

ISSN: 2782-5515

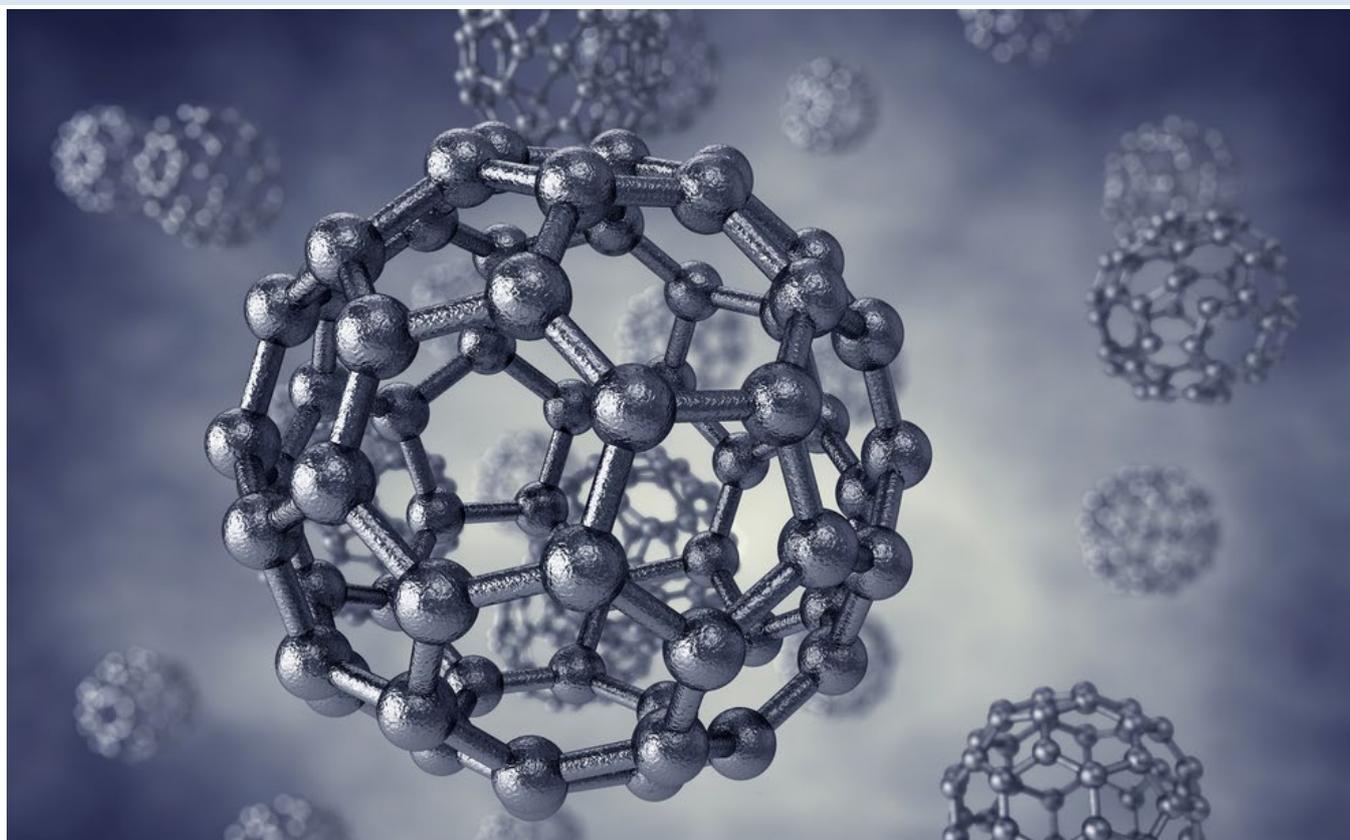


Перст

Информационный бюллетень
перспективные технологии
наноструктуры сверхпроводники фуллерены

Том 32, выпуск 3

март 2025 г.



<https://nauka.tass.ru/>

Черноголовка

Том 32, выпуск 3

март 2025 г.

В этом выпуске:

ФОТОНИКА

На пути к естественной “левой среде”: отрицательное преломление в структуре из атомов

Когда говорят о материалах с отрицательным показателем преломления, обычно имеют в виду искусственно созданную среду – метаматериал, состоящий из искусственных атомов, представляющих собой колебательные контуры с управляемой резонансной частотой. В такой среде при определенных условиях имеют место отрицательная диэлектрическая и магнитная проницаемости, а направления фазовой и групповой скорости электромагнитной волны противоположны. Существование “левых” сред не противоречит закону сохранения энергии, однако среди естественных материалов такие среды обнаружены не были. Могут ли обычные атомы стать той колебательной системой, которая порождает “левые” свойства? Этот вопрос был рассмотрен исследователями из Японии и Великобритании в недавней работе [1].

В качестве модельной системы использована среда, состоящая из атомных слоев, бесконечных в некоторой плоскости (рис. 1a). Свет падает под углом на эту плоскость и распространяется внутри структуры. Атомы рассматриваются как рассеивающие диполи с характерными резонансными частотами. Свойства рассеивающей среды соответствуют одному из щелочно- или редкоземельных металлов (например, Sr, Yb), период решетки соответствует Rb. При определенном отклонении от резонансной частоты свет испытывает отрицательное преломление (рис. 1b), при котором фазовая и групповая скорость направлены противоположно. Отрицательное преломление обнаруживается в широком диапазоне углов падения, показатель преломления, определенный по закону Снеллиуса, достигает -0.5 . Эффект объясняется коллективным действием рассеяния атомных диполей, упорядоченных в структуру определенного периода. В работе [1] также исследовано влияние флуктуаций положений атомов и показано, что эффект наблюдается даже при небольших тепловых флуктуациях.

Результаты расчетов обнадеживают: значит, нет принципиальных препятствий к тому, чтобы обычный кристалл проявлял необычные оптические свойства. Но возможности технического управления периодом решетки кристалла так, чтобы атомы устанавливались на расстояния, не свойственные им, пока ограничены, и среда, рассмотренная в статье, является чисто модельной, не соответствующей реальному веществу.

И далее ...

ДЛЯ ПРАЗДНОГО УМА

- 3 Полимеризация в условиях нанограничения создает прочные и упругие гидрогели, способные к самозалечиванию

СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКИ / ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВЫ МАТЕРИАЛЫ

- 4 Реальный полевой транзистор на виртуальном сегнетоэлектрике

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

- 6 Поп-фуллерен: устойчивая звезда на углеродном небосводе

КОНФЕРЕНЦИИ

- 7 IX Euro-Asian Symposium on “Trends in Magnetism” (EASTMAG-2025), September 13-17, 2025, Yuzhno-Sakhalinsk, Russia

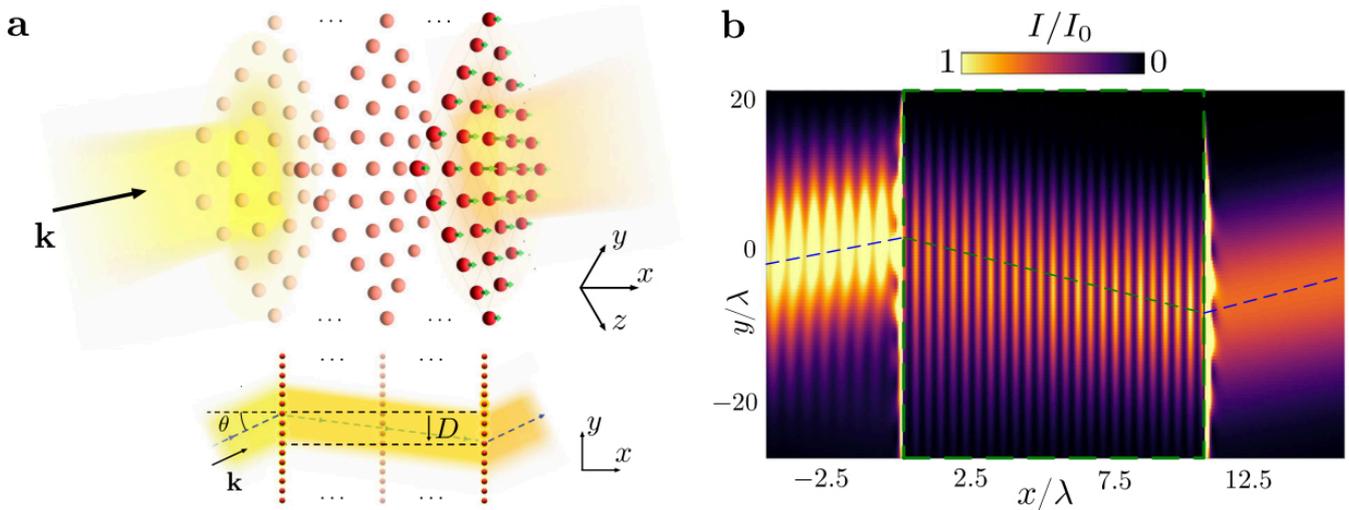


Рис. 1. **a** – Модельная система; **b** – результаты расчета, обнаруживающие отрицательное преломление света.

Тем не менее, данные расчеты, безусловно, могут помочь в вопросе поиска реальных “левых” сред.

З. Пятакова

1. L.Ruks et al., Nat. Commun. 16, 1433 (2025).

ДЛЯ ПРАЗДНОГО УМА

Полимеризация в условиях нанограничения создает прочные и упругие гидрогели, способные к самозалечиванию

Многие биологические ткани, например, кожа человека, не только прочные и упругие, но и способны восстанавливаться после повреждений. Синтетические аналоги, гидрогели, тоже обладают жесткостью, гибкостью, обеспечивают транспорт воды и питательных веществ, имеют ионную проводимость и отличную биосовместимость. По своим свойствам они превосходят эластомеры (полимеры с высокими эластичными свойствами и вязкостью); были даже получены гидрогели с модулем Юнга 100 МПа, однако самовосстановления этих материалов не происходит. Используя компланарное нанограничение, исследователи из Aalto Univ. (Финляндия) с участием коллег из Univ. of Bayreuth (Германия) [1] смогли создать гидрогель, сочетающий высокую прочность, гибкость и способность к полному самозалечиванию после повреждений. К полимеру на основе акриламида они добавили нанопластинки гекторита. Гекторит – глинистый слоистый минерал, литий-магний-натриевый силикат. Структура его состоит из отрицательно заряженных слоев толщиной ~ 1 нм с межслоевыми катионами. В воде он может расслаиваться. И природный, и синтетический гекториты безопасны,

их используют в фармацевтике, косметике, химической промышленности. Авторы [1] синтезировали гекторит и после расслоения его на нанопластинки и последующей ультразвуковой обработки получили нанопластинки, имеющие толщину 1 нм и средний диаметр (размер в горизонтальной плоскости) 20 мкм. Аспектное отношение ~ 20 000. Дисперсию этих нанопластинок добавили к концентрированному водному раствору акриламида (с фотоинициатором для полимеризации под действием УФ излучения).

Схема получения гидрогеля при компланарном нанограничении показана на рис. 1а. Нанопластинки в растворе акриламида объединяются в пачки (домены). Раствор акриламида с доменами нанопластинок медленно (5.2 мм/с) вводят в специальную форму шириной 0.5 мм, чтобы обеспечить макроскопическую ориентацию жидкокристаллических (LC) доменов. Одинаково заряженные анионные слои спонтанно разделяются. Промежутки составляют 50-200 нм в зависимости от концентрации (рис. 1б). Диаметр нанопластинок на порядки величины больше, и вращение невозможно даже при малой концентрации. Ориентация сохраняется. Полимеризация *in situ* приводит к образованию между нанослоями плотного массива полимерных цепочек, спутанных случайным образом.

Упорядоченная структура с щелевидным нанограничением, сформированным нанослоями гекторита, и плотно спутанными полимерами между нанослоями привела к формированию гибкого и прочного гидрогеля. Модуль Юнга равен 50 МПа, а предел прочности на разрыв 4.2 МПа.

Но новый гидрогель обладает не только замечательными механическими свойствами. Он способен самовосстанавливаться. Беспорядочно сплетенные полимеры динамические и мобильные на молекулярном уровне.

При разрезании гидрогеля ножом, полимерные цепочки начинают опять связываться. Через 4 часа материал залечивается на 80-90%, а через 24 часа – полностью.

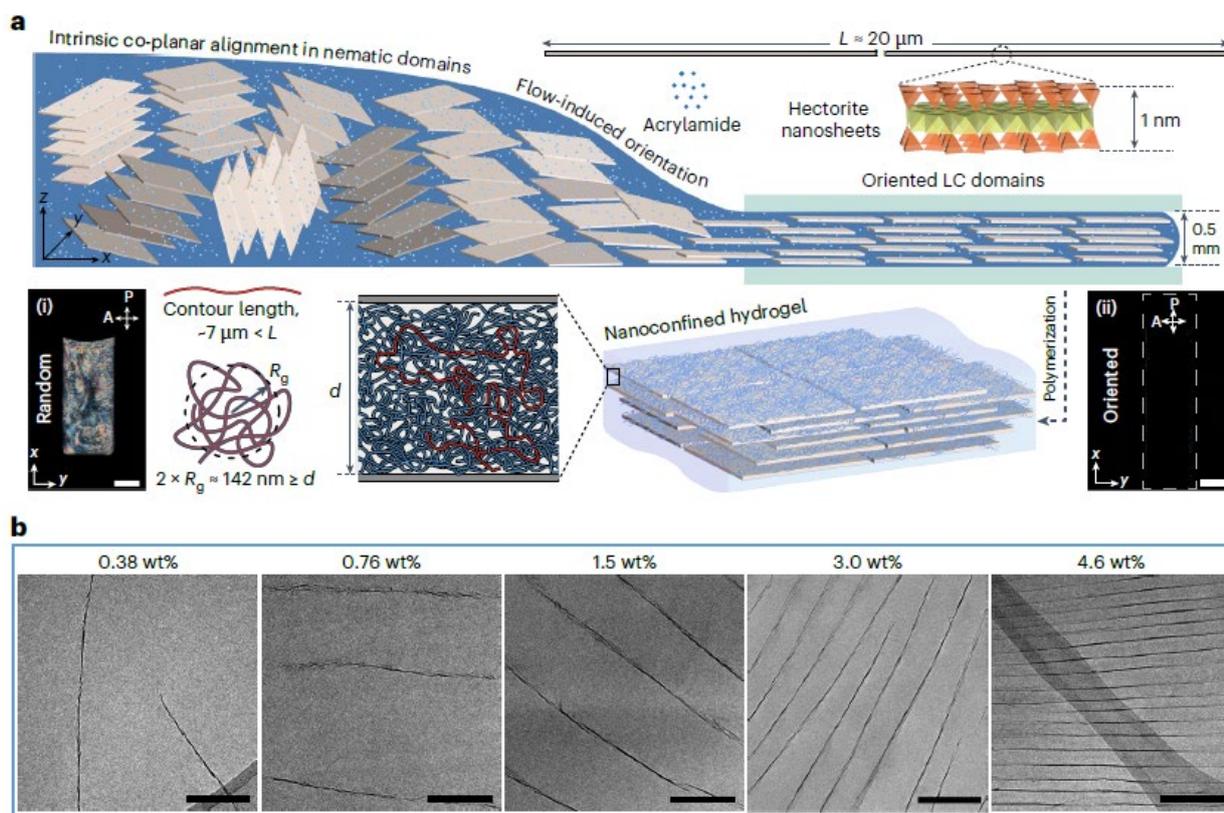


Рис. 1. **a** – Схема получения наноограниченного гидрогеля. Медленное введение раствора прекурсора (раствора акриламида с дисперсией нанопластинок гекторита) в форму приводит к ориентации доменов. При полимеризации между нанослоями образуются спутанные полимеры. Приведены изображения в поляризованном свете дисперсии с 1.5 масс.% гекторита: (i) исходной и (ii) с ориентированными доменами. **b** – ТЕМ изображения нанопластинок в наноограниченном гидрогеле для концентраций гекторита 0.38-4.6 масс.% (шкала 100 нм).

Исследователи нашли новый способ получать гидрогель, по свойствам похожий на биологические ткани, например, человеческую кожу. Этот подход может быть распространен на другие мономеры, разные наполнители и использован в синтезе материалов для биомедицины и мягкой робототехники.

О. Алексеева

1. C.Liang et al., Nat. Mater. (2025).
<https://doi.org/10.1038/s41563-025-02146-5>

СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКИ / ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВЫ МАТЕРИАЛЫ

Реальный полевой транзистор на виртуальном сегнетоэлектрике

Виртуальные сегнетоэлектрики не имеют никакого отношения к виртуальной реальности. Как следует из английского аналога этого термина – incipient ferroelectric (“зарождающийся сегнетоэлектрик”), данное понятие отражает физическое состояние, при котором в дисперсионной зависимости для колебаний кристаллической решетки частота полярной моды с понижением температуры стремится к нулю, но переход в сегнетоэлектрическое состояние так и не реализуется из-за квантовых флуктуаций. Казалось бы, такие материалы бесполезны, однако этот недостаток легко превращается в достоинство, поскольку небольшое воздей-

ствие – механическое напряжение, внесение примесей или структурных дефектов может спровоцировать сегнетоэлектрический переход. Самым известным виртуальным сегнетоэлектриком является титанат стронция SrTiO_3 , именно его использовали ученые из Penn State Univ. и Univ. of Minnesota (США) для создания полевого транзистора на гетероструктуре из монослоя дисульфида молибдена, служащего проводящим каналом, и наномембраны титаната стронция в качестве затвора (рис.1).

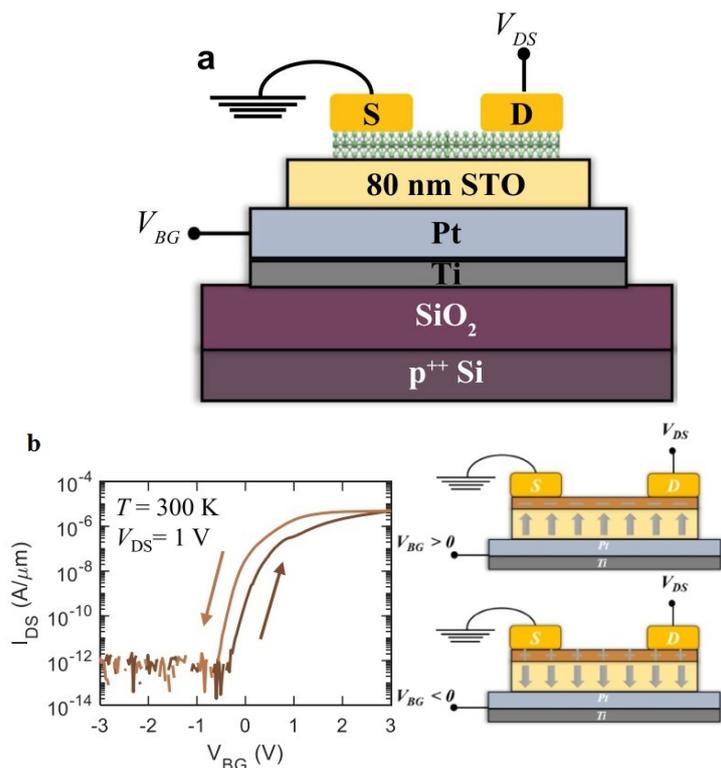


Рис. 1. Полевой транзистор на гетероструктуре из монослоя дисульфида молибдена в качестве проводящего канала и наномембраны из титаната стронция в роли затвора: **a** – сверху вниз, схематическое изображение гетероструктуры: S и D электроды истока и стока (40nm Ni/30 nm Au), монослой MoS_2 , Pt – 25-нанометровый слой платины, Ti – слой титана 5 нм, $\text{SiO}_2/\text{p}^{++}\text{Si}$ – коммерчески доступная подложка из оксида кремния и сильно легированного акцепторной примесью кремния; **b** – сток-затворная характеристика полевого транзистора при комнатной температуре (при напряжении сток-исток $V_{DS}=1$ В). Справа показаны состояния с высокой и низкой проводимостью, соответствующие двум ориентациям электрической поляризации в затворе.

Наномембрана из титаната стронция была получена методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложке из оксида стронция SrO , которую затем стравливали, а пластинку из титаната стронция толщиной 80 нм с помощью полимера переносили на заранее изготовленную с *ПерсТ, 2025, том 32, выпуск 3*

помощью электронно-лучевой литографии структуру, служащую затворным электродом. Далее с методом влажного переноса на поддерживающем слое из ПММА к гетероструктуре прилепляли монослой двумерного полупроводника MoS_2 из которого методами электронно-лучевой литографии формировали проводящий канал длиной 1 мкм и напыляли электроды (рис. 1а).

Сток-затворная характеристика полученного устройства при комнатной температуре представлена на рис. 1b, она демонстрирует гистерезис, свидетельствующий о том, что диэлектрический затвор из титаната стронция проявляет сегнетоэлектрические свойства. Однако их “виртуальность” все же проявляется в том, что состояние неустойчиво и в течение минуты разница между высокопроводящим и низкопроводящим состояниями уменьшается на порядок. Тем не менее, такой полевой транзистор при температурах ниже 200 К может работать как криогенная ячейка памяти со временем хранения информации, достигающим 10 лет при температуре 15 К. Время переключения состояния такой ячейки составляет 10 нс, количество циклов перезаписи – не менее 100 тысяч.

Впрочем, не очень стойкое упорядочение при комнатной температуре тоже оказалось востребованным – в нейроморфной электронике, воспроизводящей “в железе” принципы работы мозга, свойство постепенно “забывать” о предыдущих событиях, когда приходят новые импульсы, скорее полезно. Так, авторами [1] при комнатной температуре реализована возможность резервуарных вычислений, иначе говоря, методики к машинному обучению, основанной на нелинейном отклике динамической системы на входной сигнал. При этом один транзистор позволяет распознавать до восьми простейших изображений в матрице 3×3 , а три транзистора отчетливо распознают 40 узоров (рис. 2).

Здесь стоит напомнить, что помимо виртуальных сегнетоэлектриков не так давно были обнаружены виртуальные мультиферроики (incipient multiferroic) [2], о них мы писали в *ПерсТ* [3], то есть в одном элементе наряду с сегнетоэлектрической может реализовываться дополнительная магнитная степень свободы, что, как минимум, удваивает емкость одного элемента и его потенциал в резервуарных вычислениях.

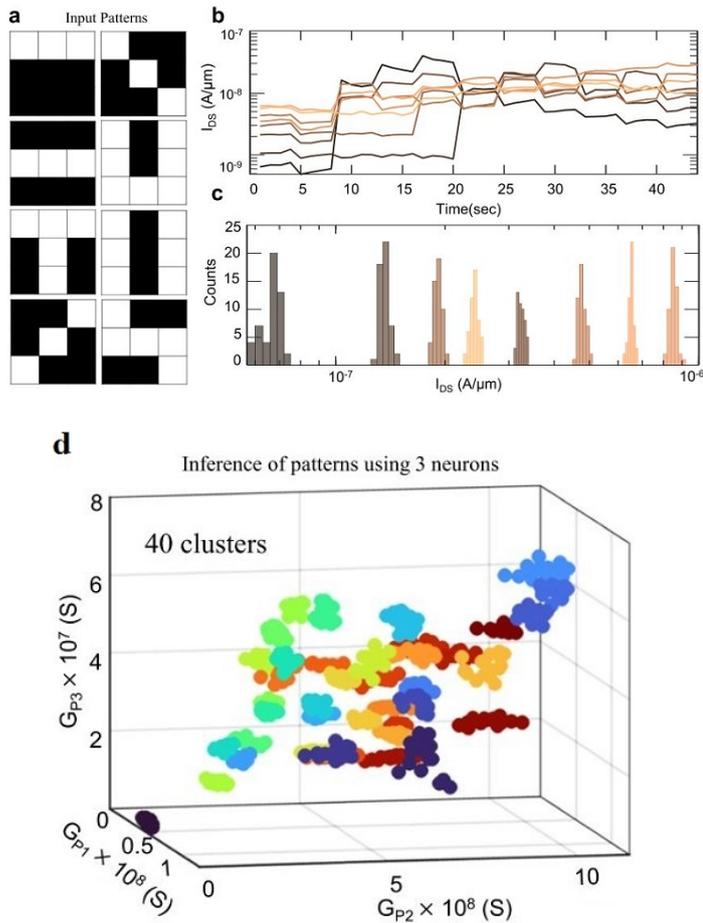


Рис. 2. Резервуарные вычисления при комнатной температуре: **a** – 8 шаблонов, соответствующих изображениям размером 3×3 пикселя, преобразованных в значения затворного напряжения ($V_{BG} = 3$ В и $V_{BG} = -1$ В для ярких и темных пикселей, соответственно); **b** - эволюция значений проводимости для 8 различных шаблонов, приводящая к различным конечным значениям проводимости, отличающим каждый шаблон (показаны на гистограмме – **c**); **d** – на диаграмме, соответствующей проводимостям G_P трех транзисторов, задействованных в резервуарных вычислениях хорошо видны отдельные кластеры для 40 шаблонов.

А. Пятаков

1. D.Sen et al., *Nat. Commun.* **15**, 10739 (2024).
2. R.M.Dubrovinn et al., *Phys. Rev. B* **101**, 180403 (2020).
3. *ПерсТ* **27**, вып. 11-12, с. 3 (2020),
ПерсТ **25**, вып. 19-20, с. 4 (2018).

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

Поп-фуллерен: устойчивая звезда на углеродном небосводе

В работе [1] ученые из Gdansk Univ. Technology (Польша) и Forschungszentrum Jülich GmbH (Германия) с помощью комплекса методов и подходов компьютерного моделирования изучили устойчивость и энергетический ландшафт пента-фуллерена C_{38} , построенного из шести пентаграфеновых элементарных ячеек (рис. 1).

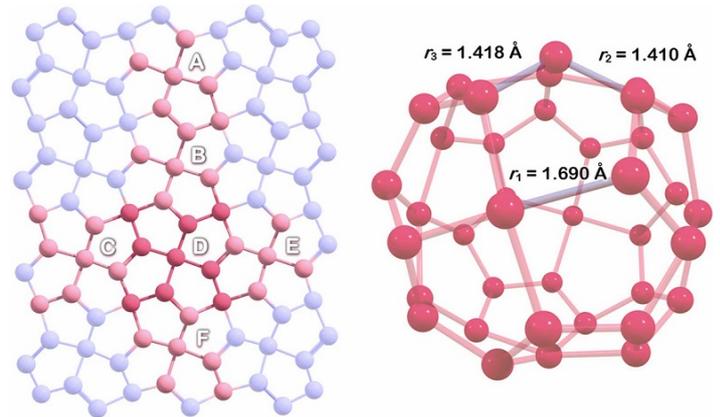


Рис. 1. Лист пента-графена (слева), где атомы светло-розового цвета соответствуют тем, которые входят в состав пента-фуллерена, а атомы темно-розового цвета представляют элементарную ячейку пента-графена. Обозначения А-В служат ориентиром для иллюстрации процесса сворачивания элементарных ячеек пента-графена в пента-фуллерен. Структура пента-фуллерена (справа), предсказанная на уровне теории B3LYP/def2SVP.

Такой фуллерен представляет собой пентагональный икоситетраэдр, составлен из двадцати четырех одинаковых неправильных пятиугольников и относится к классу каталановых тел. Интерес исследователей к незамещенному C_{38} был вызван недавним теоретическим предсказанием его ренийсодержащего структурного аналога Re_6C_{32} , который по данным молекулярно-динамического анализа продемонстрировал аномальную термическую устойчивость вплоть до 1500 К. Однако, к огорчению авторов, чистый углеродный пента-фуллерен оказался динамически нестабилен, о чем свидетельствует присутствие мнимых частот в колебательном спектре. Наверное, здесь можно было бы поставить логическую точку и завершить неудавшееся исследование, однако авторы, посчитав C_{38} переходным состоянием, пошли дальше и проанализировали поверхность его потенциальной энергии, затем провели серию молекулярно-динамических расчетов и обнаружили несколько новых и, главное, устойчивых изомеров. Помимо пятиугольников, такие

ПерсТ, 2025, том 32, выпуск 3

структуры также содержат от четырех до шести восьмиугольных углеродных колец. Включение восьмиугольников “смягчает” локальную кризису между пятичленными кольцами, тем самым повышая устойчивость. Необходимо отметить, что к выполнению теоретических расчетов авторы подошли ответственно, применив целый комплекс методов. Так, они проводили анализ не только в рамках теории функционала плотности (DFT) с набором функционалов B3LYP, ω B97XD, B2PLYPD3, но и с помощью теории возмущений Меллера-Плессе второго порядка (MP2) с использованием базисных наборов def2SVP и def2TZVP. Термическая устойчивость соединений подтверждалась первопринципной (*ab initio*) молекулярной динамикой на уровне теории B3LYP/def2SVP. Серия молекулярно-динамических расчетов выполнялась при 300, 1500 и 2000 К в рамках NVE-ансамбля в течение 5 пс с шагом по времени 1 фс. Все вычисления исследователи выполнили в программе Gaussian 16. Главное, в результате молекулярно-динамического моделирования они обнаружили так называемый пента-окта-пента фуллерен или поп-фуллерен (рис. 2), который можно считать нульмерным аналогом пента-окта-пента графена, особой графеноподобной модификации, построенной из чередующихся пяти- и восьмиугольных углеродных колец.

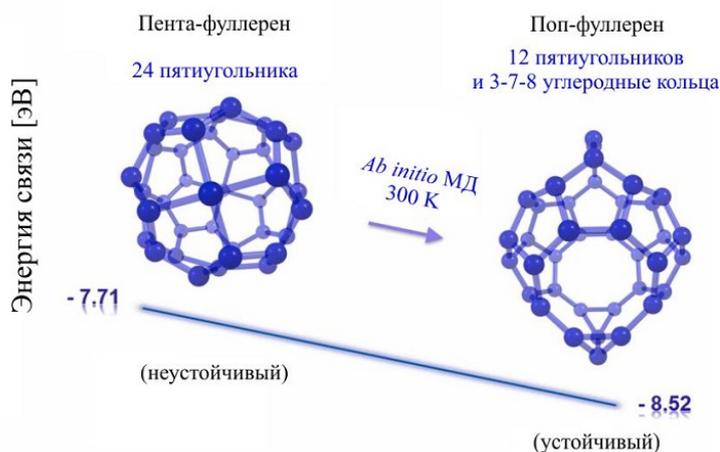


Рис. 2. Иллюстрация процесса трансформации пента-фуллерена в поп-фуллерен в процессе проведения молекулярно-динамического моделирования при 300 К.

Согласно анализу колебательного спектра и расчетам энергий связи поп-фуллерен является устойчивым и, более того, демонстрирует более высокую термодинамическую стабильность, чем самый маленький фуллерен C_{20} , но все же меньшую, чем традиционный C_{60} . Мо-

лекулярно-динамическое моделирование также подтвердило его аномальную термическую устойчивость. Клетка поп-фуллерена не разрушается и сохраняет свою целостность вплоть до 2000 К. Расчеты на уровне теории B3LYP/def2TZVP выявили, что, в основном, длины связей в поп-фуллерене варьируются от 1.37 до 1.51 Å, при этом в структуре присутствует уникальная тройная связь 1.23 Å. Валентные углы находятся в диапазоне от 60° до 146°. Подробный анализ электронных характеристик показал, что поп-фуллерен сохраняет равномерную делокализацию электронов, особенно в области тройной связи и интерфейса между трех-, семи- и восьмиугольными кольцами, и пятиугольниками. Эта однородность способствует устойчивости поп-фуллерена, в то время как уникальные структурные параметры и существенные отклонения от идеальной тригональной молекулярной геометрии влияют на его реакционную способность. По мнению авторов, их работа позволит пересмотреть традиционные критерии стабильности фуллеренов, такие как, например, правило изолированных пятиугольников (IPR), поскольку становится возможным создавать устойчивые фуллерены, построенные в том числе из трех-, семи- и восьмиугольных углеродных колец. Если это действительно так, то скорое экспериментальное получение поп-фуллеренов не заставит себя ждать.

М. Маслов

1. K.Warda et al., *Mater. Today Commun.* 43, 111640 (2025).

КОНФЕРЕНЦИИ

IX Euro-Asian Symposium on “Trends in Magnetism” (EASTMAG-2025), September 13-17, 2025, Yuzhno-Sakhalinsk, Russia

The scientific program of the Euro-Asian Symposium “Trends in Magnetism” - 2025 includes the following topics:

- Spintronics
- Spin-Orbitronics
- Low dimensional magnetism and magnetic nanostructures
- Spin dynamics and magnetic resonances
- Domain walls, vortices and skyrmions
- Micromagnetic simulation and ab-initio calculations in magnetism
- Magnetotransport, magneto-optics and magnetophotonics

- Magnetoelastic, magnetocaloric and shape memory effects
- Frustrated and disordered magnetism
- Magnetism of strongly correlated electron systems
- Magnetism and superconductivity
- Soft and hard magnetic materials and applications
- Magnetic semiconductors, multiferroics, topological insulators
- Magnetic Recording and Information Technology
- Bio-magnetism and Biomedical Applications
- Instruments and techniques for studying magnetism

Deadlines

Registration: **April 30, 2025**

Submission of abstracts: **May 31, 2025**

E mail - eastmag2025@sakhgu.ru

Website - <https://eastmag2025.sakhgu.ru/>

Информационный бюллетень ПерсТ
издается информационной группой ИФТТ РАН

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, З. Пятакова

Выпускающий редактор: И. Фурлетова

Адрес редакции: 119296 Москва, Ленинский проспект, 6