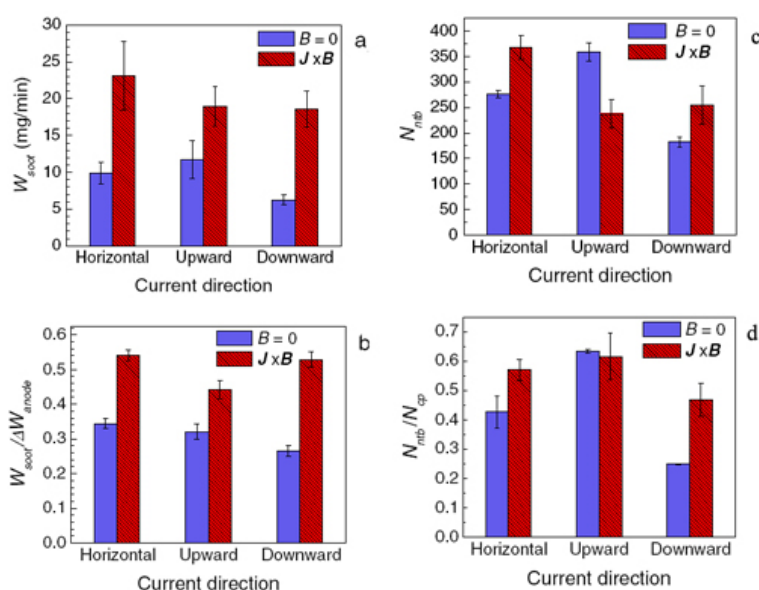


Рис. 2. Скорость наработки сажи (а), отношение скорости наработки сажи к скорости испарения анода (б), количество жгутов однослойных УНТ (с) и отношение этого количества к количеству углеродных частиц (д), полученные при наличии и отсутствии магнитного поля, а также при различных направлениях тока относительно гравитационного поля Земли.

Эти результаты указывают на существенную зависимость скорости наработки сажи и однослойных УНТ от взаимной ориентации электрического и гравитационного полей, а также от наличия магнитного поля, перпендикулярного направлению электрического тока. Максимальные скорости наработки наблюдаются в случае, когда разрядный ток направлен вверх. Приложенное магнитное поле

приводит к увеличению скорости наработки в 2.35 раза в случае горизонтальной конфигурации, в 1.6 раза в случае вертикальной конфигурации с направлением разрядного тока вверх и в 3 раза в случае вертикальной конфигурации с направлением разрядного тока вниз. Наблюдается также некоторая зависимость качества УНТ от конфигурации разряда, а также от наличия магнитного поля. Физический механизм, ответственный за указанные зависимости, пока надежно не установлен, однако можно предполагать, что в его основе лежит конвекционное движение газа в разрядной камере.

А. Елецкий

1. *M.J.Rahman, T.Mieno, Jap. J. Appl. Phys. 52, 056201 (2013).*

КОНФЕРЕНЦИИ

The European Conference Physics of Magnetism 2014 (PM'14), June 23-27, 2014, Poznan, Poland

Scope

- Strongly Correlated Electrons and High Temperature Superconductivity
- Quantum and Classical Spin Systems
- Magnetic Structure and Dynamics
- Spin Electronics and Magnetotransport
- Nanostructures, Surfaces and Interfaces
- Molecular Magnets
- Soft and Hard Magnetic Materials and Applications

The Conference proceedings containing plenary talks and selected papers will be published as a regular issue of **Acta Physica Polonica A**.

Important Dates

Abstract submission deadline - **1st March, 2014**

E-mail: pm14@ifmpan.poznan.pl

Web site: <http://www.ifmpan.poznan.pl/pm14>

Семинар по физике конденсированного состояния, 4 декабря 2013 г.

(17.00, многофункциональный зал библиотеки физического факультета МГУ, 5 этаж)

Валерий Владимирович Вальков, д.ф.-м.н. - Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН

“Квантовый транспорт электронов через структуры атомного масштаба при учете процессов неупругого рассеяния и многократного отражения”

Пропуск на физический факультет слушателей семинара будет осуществляться по предъявлению паспорта. Предварительная запись на семинар на сайте <http://nano.msu.ru/education/seminars> (до 15:00 дня семинара).

Для расширения возможностей участия в семинаре предполагается обеспечить прямую он-лайн трансляцию заседаний через сайт

<http://nano.msu.ru/video.php>

Видеозапись семинара впоследствии будет доступна на сайтах <http://cm.phys.msu.ru/?q=seminar> или <http://nano.msu.ru/research/seminars/condensed/seminars>

Дополнительная информация:

тел. +7(495)939-1151

E-mail: khokhlov@mig.phys.msu.ru

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

Главный редактор: И.Чугуева, e-mail: irina@issp.ras.ru

Научные редакторы К.Кугель, Ю.Метлин

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

Выпускающий редактор: И.Фурлетова

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