

В этом выпуске:

СВЕРХПРОВОДНИКИ

Ещё один шаг к “жаропрочной” сверхпроводимости

После открытия в 1986 г. Беднорцем и Мюллером “высокотемпературной” сверхпроводимости в купратах, за которое им уже в следующем году была присуждена Нобелевская премия, не прекращались попытки всё более и более повысить температуру сверхпроводящего перехода T_c . Напомним, что сами Беднорц и Мюллер обнаружили сверхпроводимость с T_c около 30 К. За прошедшие после этого три десятилетия было открыто множество разнообразных высокотемпературных сверхпроводников, и T_c удалось поднять более, чем на сотню градусов, но “комнатнотемпературная” сверхпроводимость оставалась недостижимой. Особые надежды тут возлагались на гидриды. Основным “действующим лицом” в них является водород, для которого благодаря его малой массе характерны высокие фононные частоты, а также сильное электрон-фононное взаимодействие.

Важным успехом на этом пути было обнаружение сверхпроводимости в сероводороде с $T_c = 203$ К при давлении 150 ГПа [1]. При таком сверхвысоком давлении в сероводороде (H_2S) возникает фаза H_3S с возросшим числом атомов водорода в расчёте на формульную единицу. В 2017 г. было теоретически предсказано, что гидриды лантана и иттрия с ещё большим содержанием водорода могут обеспечить дальнейшее повышение T_c [2, 3]. Например, гидрид LaH_{10} имеет так называемую клатратную структуру, в которой каждый атом лантана находится в “клетке” из 10 атомов водорода. Эти предсказания были недавно подтверждены на эксперименте. Так, сразу две экспериментальные группы сообщили, что при давлениях от 120 до 185 ГПа T_c у LaH_{10} лежит в интервале 250–260 К [4,5], у YN_6 наблюдалась $T_c = 224$ К при 166 ГПа [6].

Но и теоретики не стоят на месте. Так, исследователи из Jilin Univ. (Китай) [7] взялись уже за тройные соединения. Гидридов, содержащих три, а не два, химических элемента, великое множество, а их возможных структурных конфигураций ещё больше, но далеко не все они оказываются устойчивыми. Авторы работы [7] выявили во всём этом многообразии весьма перспективное соединение Li_2MgH_{16} , имеющее сложную клатратную структуру (рис. 1). Здесь литий служит в качестве источника дополнительных электронов, которые предотвращают формирование молекул H_2 в такой структуре, способствуя сверхпроводимости.

И далее ...

НАНОМАТЕРИАЛЫ

- 2 Новые энергетики:
кремнийзамещенные CL-20

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

- 3 Поймать сероводород

ВЕСТИ С КОНФЕРЕНЦИЙ

- 5 Седьмой Евроазиатский
симпозиум
“Тенденции в магнетизме”
EASTMAG-2019

МУЛЬТИФЕРРОИКИ

- 6 “Монополь из зазеркалья”
обнаружен... только “зеркало”
подменили!

КОНФЕРЕНЦИИ

- 7 Международная
конференция, посвященная
100-летию
И.М. Халатникова
“Квантовые жидкости,
квантовая теория поля
и гравитация”,
17-20 октября 2019 г.,
г. Черноголовка, Московская
область

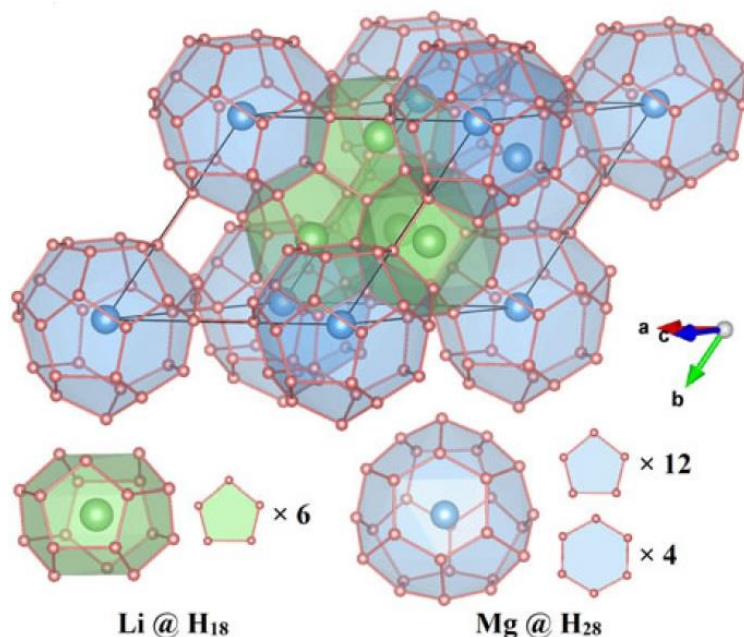


Рис. 1. Структура кристалла $\text{Li}_2\text{MgH}_{16}$ при высоких давлениях, включающая в себя “клетки” H_{18} вокруг Li и H_{28} – вокруг Mg. Каждая из “клеток” H_{18} или H_{28} образована 6-ю или 12-ю пятиугольниками и 4-мя шестиугольниками.

На основе расчётов в рамках теории функционала электронной плотности (DFT) в [7] предсказывается величина T_c около 473 К, т.е. на сто градусов выше температуры кипения воды. Правда всё это происходит при колоссальном давлении порядка 250 ГПа, что превышает современные возможности эксперимента. Однако не стоит слепо доверять DFT расчётам: и для LaH_{10} , и для YH_6 нужное давление в реальности оказалось гораздо ниже предсказанного теорией. Так что ещё есть надежда получить сверхпроводник, охлаждаемый кипящей водой.

По материалам миниобзора

J.A.Flores-Livas, R.Arita,

A prediction for “hot” superconductivity,

Physica 12, 96 (2019).

1. *A.P.Drozdov et al., Nature 525, 73 (2015).*
2. *F.Peng, et al., Phys. Rev. Lett. 119, 107001 (2017).*
3. *H.Liu et al., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 114, 6990 (2017).*
4. *M.Somayazulu et al., Phys. Rev. Lett. 122, 027001 (2019).*
5. *A.P.Drozdov et al., Nature 569, 528 (2019).*
6. *I.A.Troyan et al., arXiv:1908.01534.*
7. *Y.Sun et al., Phys. Rev. Lett. 123, 097001 (2019).*

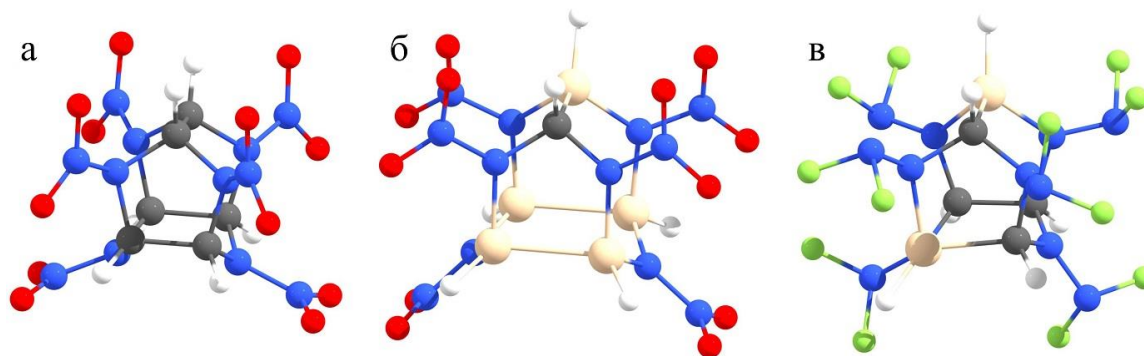
НАНОМАТЕРИАЛЫ

Новые энергетики: кремнийзамещенные CL-20

Создание энергоэффективного и экологически безопасного топлива до сих пор остается актуальной задачей современной науки. Одним из возможных путей ее решения является использование различных кристаллических систем на основе высокоэнергетических соединений (HEDM, high-energy-density materials), наиболее ярким представителем которых является гексанитрогексаазаизовюрцитан, более известный как CL-20 (см. рис.). При этом стремление к усилению преимуществ и исключению недостатков различных высокоэнергетических материалов приводит к идее создания так называемых сокристаллов, содержащих не только названный CL-20, но и другие молекулы в своем составе. И к настоящему моменту уже предсказаны и даже синтезированы некоторые молекулярные сокристаллы, в которых различные изолированные высокоэнергетические молекулы связаны друг с другом посредством слабого ван-дер-ваальсового взаимодействия. Тем не менее, несмотря на успехи в получении сокристаллов на основе CL-20, авторы работы [1] убеждены, что сокристаллизация – это не единственно возможный способ улучшения энергетических характеристик последнего. Они предлагают альтернативный подход к повышению

энергоэффективности таких систем, основываясь на принципе функционального замещения в молекулярном каркасе CL-20 атомов углерода

на кремний, а атомов кислорода на фтор (см. рис.).



Атомная структура традиционной молекулы CL-20 (а) и ее кремнийзамещенных производных $\text{CSi}_5\text{H}_6\text{N}_{12}\text{O}_{12}$ (б) и $\text{C}_4\text{Si}_2\text{H}_6\text{N}_{12}\text{F}_{12}$ (в).

В работе [1] авторы оценили механизмы пиролиза, стабильность и реакционную способность двух перспективных производных CL-20, а также их димеров с помощью компьютерного моделирования в рамках теории функционала плотности. Расчеты выполняли на уровне теории $\text{B3LYP}/6-311\text{G}(\text{d,p})$ и $\text{B3LYP}/6-311\text{G}++(2\text{d},2\text{p})$ в программах TeraChem и GAMESS. Меньший базисный набор использовали для более вычислительно затратных процессов: молекулярной динамики, вычисления гессианов, поиска переходных состояний и расчета оптических спектров. В результате авторы установили, что одновременное присутствие в молекуле атомов кремния и фтора существенно снижает стабильность соединения. В то же время кремнийзамещенный каркас CL-20 несколько не уступает в устойчивости оригинальному. При этом такие каркасы склонны к образованию димеров, что свидетельствует о принципиальной возможности формирования подобными молекулярными системами ковалентных кристаллов с большей плотностью, чем у полученных ранее молекулярных, что положительно скажется на энерговыделении. Помимо всего прочего, авторы оценили и электронные характеристики кремнийзамещенных CL-20. В работе представлен целый набор квантово-механических дескрипторов: энергии НОМО и LUMO, химический потенциал, химическая жесткость и мягкость, индексы электрофильности. Что касается механизмов пиролиза, то они эквивалентны для мономеров и димеров, и представляют собой или отрыв радикала NO_2/NF_2 от каркаса, или миграцию атома O/F с последующим образованием соответствующих ковалентных связей Si-O/Si-F. Последний механизм начинает преобладать при

очень высоких ($T > 2000 \text{ K}$) температурах. К слову, энергетический барьер, препятствующий распаду системы $\text{CSi}_5\text{H}_6\text{N}_{12}\text{O}_{12}$ близок к таковому для традиционной молекулы CL-20 и равен примерно 200 кДж/моль . Подводя итоги, авторы прогнозируют, что кремнийзамещенные производные окажутся более энергоэффективными, чем традиционные CL-20 как сами по себе, так и в составе молекулярных или ковалентных сокристаллов. Осталось только решить проблему их экспериментального синтеза из кремниевых аналогов прекурсоров CL-20, идентифицировать же полученные соединения уже возможно по характерным УФ-спектрам, полученным авторами и приведенным в публикации.

М. Маслов

I. K.P. Katin et al., ChemistrySelect 4, 9659 (2019).

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

Поймать сероводород

Сероводород H_2S – это бесцветный, высокотоксичный, вызывающий коррозию газ, который традиционно присутствует в выбросах промышленных предприятий и без надлежащей фильтрации приводит к непоправимому ущербу экологии, негативно влияет на здоровье людей и, в конечном итоге, наносит вред экономике в целом. Принимая во внимание его крайне разрушительное воздействие, необходимо своевременно идентифицировать и удалять H_2S из окружающей среды. В качестве основы для детекторов сероводорода исследователи из Research Inst. of Petroleum Industry (Иран) [1] предлагают использовать допиро-

ванные различными элементами классические фуллерены C_{60} (см. рис. 1).

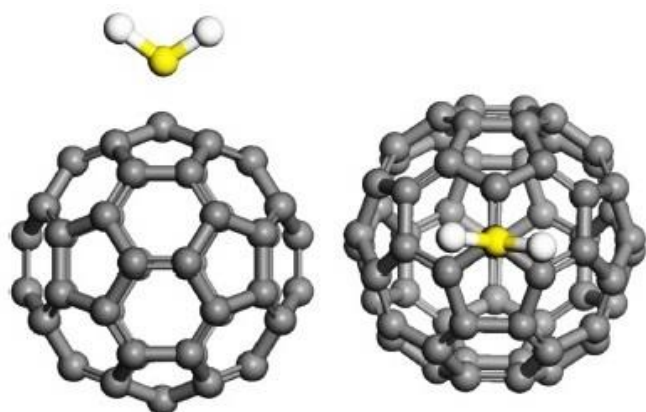


Рис. 1. Атомная структура классического фуллерена C_{60} вместе с молекулой сероводорода H_2S

Они выполнили компьютерное моделирование процессов адсорбции сероводорода на поверхность фуллерена с помощью теории функционала плотности и оценили изменение величины НОМО-LUMO щели после присоединения H_2S

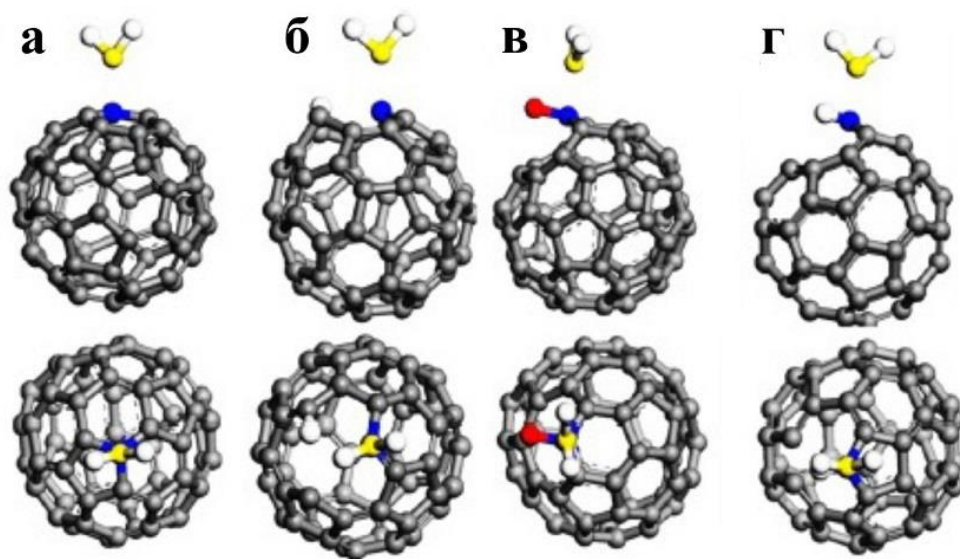


Рис. 2. Атомные структуры азота: *a* – графитового, *б* – пиридинового, *в* – пиридин-оксидного и *г* – пиррольного типов, которые использовали при проведении расчетов.

Анализируя изменение НОМО-LUMO щели в процессе адсорбции, авторы пришли к выводу, что наибольшей чувствительностью к сероводороду обладает фуллерен, допированный азотом пиридин-оксидного типа: процентное изменение щели в этом случае составляет около 67 %. Следующими в этом ряду молекулярных датчиков можно поставить фуллерены, допированные фосфором и бором, изменение зазора НОМО-LUMO при присоединении молекулы H_2S для них составило, соответственно, 13 и 10 %. Учитывая полученные данные, авторы

к фуллереновой клетке. Изменение щели и, как следствие, проводимости и стало критерием эффективности гипотетического молекулярного детектора. Авторы выполняли все расчеты в программе Gaussian09 на уровне теории B3LYP/3-21G. Уровень теории не самый высокий, однако, для приблизительных оценок вполне приемлем. В качестве допантов авторы использовали атомы азота, серы, бора, фосфора и кремния. При этом при проведении расчетов рассматривали атомы азота в структурах различного типа (см. рис. 2): графитового, пиридинового, пиридин-оксидного и пиррольного. Исследователи отмечают, что все выбранные элементы замещения усиливают адсорбционную способность C_{60} . При этом наиболее сильное взаимодействие молекул газа с поверхностью наблюдается для допированного бором фуллерена, а в ряду допантов пиррольный азот \rightarrow кремний \rightarrow сера \rightarrow фосфор величина энергии взаимодействия уменьшается.

предсказывают использование фосфора, бора и атомов азота в структуре пиридин-оксидного типа в качестве допантов C_{60} для создания универсальных и эффективных датчиков сероводорода.

М. Маслов

I. Z.Yousefian et al., Physics E 114, 113626 (2019).

ВЕСТИ С КОНФЕРЕНЦИЙ

Седьмой Евразийский симпозиум “Тенденции в магнетизме” EASTMAG-2019

С 8 по 13 сентября 2019 г. в Екатеринбурге прошел международный симпозиум Euro-Asian Symposium “Trends in MAGnetism”, английская аббревиатура которого EASTMAG, построена на игре смыслов – привязка географическая (от Казани до Владивостока, если судить по истории проведения конференции) и тематическая (магнетизм), а по тому, как меняются названия секций конференции, действительно можно отслеживать тенденции в этой обширной области физики.

Екатеринбург, известный своими научными школами по магнетизму и расположенный на географической границе Европы и Азии, закономерно стал первым и самым частым местом проведения этой конференции. Организатором и местом большей части заседаний конференции явился Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН.



Рис. 1. а – Открытие конференции в культурном центре “Урал” (лекция Д.И. Хомского); б – актовЫй зал в ИФМ УрО РАН (лекция В.В. Устинова).

Симпозиум открыл пленарный доклад Даниила Ильича Хомского из Университета Кёльна, посвященный разнообразным эффектам взаимосвязи между магнитной и электрической подсистемами в кристаллах. В частности, было сообщено о недавнем детектировании методом мюонной спиновой спектроскопии поля от “монополя”, являющегося отражением реального электрического заряда, расположенного над поверхностью магнитоэлектрической среды Cr_2O_3 [1]. Это явление ранее теоретически было предсказано автором доклада [2] (подробнее, см. “Обнаружение монополя из зазеркалья...”).

Теоретическим аспектам спиновой электроники был посвящен пленарный доклад Гена Татара из RIKEN (Япония), а также весьма поучительная лекция директора ИФМ, члена-корреспондента РАН Владимира Васильевича Устинова. Глобальным вопросам, связанным с уменьшением энергопотребления компьютерных вычислений за счет перехода к принципам организации мозга, был посвящен доклад Тео Разинга из Университета Неймегена (Нидерланды). Большое впечатление на публику произвел простой факт: энергии, затраченной в дата-центре на обслуживание поисковых запросов одного человека в течение дня, достаточно для того, чтобы вскипятить стакан-другой воды, а то и целый чайник. Среди преобладающих тем докладов были спинтроника, скирмионы, магнитные функциональные материалы, магнитофотоника и методы оптического воздействия на магнетизм. Значительное число докладов было посвящено магнитной медицине в рамках специальной биологической секции. Большое внимание на конференции также было уделено всему, что подпадает под определение “magnetic soft matter”: магнитореологическим жидкостям, магнитным эластомерам, жидким кристаллам с магнитным наполнителем, феррогелям и т.п.

Параллельно с EASTMAG проходила спутниковая конференция, посвященная расчётам из первых принципов и моделированию материалов “Ab-initio Modeling of Advanced Materials (AMM-2019)”.

Культурная программа конференции включала в себя экскурсии по городу и окрестностям. Для желающих задержаться в Екатеринбурге подольше уже после завершения конференции предлагался однодневный тур в заповедник “Оленьи ручьи”.

А. Пятаков

1. Q.N.Meier et al., Phys. Rev. X 9, 011011 (2019).

2. D.I.Khomskii, Nature Commun. 5, 4793 (2014).

МУЛЬТИФЕРРОИКИ

“Монополю из зазеркалья” обнаружен... только “зеркало” подменили!

Около десяти лет назад в 4-м выпуске “ПерсТ” за 2009 год была опубликована заметка “Магнитный монополю из зазеркалья” по мотивам статьи [1], в которой теоретически рассматривалась конфигурация полей, наводимых электрическим зарядом, находящимся вблизи поверхности топологического изолятора. Как известно из курса электростатики, эффективное поле, создаваемое зарядом над поверхностью материала, является суперпозицией поля самого заряда и его “отражения”. В силу наличия в топологическом изоляторе магнитоэлектрического эффекта, должно еще возникать и магнитное поле, эквивалентное полю от монополя, находящегося в месте расположения мнимого заряда.

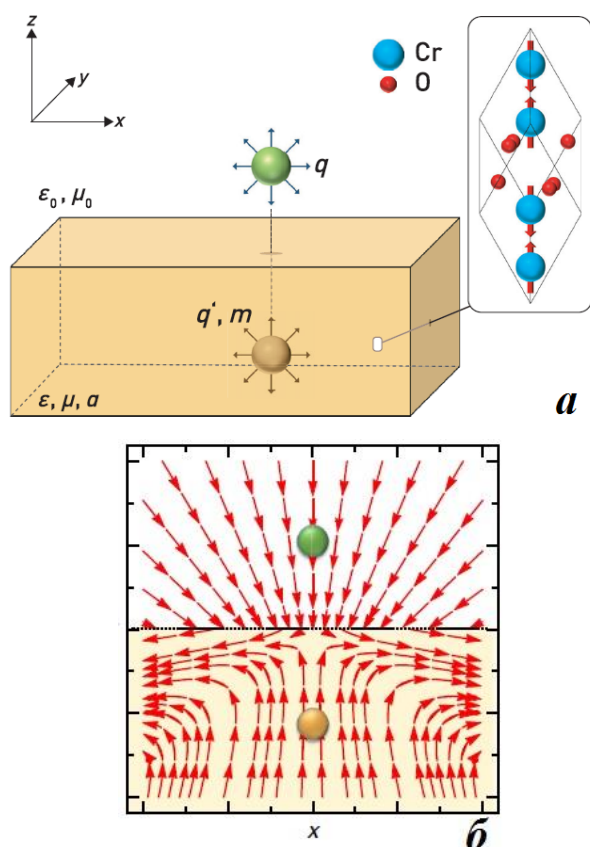


Рис. 1. *a* – идея о магнитном монополе как отражении реального заряда в магнитоэлектрике (q – реальный заряд, q' мнимый заряд, m – мнимый монополю). На вставке – элементарная ячейка Cr_2O_3 *б* – конфигурация магнитного поля с учетом анизотропии магнитоэлектрика Cr_2O_3

Но почему не попробовать использовать вместо топологического изолятора обычный магнитоэлектрик, например классический Cr_2O_3 (рис.1)? В нем также будет отражаться монополю, правда, конфигурация полей будет несколько более сложной в силу того, что тензор магнитоэлектрического эффекта имеет не только диагональные компоненты (рис. 1б).

Такое “рацпредложение” высказал 5 лет назад Д.И. Хомский [2], а экспериментальная работа появилась только в этом году. Все дело в том, что напрашивающаяся схема эксперимента – использовать электрически заряженный зонд магнитного силового микроскопа, в случае реальной поверхности с дефектами не подходит. Как показал эксперимент [3], даже шероховатости 4 нм достаточно, чтобы полезный сигнал подавило поле от электростатических неоднородностей, связанных с рельефом.

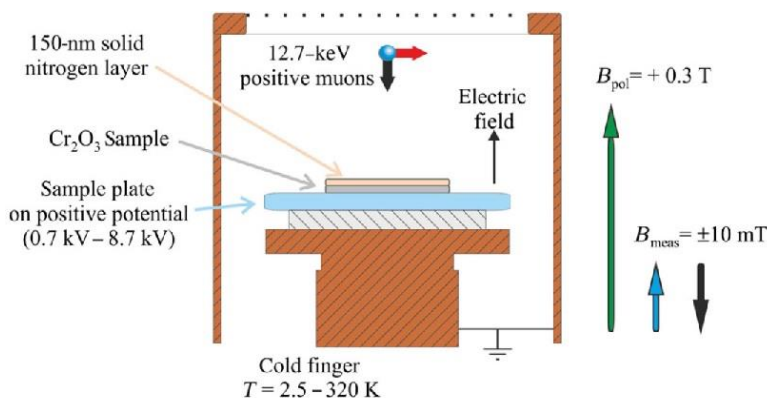


Рис. 2. Детектирование магнитного поля над магнитоэлектриком Cr_2O_3 методом мюонной спектроскопии. Красной стрелкой показан спин мюона, черной – направление его движения. Электрическое поле больше 1кВ/см и магнитное поле B_{pol} используют для создания однородного антиферромагнитного состояния образца перед измерениями, B_{meas} – поля, в которых проходит измерения (для вычисления магнитного поля монополя используется разностный метод).

Поэтому авторы экспериментальной статьи [3] пошли другим путем: использовать метод мюонной спиновой спектроскопии: бета-распад мюона сопровождается излучением позитрона преимущественно в направлении спина мюона, что можно использовать для детектирования магнитного поля в месте распада. Для того чтобы измерять поля над поверхностью магнитоэлектрической среды Cr_2O_3 , потребовалось нанести на нее специальный буферный слой, в котором мюоны тормозились бы и распадались (рис. 2). В качестве такового служила пленка твердого азота толщиной 150 нм (эксперимент

проводился при 20 К) [3]. Источником электрического поля служили сами положительно заряженные мюоны, а расстояние от поверхности магнитоэлектрика, на котором измерялось поле, регулировалось подбором кинетической энергии: изменение ее в диапазоне от 1 до 30 кэВ позволяло варьировать глубину проникновения мюона в буферный слой от 10 до 200 нм, и таким образом измерять распределение магнитного поля в нем.

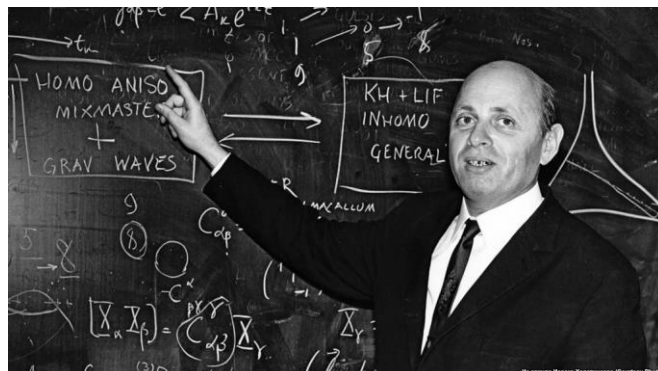
Полученные результаты не противоречили теоретическим предсказаниям. Конечно, толщина слоя кажется маловатой для того чтобы судить о квадратичном характере спада магнитного поля по закону Кулона. Да и необходимость использования при измерениях внешних магнитных полей затрудняет обнаружение на их фоне поля от монополя. Как отмечают сами авторы [3], наиболее убедительным доводом о магнитоэлектрическом происхождении получаемого сигнала было бы совпадение температурных зависимостей эффективного магнитного поля и магнитоэлектрического эффекта, максимум которого наблюдается при 280 К, но для этого уже придется поискать другой буферный слой.

А. Пятаков

1. X.-L.Qi et al., *Science* **323**, 1184 (2009).
2. D.I.Khomskii, *Nature Commun.* **5**, 4793 (2014).
3. Q.N.Meier et al., *Phys. Rev. X* **9**, 011011 (2019).

КОНФЕРЕНЦИИ

Международная конференция “Квантовые жидкости, квантовая теория поля и гравитация”, посвященная 100-летию И.М. Халатникова, 17-20 октября 2019 г., г. Черноголовка, Московская область



17 октября 2019 года выдающемуся физику-теоретику академику Исааку Марковичу Халатникову исполнится сто лет. Широкий круг его научных интересов проявлялся в самых разных областях. Его работы посвящены теоретическим проблемам квантовой физики, сверхтекучести и сверхпроводимости, квантовой электродинамики и космологии. Во всех этих областях физики работы И.М. Халатникова были выдающимся явлением и по праву вошли в сокровищницу науки.

И.М. Халатников является основателем Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау и его первым директором с 1965 по 1992 год.

В честь 100-летия Исаака Халатникова Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау организует международную конференцию. В соответствии с широкими интересами И.М. Халатникова конференция будет посвящена современным рубежам теоретической физики от кинетики квантовых систем до космологии.

E-mail: khalatnikov100@itp.ac.ru

Сайт: <http://khalatnikov100.itp.ac.ru/khalat100/>

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