

В этом выпуске:

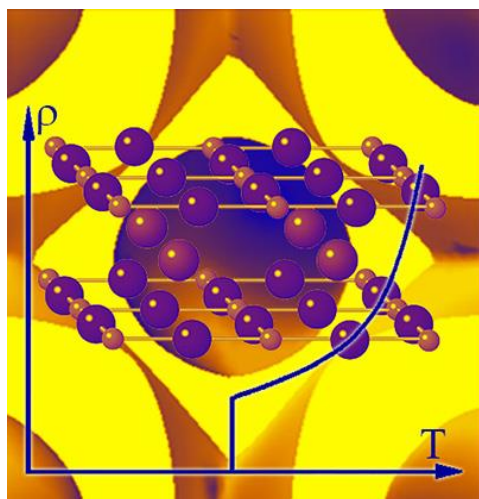
## ДЛЯ ПРАЗДНОГО УМА

### Интересные научные события 2020 года



В традиционной подборке наиболее интересных научных событий 2020 года от Американского физического общества (APS), к счастью, нашлось место не только для новостей о пандемии, трудностях самоизоляции и проблемах расовой дискриминации.

### Новый век сверхпроводимости



Среди основных событий этого года, конечно, следует выделить группу новостей по сверхпроводящей тематике. Во-первых, это долгожданное событие – обнаружение сверхпроводимости при “комнатной” (по крайней мере, для жителей Британии) температуре  $15^{\circ}\text{C}$  [1]. Сверхпроводимость наблюдалась при сверхвысоком давлении  $> 2.5$  млн. атмосфер, достижимом только в алмазных наковальнях, в некотором соединении углерода, водорода и серы, по своим свойствам напоминающем металлический водород.

Другой тенденцией года, представленной в основном в журналах APS, стали исследования недавно открытого безмедного семейства сверхпроводников – никелатов. Несмотря на то, что никель в периодической таблице следует за медью, никелаты не являются простым аналогом хорошо уже известных купратов. По выражению Маттео Рини, автора заметки в Physics, “они имеют свой стиль” [2]: разница, как и в

И далее ...

## ГРАФЕН

- 5      Благородные металлы и графен против токсичных газов

## МУЛЬТИФЕРРОИКИ

- 6      Мультиферроик с ферродолинным упорядочением

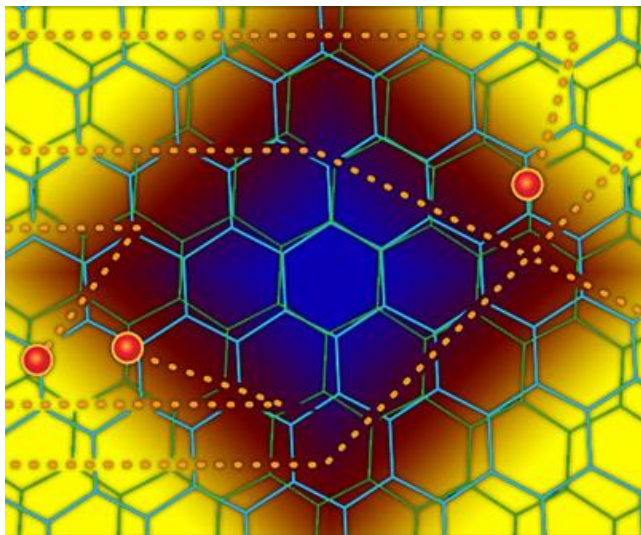
## НАНОМАТЕРИАЛЫ

- 7      Борные сенсоры азотосодержащих загрязнителей

количестве активных орбиталей, для которых происходит делокализация электронов, так и в ширине слоя двумерного электронного газа на границе оксида с подложкой из титаната стронция – одноатомный слой для купратов, и несколько атомных слоев для NdNiO<sub>2</sub> [3].

1. E.Snider et al., *Nature* **586**, 373 (2020).
2. M.Rini, *Physics* **13**, s144 (2020).
3. Y.Zhang et al., *Phys. Rev. B* **102**, 195117 (2020).

### Магические углы в графене



Купраты упоминаются и в новостях про графен, только в своей другой ипостаси – “странных металлов”. Эта фаза наблюдается выше перехода в сверхпроводящее состояние, в котором не работает классическая модель проводимости Друде-Лоренца, а время рассеяния описывается формулой  $\tau = C\hbar/k_B T$ , где  $C$  – константа, близкая к единице. В двуслойном графене, листы которого скрещены под определенным “магическим” углом около 1°, также наблюдается сверхпроводящая фаза и фаза “странного металла”, но, что всего чудеснее, константа  $C$  в законе для времени рассеяния также близка к единице [1]. Учитывая различия в химическом и кристаллическом строении материалов, относящихся к классу странных металлов, куда входят также рутенаты, пниктиды и др., подобное совпадение кажется удивительным, да и не совпадением вовсе.

И здесь стоит присмотреться к самой конструкции  $\hbar/k_B T$ , которая имеет размерность времени. По законам чеховской драматургии, такая комбинация фундаментальных физических постоянных, подобно заряженному ружью, не может не “выстрелить” в другом акте пьесы. Действительно, в космологии, напри-

мер, ей соответствует характерное время, за которое вследствие планковской диссипации (не путать с планковским временем), затухают колебания черной дыры с температурой Хоккинга  $T$ .

1. Y.Cao et al., *Phys. Rev. Lett.* **124**, 076801 (2020).

### Кстати, о черных дырах...

#### Новые рекорды LIGO и Virgo: сверхмассивные и асимметричные слияния черных дыр

Слияния черных дыр, регистрируемые по гравитационным волнам проектами LIGO и Virgo, уже стали рутинной работой. Однако в этом году удалось зарегистрировать ре-



кордное по массе слияние – черные дыры с массами 65 и 85 масс Солнца образовали одну черную дыру массой 142 массы Солнца [1]. Еще одно необычное столкновение наблюдали в существенно асимметричной системе черных дыр массами 8 и 30 масс Солнца [2], которую мы бы назвали “Толстый и тонкий”, а в иностранной литературе окрестили “Лорел и Харди” (по именам комического дуэта, выступавшего на заре кинематографа).

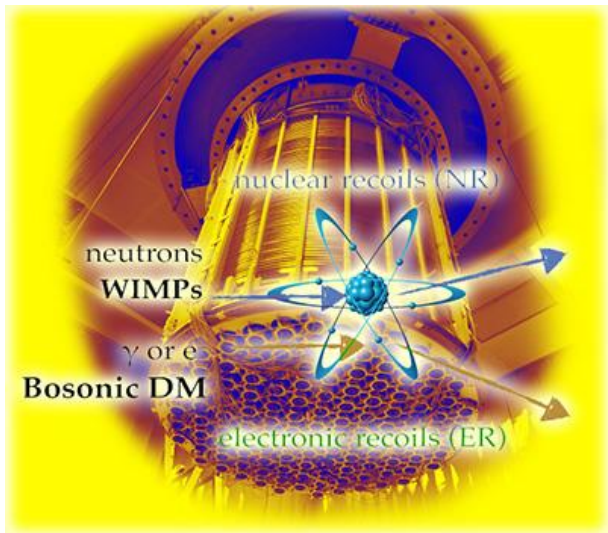
Асимметричные столкновения идеальны для проверки теории относительности в нетривиальных режимах, исследования высших гармоник гравитационных волн – музыки Вселенной.

1. R. Perna, *Physics* **13**, 111 (2020).
2. S.Taylor, *Physics* **13**, 114(2020).

#### Свет от темной материи в эксперименте Xenon

Самым большим потрясением года в области исследований темной материи стали необычные сигналы, зарегистрированные в эксперименте Xenon1T. Этот эксперимент проводится в Италии, глубоко под землей находится бочка, содержащая 3.5 тонны сверхчистого ксенона, окруженная фотоумножителями. Детекторы регистрируют фотоны, возникающие при взаимодействии атомов со слабо взаимодействующи-

ми массивными частицами – кандидатами в темную материю.



Зарегистрировано превышение сигнала над фоном со значимостью 3.5 сигма, и этот сигнал не может быть объяснен известными механизмами. Теоретики опубликовали несколько вариантов возможного объяснения, в том числе – взаимодействие бозонов темной материи с ядрами и электронами. До уровня открытия не хватает статистической значимости (превышение над шумом должно быть больше, чем в 5 раз, а сейчас 3.5), но команда уже готовит к запуску новую экспериментальную установку, содержащую 8 тонн ксенона. Возможно, уже скоро физика за пределами стандартной модели получит шанс на экспериментальное подтверждение.

1. T.Lin, *Physics 13*, 135 (2020).
2. M.Rini, *Physics 13*, s132 (2020).

### Чего не хватает для создания квантового интернета?

Часто в обзорах появляются новости об успехах в создании квантовых компьютеров и телекоммуникационных сетей с квантовым каналом связи. Заметка [1] – редкий случай, когда пишут о трудностях и задачах, стоящих перед научным сообществом.

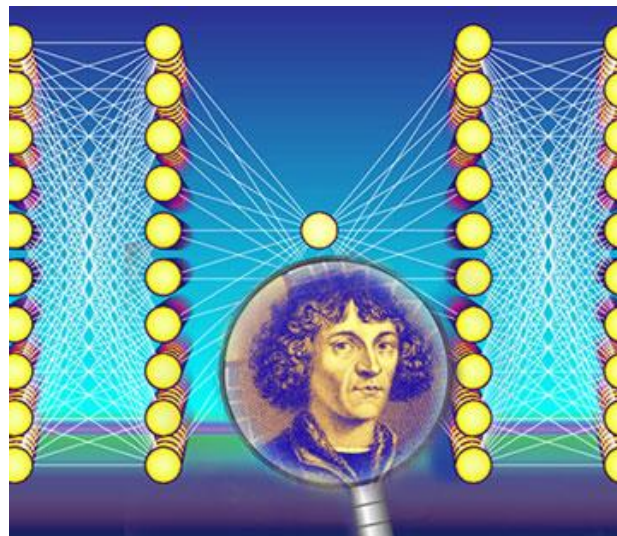


Для того чтобы передавать квантовую информацию на большие расстояния, необходим квантовый повторитель – устройство, которое считывает и переизлучает кубиты, усиливая сигнал. В то же время из общих принципов из *ПерсТ*, 2020, том 27, выпуск 23/24

вестно, что считывание квантового состояния разрушает суперпозицию, что дает квантовому каналу защиту от злоумышленников. Как преодолеть это противоречие, ученые пока не придумали.

1. E.K. Carlson, *Physics 13*, 104 (2020).

### Коперниканский переворот в нейронных сетях



В связи с квантовым компьютером часто вспоминают и об искусственном интеллекте, хотя методы обработки информации с помощью искусственных нейронных сетей реализуются на вполне классическом “железе”. Загадочность нейронных сетей связана не с новыми физическими принципами, а с тем, что исследователи не могут проследить за их работой, как это делается, скажем, при пошаговой отладке программ: отследить все многочисленные связи, возникающие между слоями искусственных нейронов, не представляется возможным. Следить за состоянием двух нейронов в созданном “бутылочном горле” уже намного легче.

Ученые дали нейронной сети задание предсказывать расположение Марса и Солнца на звездном небе Земли по их текущим координатам [1]. Анализируя показания нейронов бутылочного горла, исследователи пришли к выводу, что после тренировки на трех тысячах с лишним примеров нейронная сеть стала представлять данные в виде линейных комбинаций угловых координат относительно Солнца. Другими словами, нейронная сеть спонтанно совершила “коперниканский переворот в мышлении”, перейдя от работы в исходных геоцентрических координатах на гелиоцентрические.

1. R.Iten et al., *Phys. Rev. Lett.* **124**, 010508 (2020).

## Червякомешалка



Исследование “активных” жидкостей, состоящих из большого числа самодвижущихся частиц, сейчас на пике актуальности. В недавней работе, анонсированной в *Physics*

[1], исследователи измеряли вязкость “раствора” живых червей. Для многих сложных жидкостей, содержащих полимерные вещества, известно явление истончения сдвига, когда при больших скоростях сдвига вязкость уменьшается за счет самоупорядочения частиц. Этот эффект хорошо известен в быту на примере кетчупа – чтобы вылить его из бутылки, надо хорошенько потрясти. Исследования на активных жидкостях, в которых элементы могут двигаться самостоятельно, еще только начинаются.

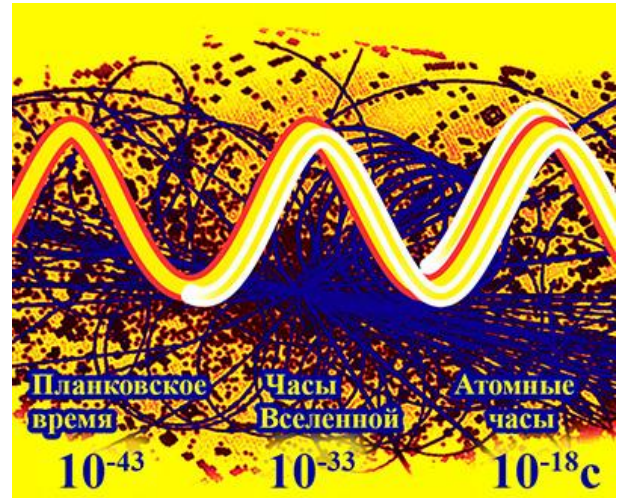
Чтобы изменять подвижность червяков, ученые меняли температуру, а также добавляли в воду этиловый спирт. 5%-й раствор этилового спирта полностью обездвиживал червей, и это, к счастью, было обратимым – через полчаса черви трезвели и снова начинали двигаться.

Червей помещали в ротационный вискозиметр, с возможностью изменения скорости вращения и наблюдениями за их движениями. При малых оборотах раствор подвижных червей был в 10-100 раз менее вязкий, чем раствор неподвижных. При увеличении скорости вязкость раствора уменьшалась, но в активном растворе это уменьшение было значительно меньше, чем в пассивном. Движение червей препятствует их выравниванию, что противоречит современным моделям активных жидкостей. Возможно, это связано с тем, что в моделях задействуют только механизмы изгиба, и не рассматривают сокращения и удлинения, но не исключено, что есть у червей определенное социальное взаимодействие или реакция на стресс, о которых еще не подозревают теоретики.

1. M.Schirber, *Physics* **13**, 76, (2020).

## Вселенский метроном и предел точности атомных часов

От приземленной темы червей снова воспарим мыслью в просторы Вселенной ...



Время, по расчетам современных теоретиков, не является непрерывной переменной, а квантуется, образуя фундаментальные часы, пронизывающие Вселенную, подобно полю Хиггса. Взаимодействие любой колебательной системы, такой как атомные часы, с часами Вселенной, приводит к рассинхронизации, так что ни один физически реализуемый маятник не может поддерживать неизменный период колебаний. Рассчитанный период колебаний часов Вселенной составил  $10^{-33}$  секунды, что на 15 порядков меньше предела измерения современных атомных часов [1]. Наличие такого фундаментального предела, как ни странно, не ограничивает, а расширяет возможности проведения точных измерений временных интервалов, поскольку можно использовать не сами часы, а разность их хода.

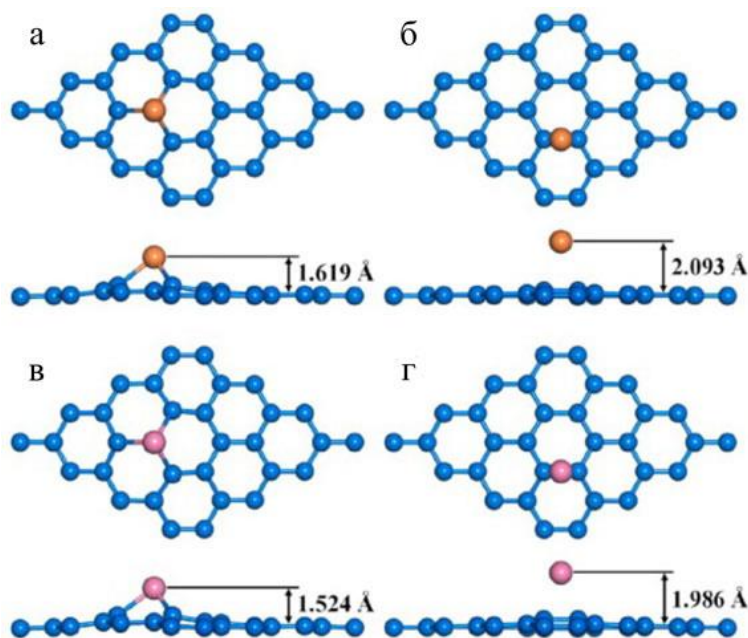
1. K.Wright, *Physics* **13**, 99 (2020).

3. Пятакова, А.Пятаков

## ГРАФЕН

### Благородные металлы и графен против токсичных газов

В работе [1] авторы оценили влияние атомов платины и палладия на адсорбционные свойства графена по отношению к молекулам CO, H<sub>2</sub>S и SO<sub>2</sub>. Дело в том, что угарный газ (CO) и сероводород (H<sub>2</sub>S) – это токсичные газы, которые способны привести к серьезным повреждениям дыхательной и центральной нервной систем человека или даже к смерти, а диоксид серы (SO<sub>2</sub>) является распространенным загрязнителем атмосферы. Таким образом, их обнаружение и контроль становятся важной проблемой защиты окружающей среды и здоровья людей. В последние годы в качестве эффективных сенсоров вредных веществ рассматриваются устройства на основе графена и его производных. Как раз для этих целей в работе [1] исследователи предлагают использовать графен, декорированный и допированный атомами благородных металлов, платины и палладия. При этом авторы разделяют понятия допированный и декорированный. Если под первым понимается ковалентное связывание атома металла с поверхностью графена, то декорирование, напротив, не характеризуется образованием химических связей (см. рис.).



Оптимизированные атомные конфигурации графена, допированного (а) и декорированного (б) палладием, и графена, допированного (в) и декорированного (г) платиной. Синие, оранжевые и розовые шары соответствуют атомам углерода, палладия и платины, соответственно.

С помощью теории функционала плотности они проанализировали как благородные металлы изменяют электронные свойства графена в случае адсорбции молекул токсичных газов. Расчеты авторы проводили в программе Dmol<sup>3</sup> на уровне теории PBE/DNP с учетом слабого ван-дер-ваальсового взаимодействия. Они рассмотрели различные конфигурации относительного расположения молекул газа на модифицированном графене. Авторы установили, что и допирование, и декорирование благородными металлами, во-первых, создает относительно активные центры адсорбции, а, во-вторых, изменяет величину диэлектрической щели в случае присоединения к поверхности графена молекулы газа, что дает возможность ее регистрации по изменению проводимости материала. Результаты теоретического анализа свидетельствуют о высокой чувствительности комплекса из графена и атомов благородных металлов ко всем трем рассматриваемым газам. Так, для молекул CO величина энергии адсорбции на декорированном атомами платины графене составляет более 3 эВ, что приблизительно в тридцать семь раз больше, чем у CO на незамещенном образце. Однако, сравнивая между собой допированный и декорированный графен, исследователи пришли к выводу, что в последнем случае энергии адсорбции CO, H<sub>2</sub>S и SO<sub>2</sub> выше, а расстояние между молекулами газа и адсорбционным центром – меньше. В конечном итоге авторы приходят к выводу, что адсорбционные свойства графена могут быть существенно улучшены с помощью декорирования атомами благородных металлов, и это позволит использовать его в качестве перспективного чувствительного к молекулам токсичных газов материала.

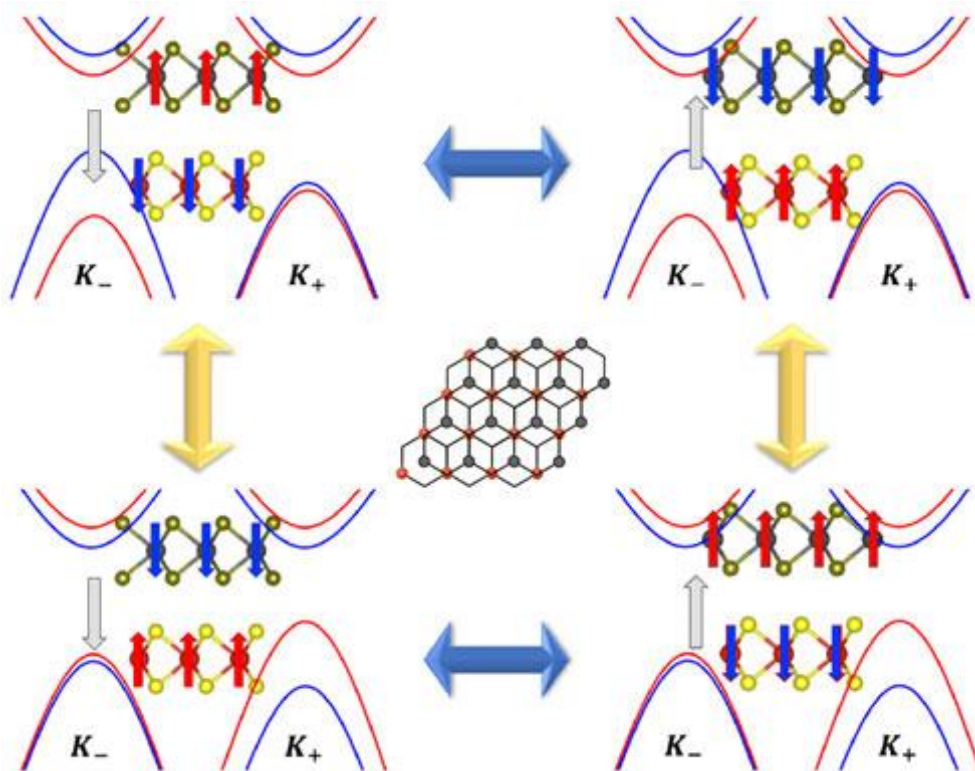
М. Маслов

*I. Y. Qu et al., Comput. Theor. Chem. 1196, 115115 (2021).*

## МУЛЬТИФЕРРОИКИ

### Мультиферроик с ферродолинным упорядочением

Помимо заряда и спина у электрона в кристалле может быть еще одна степень свободы – “долинная”. Если снимается вырождение по этой степени свободы, то говорят о долинной поляризации, а материалы, в которых существует спонтанная долинная поляризация, по аналогии с ферромагнитными, можно назвать ферродолинными (“ferrovalley”) [1].



ные состояния в точках  $K^+$  и  $K^-$  зоны Бриллюэна); Красными и синими линиями показаны электронные состояния для электронов со спинами вверх и вниз, соответственно. На центральном рисунке представлен вид материала сверху, показаны только атомы ванадия [2].

Благодаря наличию скользящей плоскости симметрии в атомной структуре двумерного кристалла, сдвиг двух слоев относительно друг друга соответствует переключению направления электрической поляризации, а также перемене местами ионов, принадлежащих двум антиферромагнитным подрешеткам. Другими словами, с помощью электрического поля можно переключать не только электрическую поляризацию, но и вектор антиферромагнетизма. При этом, как показывает расчет электронных состояний в точках  $K^+$  и  $K^-$ , долинная поляризация остается неизменной (рис. 1, горизонтальные ряды). Напротив, операция инверсии времени приводит к переключению антиферромагнитного параметра порядка и долин-

Дополнительный вид упорядочения естественным образом рождает вопрос о возможности его взаимодействия с другими, более традиционными – магнитным и сегнетоэлектрическим параметрами порядка.

Как показано в статье [2] исследователей из Шанхайского университета (Китай) и МГУ им. М.В. Ломоносова, примером такого материала может служить двумерный мультиферроик дисульфид ванадия  $VS_2$ .

Рис. 1. Связь между различными видами упорядочения в  $VS_2$ : горизонтальные двойные стрелки соответствуют преобразованию скользящего отражения в горизонтальной плоскости, меняющей местами магнитные подрешетки и направление электрической поляризации (серая стрелка), но оставляющей неизменной электронную структуру; вертикальные обоюдоострые стрелки соответствуют операции инверсии времени (переключаются как направления намагниченности подрешеток, так и долинная поляризация, что видно по тому, как меняются электрон-

ной поляризации (рис. 1, вертикальные ряды). Таким образом, долинная поляризация исполняет роль связующего звена между сегнетоэлектрическим и антиферромагнитным упорядочениями.

Действие нового механизма магнитоэлектрической взаимосвязи не ограничивается конкретным соединением  $VS_2$ , но распространяется и на другие двуслойные мультиферроики, которые будут найдены впоследствии.

А. Пятаков

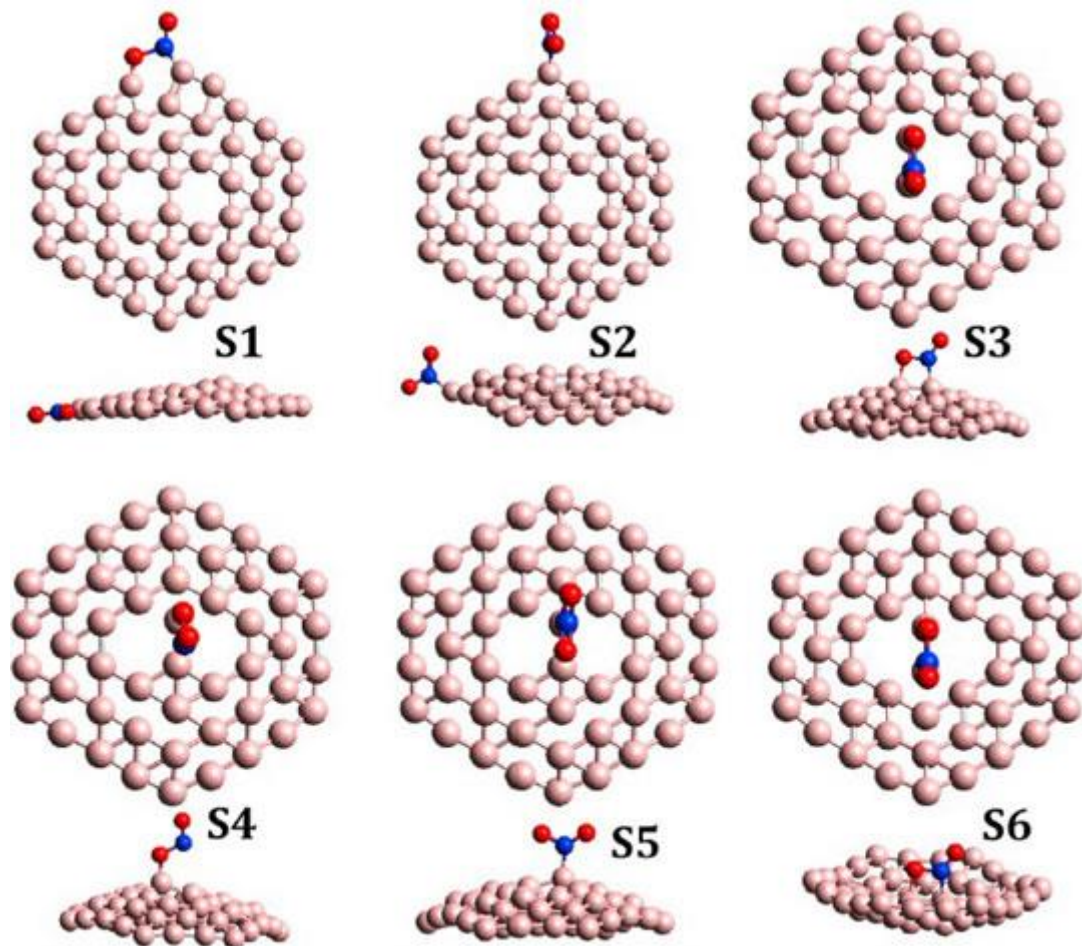
1. W-Yi Tong et al., *Nature Commun.* **7**, 13612 (2020).
2. X. Liu et al., *Phys. Rev. Lett.* **125**, 247601 (2020).

## НАНОМАТЕРИАЛЫ

### Борные сенсоры азотосодержащих загрязнителей

Очередной сенсор вредных веществ предлагают исследователи из Sichuan Agricultural Univ. (Китай) [1], на этот раз на основе чистого бора, а именно квазидвумерной молекулы  $B_{50}$  (см. рис.). С помощью теории функционала плотности они изучили процессы адсорбции на  $B_{50}$  молекул газов  $NO$ ,  $NO_2$  и  $NH_3$ , которые являются достаточно ядовитыми веществами, негативно влияющими на окружающую среду и здоровье человека. Авторы использовали функционал B3LYP с учетом дальнедействующих дисперсионных поправок и электронные базисы Def2-SVP для получения оптимизированных атомных структур и частотного анализа и Def2-TZVP для расчетов энергий адсорбции и электронных характеристик.

Все расчеты исследователи выполняли в программном пакете ORCA. Кроме того, для понимания природы связывания адсорбированных молекул газа с поверхностью  $B_{50}$  с помощью программы MULTWFN авторы провели топологический анализ электронной плотности и рассчитали ряд квантово-химических дескрипторов, в том числе функции Фукуи, молекулярный электростатический потенциал (MEP) и функции локализации электрона (ELF). Молекулярный электростатический потенциал и функции Фукуи использовались для поиска наиболее подходящих центров адсорбции. Ученым удалось установить, что молекулы  $NO$ ,  $NO_2$  и  $NH_3$  “предпочитают” присоединяться к низкокоординированным атомам бора, которые расположены на краю листа  $B_{50}$  (см.рис.).



Оптимизированные структуры квазидвумерной системы  $B_{50}$  с адсорбированной на ней молекулой диоксида азота  $NO_2$  на различных атомных центрах.

При этом абсолютные величины энергий адсорбции свидетельствуют именно о химическом связывании. На основании более детального анализа электронных характеристик авторы полагают, что связи B-O и B-N в исследуемых

системах частично имеют ковалентную природу. Согласно полученным величинам полупроводниковой щели, существенное ее изменение наблюдается при присоединении молекулы  $NO_2$  (см. рис.). Таким образом, по мне-

нию исследователей, поверхность  $V_{50}$  является перспективным сенсором именно для диоксида азота. Возможно, представленная работа стимулирует дальнейшие экспериментальные исследования борсодержащих наноматериалов в качестве адсорбентов или молекулярных сенсоров, и они смогут составить достойную конкуренцию системам, построенным на основе графена.

*М. Маслов*

*I. X.Sun et al., Mater. Chem. Phys. 260, 124104 (2021).*

*Дорогие наши читатели!  
Поздравляем вас и ваших близких с наступающим Новым годом и Рождеством!*

*Пусть Новый год чудесной сказкой*

*Войдёт в уютный,  
светлый дом,  
Пусть мир он сделает прекрасным,  
Забить заставит о былом!*

*Загадочно огни сверкают,  
Кружиться в танце снежный вальс,  
И праздник люди все встречают  
Оставив в прошлом ложь и фальшь.  
Желаем вам в году грядущем  
Любви, удачи и тепла,  
Чтоб самой яркой, самой лучшей,  
Счастливой ваша жизнь была!*



*Редакция и авторы ПерсТа*

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

Главный редактор: И.Чугуева, e-mail: [ichugueva@yandex.ru](mailto:ichugueva@yandex.ru)

Научные редакторы К.Кугель, Ю.Метлин

В подготовке выпуска принимали участие М.Маслов, А.Пятаков, З.Пятакова

Выпускающий редактор: И.Фурлетова

Адрес редакции: 119296 Москва, Ленинский проспект, 64