

В этом выпуске:

СВЕРХПРОВОДНИКИ

Джон Бардин и безмедные ВТСП

28 мая 2008 г. исполнилось 100 лет со дня рождения Джона Бардина – единственного в истории человека, удостоенного Нобелевской премии по физике дважды: первый раз – за открытие транзисторов, а второй – за создание в 1957 г. микроскопической теории сверхпроводимости БКШ. На протяжении почти 30 лет свойства всех известных сверхпроводников удавалось более или менее сносно описать в рамках этой теории. После открытия в 1986 г. купратных ВТСП Бардин был восхищен, ведь чуть раньше он предложил несколько нефононных моделей сверхпроводимости с электронным механизмом спаривания (функцию фононов в этих моделях выполняли спиновые флуктуации). Бардин полагал, что именно такой механизм действует в купратах, а стандартная теория БКШ к ним не применима.

Недавнее неожиданное открытие безмедных слоистых ВТСП ReOFeAs с максимальной $T_c > 50$ К (пока...) бросает теории БКШ еще один вызов: уж больно подозрительным выглядит присутствие в их кристаллической решетке атомов железа, которое у всех ассоциируется с ферромагнетизмом (а сильные магнитные поля разрушают “обычную” сверхпроводимость). Наличие в недопированных соединениях ReOFeAs структурного (при $T \approx 150$ К) и антиферромагнитного (при $T \approx 130$ К) фазовых переходов только запутывает ситуацию. Известный теоретик Д.Пайнс заметил, что “если бы Бардин был жив, он сразу стал бы сторонником магнитного механизма спаривания в безмедных ВТСП, но при этом, прежде всего сначала дождался бы надежных экспериментальных результатов на качественных образцах (особенно по ЯМР) и лишь тогда принялся бы за расчеты...”.

*По материалам заметки “Has lightning struck twice?”,
M.Chiao, Nature Phys. 4, 446 (2008)*

Изучаем безмедные ВТСП

Ведущие научные журналы продолжают публикацию работ, посвященных исследованиям различных свойств высокотемпературных сверхпроводящих оксипниктидов¹ $\text{LnO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$ (Ln – редкоземельный металл) с температурами сверхпроводящего перехода T_c до 50 К и даже чуть больше. Ниже представлен краткий обзор некоторых наиболее интересных результатов.

Если в первых открытых безмедных ВТСП сверхпроводимость появлялась при допировании исходного несверхпроводящего соединения LaOFeAs [1] электронами (путем замещения $\text{O} \rightarrow \text{O}_{1-x}\text{F}_x$), то позже выяснилось [2], что дырочное допирование (при замещении $\text{La} \rightarrow \text{La}_{1-x}\text{Sr}_x$) также приводит к сверхпроводимости. Таким образом, в этом отношении безмедные ВТСП ведут себя подобно их купратным собратьям. Однако “родительские” состояния у них различные. Если недопированные купраты являются диэлектрика-

¹ Пниктиды – соединения, содержащие элементы V группы Периодической таблицы, такие как азот, фосфор, мышьяк и др.

И далее ...

КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ

2 Помехоустойчивые квантовые вычисления с ионами в ловушке

3 В поисках спиновой жидкости
Алмазные кубиты при комнатной температуре

4 Оптический чип для квантовых вычислений

НАНОСТРУКТУРЫ, НАНОТЕХНОЛОГИИ, НАНОЭЛЕКТРОНИКА

5 Отсутствие “adiaбатического предела” в низкоразмерных системах

6 “Молекулярное состояние” коррелированных электронов в квантовой точке

Воздействие наноматериалов на окружающую среду

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

9 Фуллерены в нанотрубке

КОНФЕРЕНЦИИ

9 XIII Национальная конференция по росту кристаллов (НКРК-2008), 17-22 ноября 2008, Москва, Россия

10 (INTERMATIC-2008), 21-23 октября 2008г., Москва, Россия

«Молодые ученые-2008», 10-13 ноября 2008 г., Москва, Россия

Classical and Quantum Transport in the Presence of Disorder, 15-19 December 2008, Cambridge, UK

ми (антиферромагнитными или моттовскими), то недопированные оксиднитиды представляют собой, согласно разным точкам зрения, либо немагнитные металлы, либо антиферромагнитные полуметаллы. Исследования структуры и магнитных характеристик LaOFeAs методом нейтронной дифракции [3] показали, что при понижении температуры сначала, при $T = 155$ К, происходит структурный переход из тетрагональной в моноклинную фазу, а затем, при $T = 137$ К, формируется дальний антиферромагнитный порядок с волной спиновой плотности (рис.1). Замещение $O \rightarrow O_{0.92}F_{0.08}$ подавляет оба эти перехода и ведет к сверхпроводимости с $T_c = 26$ К. К аналогичным выводам пришли и авторы работы [4], изучавшие магнитные свойства $SeO_{1-x}F_xFeAs$. Таким образом, и в безмедных, и в купратных ВТСП сверхпроводящее состояние соседствует с антиферромагнитным, что дает некоторым теоретикам повод говорить о нефононном механизме спаривания носителей и в тех, и в других.

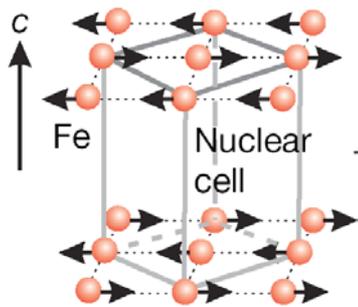


Рис. 1. Антиферромагнитная структура недопированного оксиднитида LaOFeAs.

Измерения температурной зависимости верхнего критического магнитного поля H_{c2} в $LaO_{0.89}F_{0.11}FeAs$ показали [5], что величина $H_{c2}(0) = (62 \div 65)$ Тл значительно больше, чем можно было бы ожидать для однозонного сверхпроводника на основании величины производной $dH_{c2}/dT \approx 2$ Тл/К вблизи T_c . Из этого авторы [5] делают вывод о двухзонной сверхпроводимости оксиднитидов, как и в MgB_2 . Интересно, что T_c безмедных ВТСП и MgB_2 очень близки (и гораздо меньше T_c купратных ВТСП). Так, может быть, достижению более высоких T_c мешает именно двухзонность?

Китайские физики, использовавшие для определения величины сверхпроводящей щели Δ в $SmO_{0.85}F_{0.15}FeAs$ андреевскую спектроскопию, напротив, пришли к заключению об однозонной сверхпроводимости [6]. Они нашли $2\Delta = (13.34 \pm 0.3)$ мэВ, что соответствует $2\Delta/k_B T_c = 3.68$ – очень близко к БКШ-величине 3.53. Более того, температурная зависимость $\Delta(T)$ во всем диапазоне $0 < T < T_c$ отлично согласуется с теорией БКШ (рис.2). Вывод о фононном механизме спаривания из этого, конечно, сделать нельзя. Можно лишь говорить о причастности к сверхпроводимости каких-то бозонных возбуждений. Каких – еще предстоит разобраться. Но уже сейчас ясно, что параметр сверхпроводящего порядка в оксиднитиде не имеет нулей на поверхности Ферми – в отличие от куп-

ратных ВТСП. Никаких “псевдощелевых особенностей” авторы [6] также не обнаружили.

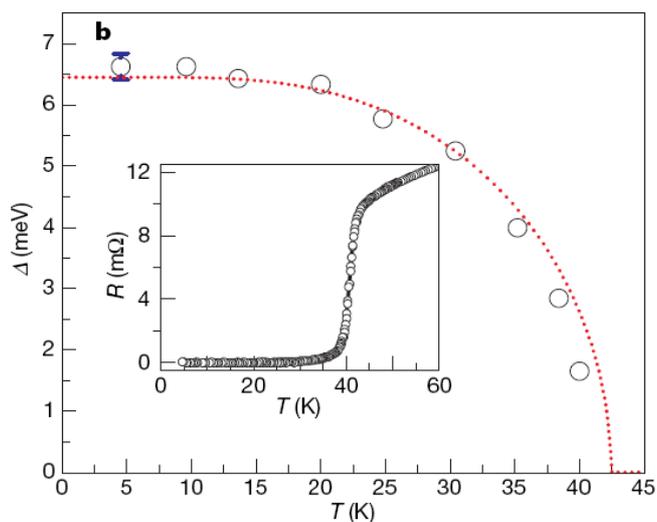


Рис. 2. Кружки – сверхпроводящая щель Δ в $SmO_{0.85}F_{0.15}FeAs$ по данным работы [6]. Пунктирная линия – $\Delta(T)$ в теории БКШ. На вставке – температурная зависимость сопротивления.

Л.Оленов

1. Y.Kamihara et al., *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 3296 (2008).
2. H.H.Wen et al., *Europhys. Lett.* **82**, 17009 (2008).
3. C. de la Cruz et al., *Nature* **453**, 899 (2008).
4. G.F.Chen et al., *Phys. Rev. Lett.* **100**, 247002 (2008).
5. F.Hunte et al., *Nature* **453**, 903 (2008).
6. T.Y.Chen et al., *Nature* **453**, 1224 (2008).

КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ

Помехоустойчивые квантовые вычисления с ионами в ловушке

Охлажденные до низких температур ионы в ловушке предполагается использовать в качестве физических носителей квантовых битов (кубитов). Для них уже экспериментально продемонстрирован набор так называемых “универсальных” логических операций, что в принципе позволяет осуществлять достаточно сложные квантовые вычисления. С целью исправления погрешностей, неизбежно возникающих из-за неидеальности вычислительных устройств и их неконтролируемого взаимодействия с окружением, разработаны специальные методы коррекции квантовых ошибок. Но эти методы позволяют исправить лишь незначительные огрехи. Существует пороговая величина относительной погрешности одной операции (по разным оценкам – от 10^{-4} до 10^{-2}), превышение которой приводит к потере контроля над эволюцией квантового состояния, и никакая коррекция тут уже не поможет. Если для однокубитных операций с ионами добиться такой точности не представляет особого труда, то с двухкубитными дело обстоит значительно хуже, поскольку расстояние между соседними ионами в ловушке значительно превышает характерный

масштаб ион-ионного взаимодействия. Поэтому пока даже к нижней границе 10^{-2} приблизиться не удалось.

В работе [1] австрийские физики впервые преодолели рубеж 10^{-2} . Для двухкубитных операций с парой заключенных в ловушку ионов $^{40}\text{Ca}^+$ они использовали модулированный по амплитуде лазерный импульс, одновременно взаимодействующий с обоими ионами. Роль логических нулей и единиц играли, соответственно, основные и возбужденные состояния каждого иона, $|S\rangle = S_{1/2}(m=1/2)$ и $|D\rangle = D_{5/2}(m=3/2)$. Адиабатически включая и выключая взаимодействие ионов с лазерным излучением, авторы [1] переводили распутанное состояние двух ионов в максимально запутанное (белловское) и обратно: $|SS\rangle \rightarrow |SS\rangle + i|DD\rangle \rightarrow |DD\rangle \rightarrow |DD\rangle + i|SS\rangle \rightarrow |SS\rangle \rightarrow \dots$. Время операции перепутывания кубитов составило 50 мкс, а ее погрешность – всего лишь $7 \cdot 10^{-3}$. Более того, пара кубитов была последовательно запутана и распутана 9 раз! И хотя суммарная погрешность при этом монотонно увеличивалась (ведь коррекция ошибки пока не проводилась), но все же оставалась достаточно низкой. Полученные результаты – большой шаг вперед на пути к помехоустойчивым операциям с кубитами. Развита в [1] методика может быть использована и для одновременного запутывания сразу нескольких кубитов.

Л.Опенев

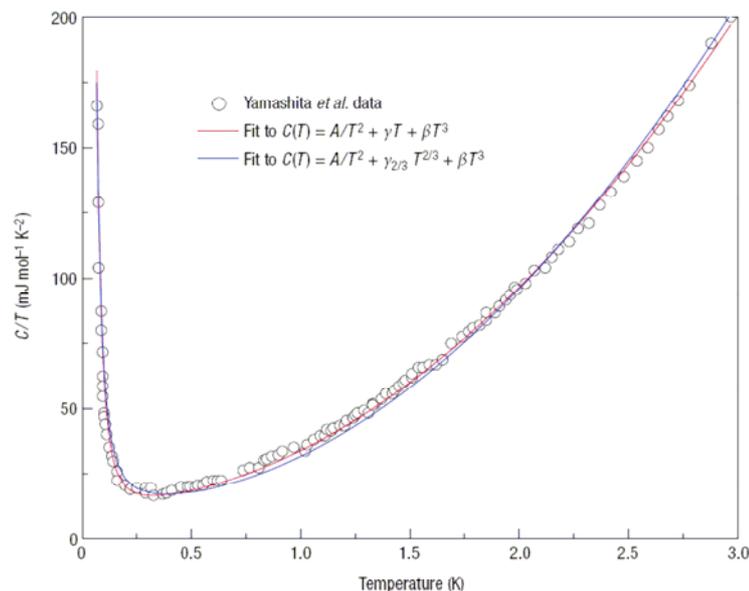
1. J.Benhelm et al., *Nature Phys.* **4**, 463 (2008).

В поисках спиновой жидкости

Коллективное поведение спинов в твердотельных системах представляет интерес как с фундаментальной, так и с практической точек зрения. Уже довольно давно было теоретически предсказано [1,2] состояние квантовой спиновой жидкости (КСЖ), в которой из-за квантовых флуктуаций спиновый порядок отсутствует даже при $T=0$. Экспериментальные указания на возможность наличия КСЖ в органике $k\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{Cu}_2(\text{CN})_3$ были получены в ходе исследований объемной магнитной восприимчивости и ЯМР, не обнаруживших признаков дальнего магнитного порядка [3]. Недавно из Японии пришло сообщение [4] о результатах измерения температурной зависимости теплоемкости C монокристаллов этого квазидвумерного органического соединения при $T \geq 75$ мК (см. рис.). При высоких температурах преобладает фонный вклад ($\sim T^3$), при низких – вклад от уровней сверхтонкой структуры ($\sim T^2$), а количественного описания экспериментальных данных в области $T = (0.3 \div 1.5)$ К удается добиться, лишь допустив наличие у $C(T)$ линейной по T (или пропорциональной $T^{2/3}$) составляющей (такое поведение $C(T)$ дают для КСЖ теоретические модели). Однако этой составляющей отвечают всего лишь 2.5% от полной величины энтропии $R \ln 2$ для частиц со спином 1/2.

ПерсТ, 2008, том 15, выпуск 13/14

Иными словами, только 2.5% спиновых степеней свободы участвует в формировании КСЖ. В каком состоянии находятся остальные спины и как они влияют на КСЖ, еще предстоит разобраться. А пока в литературе обсуждается возможность управления течением КСЖ посредством обычных электродов. Если это удастся сделать, то КСЖ найдет свою нишу в спинтронике.



Теплоемкость $k\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{Cu}_2(\text{CN})_3$. Кружки – экспериментальные данные [4]. Сплошные линии – теоретические зависимости.

Л.Опенев

1. P.W.Anderson, *Mater. Res. Soc. Bull.* **8**, 153 (1973).
2. B.S.Shastry, B.Sutherland, *Physica B* **108**, 1069 (1981).
3. Y.Shimizu et al., *Phys. Rev. Lett.* **91**, 1007001 (2003).
4. S.Yamashita et al., *Nature Phys.* **4**, 459 (2008).

Алмазные кубиты при комнатной температуре

В статье немецких и японских ученых сообщается о результатах исследования запутанных состояний трех спиновых кубитов в алмазе при комнатной температуре [1].

Основой для кубитов является дефект типа вакансии, который создает атом азота, внедренный в кристаллическую решетку алмаза (рис. 1А). Электронное состояние на вакансии имеет спин $S=1$, но самое главное, что это состояние очень медленно релаксирует. Время T_1 спонтанного перехода между состояниями спина при комнатной температуре составляет несколько миллисекунд, а время фазовой памяти T_2 – около 0.6мс. Столь слабая релаксация обусловлена тем, что состояние находится глубоко в запрещенной зоне и локализовано на расстоянии равном постоянной решетки. Это обстоятельство ослабляет взаимодействие с фононами – главными виновниками спиновой релаксации. Электронные

состояния на мелких центрах и в зоне проводимости даже при очень низких температурах релаксируют в течение микросекунд. В качестве одного из кубитов в данной работе используются два состояния с разной проекцией спина $m_s=0$ и $m_s=-1$. В качестве других кубитов используются состояния спина $1/2$ двух соседних ядер изотопа ^{13}C . Содержание изотопов ^{12}C и ^{13}C в алмазе приблизительно равно, поэтому образование требуемой комбинации (два изотопа ^{13}C вблизи азотной вакансии) весьма вероятно. Электрон связывается с ядерным спином за счет сверхтонкого взаимодействия. На рис. 1В показаны разрешенные переходы в системе, состоящей из одного электронного и двух ядерных спинов.

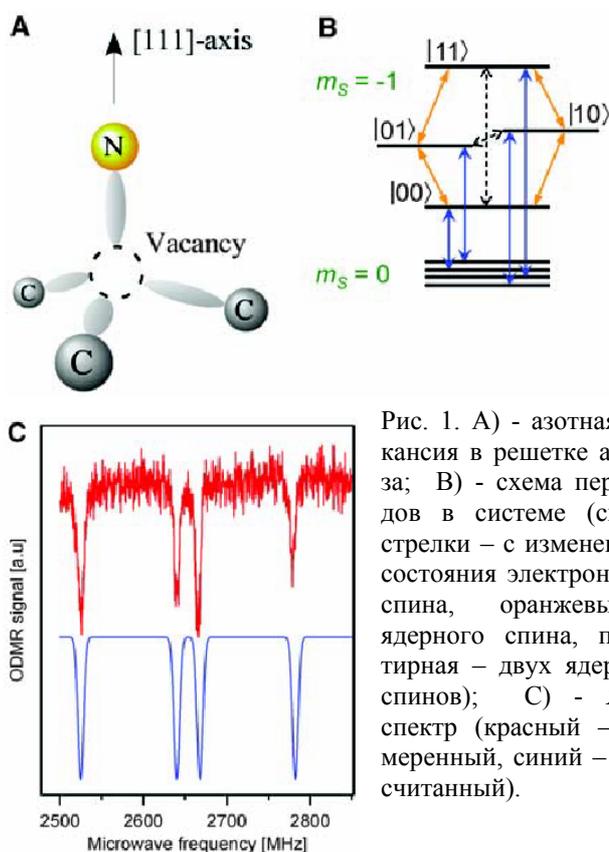


Рис. 1. А) - азотная вакансия в решетке алмаза; В) - схема переходов в системе (синие стрелки – с изменением состояния электронного спина, оранжевые – ядерного спина, пунктирная – двух ядерных спинов); С) - ЯМР спектр (красный – измеренный, синий – рассчитанный).

Указанные переходы можно индуцировать и детектировать средствами ЯМР спектроскопии (рис. 1С). В результате удалось создавать и измерять запутанные состояния трех кубитов, а также определять времена их декогерентизации, что и представлено в статье [1].

Знаменитый квантовый компьютер Кейна на атомах фосфора в кремнии изначально был предназначен для работы при сверхнизких температурах. А тут предлагаются квантовые биты, работающие при комнатной температуре. Должна быть какая-то расплата за это достижение. Она, действительно, есть, причем, максимально высокая. Из таких кубитов очень трудно создать полномасштабный квантовый компьютер. Волновые функции электронов на соседних вакансиях практически не перекрываются, поэтому прямого взаимодействия между ними нет. Теоретически вакансии могут взаимодействовать с

помощью фотонов, однако это взаимодействие очень не просто устроить и еще сложнее им управлять.

В.Вьюрков

I. P. Neumann et al., Science 320, 1326 (2008).

Оптический чип для квантовых вычислений

Сотрудники University of Bristol (Англия) объявили о том, что они открыли новую страницу в истории оптических квантовых компьютеров [1]. Ими впервые изготовлена и исследована интегральная оптическая схема на основе silica-on-silicon (оксид кремния на кремнии), которая по габаритам значительно меньше прежних весьма громоздких установок.

Однако, сначала немного истории. Фотоны являются идеальными кубитами: долго живут и легко управляются. В то же время, фотоны плохо взаимодействуют друг с другом. Чтобы уйти от этого недостатка в 2002 г. была предложена оптическая схема, состоящая только из линейных элементов, на которой можно выполнить операцию CNOT [2]. В схеме используются волноводы и делительные пластины (beam splitter – BS), которые «замешивают» фотоны в различных волноводах. Два базовых состояния кубита таковы: фотон находится в одном волноводе или в другом. Естественно у такого кубита возможны и суперпозиционные состояния. На рис. 1С представлена предложенная схема, которая как раз и реализует операцию CNOT в рассматриваемом эксперименте [1]. Два волновода С соответствуют управляющему кубиту, а два волновода Т – управляемому. Кроме того, в схеме присутствуют дополнительные волноводы V. Волноводы соприкасаются на некотором протяжении так, что фотоны могут просачиваться из одного волновода в другой. Дробь на рисунке соответствует вероятности остаться в исходном волноводе. Соприкосновение волнопроводов играет ту же самую роль, что и делительные пластины в громоздких оптических схемах. Если фотоны являются идентичными, т.е. имеют одинаковую энергию и поляризацию, то, проходя связанные волноводы, они оказываются в запутанном состоянии. Однако этого еще мало. Для реализации операции CNOT требуется проведение некоторого измерения. Если на выходе в каналах С и Т окажется ровно по одному фотону, то операция выполнена правильно, в остальных случаях – неправильно. Вероятность удачного исхода равна $1/9$. Измерение требуется произвести неразрушающее, чтобы фотоны могли быть использованы в дальнейших вычислениях. Это означает регистрацию факта прохождения фотонов без их поглощения. В качестве кандидата на подобное измерение был указан эффект Керра, который состоит в изменении диэлектрической проницаемости среды под действием электрического поля. Фотоны при этом не поглощаются. Линейный эффект Покеельса, естественно, не годится для осциллирующего поля. Пока со-

вершено не ясно, можно ли реально организовать подобное измерение. Вместо этого в 2004 г. было предложено использовать вспомогательные фотоны, над которыми и производят обычное разрушающее (с поглощением) измерение [3], при этом основные фотоны остаются целыми. Процент благоприятных исходов остался прежним – 1/9.

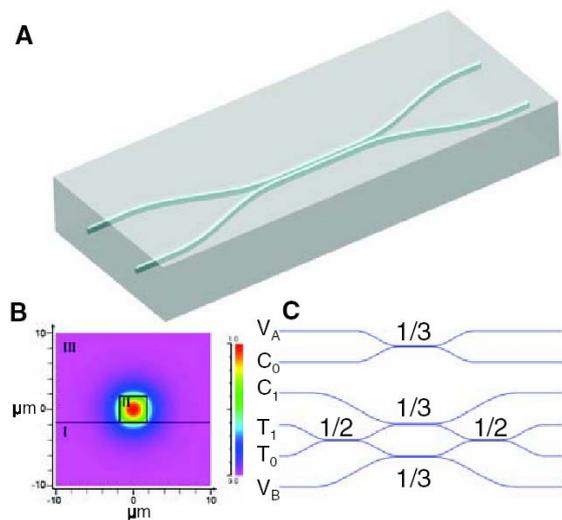


Рис. 1. А) - два связанных световода – основной элемент схемы; В) распределение поля в сечении волновода; С) - схема, реализующая CNOT после детектирования фотонов на выходе: С – управляющий кубит, Т – управляемый кубит.

В представляемой работе [1] была реализована упрощенная схема (рис. 1С) исходной работы [2]. Волноводы были выполнены из оксида кремния на кремниевой подложке (рис. 1А). На рис. 1В представлено рассчитанное распределение интенсивности в поперечном сечении волновода. Исследования показали успешную работу схемы. Интегральная схема, конечно, гораздо лучше громоздкой оптической схемы. Однако радужные перспективы на этом пути развития все же сомнительны. Помимо очевидных технологических сложностей (требуются синхронизированные источники и детекторы одиночных фотонов, а также точная настройка элементов схемы), следует указать на принципиальную проблему. В случае неудачного исхода операции CNOT придется запускать компьютер с самого начала. Если в алгоритме N таких операций, то для получения правильного результата компьютер придется запускать 9^N раз! Эта экспонента напрочь «забывает» любое ускорение вычислений с помощью квантовых алгоритмов. Этот факт хорошо известен специалистам в области квантовых компьютеров, однако не все о нем честно сообщают, как это делает ПерсТ. Отметим, что традиционная схема квантового компьютера на взаимодействующих кубитах использует детерминированные операции CNOT.

В.Вьюрков

1. A. Politi et al., *Science* **320**, 646 (2008).
2. T. C. Ralph et al., *Phys. Rev. A* **65**, 062324 (2002).

3. S. Casparoni et al., *Phys. Rev. Lett.* **93**, 020504 (2004).

НАНОСТРУКТУРЫ, НАНОТЕХНОЛОГИИ, НАНОЭЛЕКТРОНИКА

Отсутствие “адиабатического предела” в низкоразмерных системах

В физике и технологии важную роль играют так называемые адиабатические процессы. В термодинамике они формально определяются как процессы, в ходе которых система не обменивается теплом с окружением, и поэтому ее энтропия остается неизменной. Обычно такие процессы протекают за времена, малые по сравнению со временем термализации (установления теплового равновесия с окружающей средой), но большими по сравнению с характерными “собственными” временами системы. Для изолированной системы адиабатическим называется процесс, при котором не меняется ее полная энергия. Аналог адиабатической теоремы в квантовой механике гласит, что при достаточно медленном изменении параметров гамильтониана переходы между энергетическими уровнями отсутствуют. Если какой-то параметр k меняется от k_A до k_B за время Δt , то энергия системы оказывается равной $E_B(\delta) = E_B(0) + \beta\delta^2$, где $\delta = (k_B - k_A)/\Delta t$ – скорость изменения k , а β – положительный коэффициент (линейное по δ слагаемое отсутствует, так как, согласно общим законам термодинамики, при $\delta \neq 0$ энергия может только увеличиться, независимо от знака δ). При $\delta \rightarrow 0$ имеем $\Delta E_B = E_B(\delta) - E_B(0) = \beta\delta^2 \rightarrow 0$. В работе [1] показано, однако, что в низкоразмерных (одномерных и двумерных) многочастичных системах это не так, поскольку в таких системах

$\Delta E_B \sim |\delta|^\nu L^\eta$, где ν и η – положительные числа, а L – размер системы вдоль “макроскопического направления”. В термодинамическом пределе ($L \rightarrow \infty$) величина ΔE_B не обращается в нуль при сколь угодно малой, но конечной δ , то есть “адиабатический предел” не достигается (точнее говоря, предельные переходы $\delta \rightarrow 0$ и $L \rightarrow \infty$ оказываются некоммутативными). Для проверки своей теории (подкрепленной численными расчетами) авторы [1] предлагают провести эксперименты с ультрахолодными бозе-газами. Параметры межчастичного взаимодействия при этом могут меняться контролируемым образом за счет изменения, например, глубины ям в оптической решетке. Идеи о нарушении адиабатичности могут найти применение и в задаче совершенно другого рода – о динамике скалярного поля, ответственного за расширение Вселенной на ранней стадии ее развития.

1. A. Polkovnikov, V. Gritsev, *Nature Phys.* **4**, 477 (2008).

“Молекулярное состояние” коррелированных электронов в квантовой точке

В молекулах тяжелые ядра колеблются около своих равновесных положений. Наряду с колебательными степенями свободы у молекул есть также вращательные и поступательные, отвечающие их повороту и движению как целого. В статье [1] итальянские и американские физики показали, что в квазидвумерных квантовых точках с достаточно низкой концентрацией электронов n состояния последних имеют молекулярные черты, а именно: многочастичные возбуждения электронной подсистемы представляют собой колебания и вращения. Этот режим реализуется при достаточно больших величинах безразмерного параметра $r_s = 1/a_B^* (\pi n)^{1/2}$, равного отношению энергии кулоновского межэлектронного отталкивания к кинетической (орбитальной) энергии электронов (здесь a_B^* – эффективный боровский радиус). Известно, что при $r_s \gg 1$ имеет место так называемая вигнеровская кристаллизация, и каждый электрон оказывается локализованным в окрестности определенной точки пространства. Но, как выяснилось [1], вращательно-колебательные коллективные моды имеются даже в квантовых точках с $r_s \sim 1$.

В работе [1] методом неупругого рассеяния света были исследованы спектры низкоэнергетических возбуждений массива из $\sim 10^4$ практически идентичных квантовых точек GaAs/AlGaAs, полученных путем нанолитографии и травления. Каждая квантовая точка содержала четыре “избыточных” электрона. Энергия параболического потенциала конфайнмента составила 3.75 мэВ, а параметр $r_s = 1.71$. Экспериментальная структура энергетического спектра (рис. 1) хорошо согласуется с численными расчетами, выполненными методом конфигурационного взаимодействия.

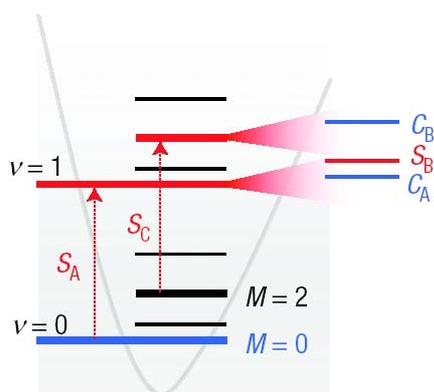


Рис.1. Схема вращательно-колебательных электронных уровней энергии в квантовой точке и переходов между этими уровнями [1] (v – колебательное квантовое число, M – угловой момент).

Таким образом, молекулярный характер возбуждений электронной подсистемы начинает проявляться еще при не очень сильно выраженных короткодействующих корреляциях между электронами. Одним из признаков наличия в квантовой точке таких мо-

лекулярных состояний является почти одинаковый вид парной корреляционной функции $g(r)$ (вероятности того, что расстояние между двумя электронами равно r) при различной величине углового момента M уже при $r_s = 1.71$ (рис. 2). Это означает что “молекулы” в квантовой точке ведут себя как жесткие ротаторы.

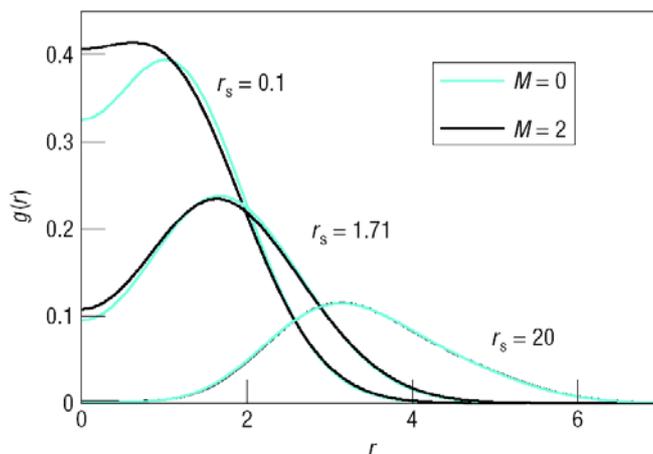


Рис.2. Парные корреляционные функции $g(r)$ при различных r_s и M (теория).

1. S.Kalliakos et al., *Nature Phys.* 4, 467 (2008).

Воздействие наноматериалов на окружающую среду

В марте 2008 г. более ста ученых из разных стран мира встретились в Швейцарии на конференции «nanoECO» для обсуждения проблем, связанных с воздействием синтезированных наночастиц на окружающую среду [1]. Хотя нано-экотоксикология является молодой областью исследований, были представлены интересные и важные результаты. Конечно, в центре внимания были нерешенные проблемы: как и в каких количествах наночастицы из «нанопродуктов» попадают в окружающую среду; какой будет, к примеру, уровень загрязнений рек, почвы; какие аналитические методы могут быть эффективно использованы?

Вопрос о применимости методов исследований очень важен. Н.Круг в своем докладе [2] подчеркнул, что на данные о токсичности углеродных нанотрубок (УНТ) наряду с присутствующими в них примесями металлов (признанный эффект) могут повлиять и реактивы, применяемые для экспериментов *in vitro*! В этом случае выводы о вреде нанотрубок могут оказаться ложными. Поэтому при оценке токсичности очень важно правильно охарактеризовать не только сами наноматериалы, но и аналитические методы, используемые в исследованиях.

«Зеленая» химия, «зеленая» энергетика.... Эти термины появились в конце прошлого века и сразу стали очень популярными. В последние годы чрезвычайно возрос интерес к ресурсосберегающим экологически чистым зеленым технологиям, инвестиции в фирмы зеленых технологий постоянно увеличиваются. «Зеленой нанотехнологии» посвя-

щен доклад В.Кам [3]. Зеленая нанотехнология, как объясняет автор, – это способ создания и использования наноматериалов и нанопродукции без нанесения ущерба окружающей среде и здоровью человека. Таким образом, с одной стороны к зеленой нанотехнологии относится производство наноматериалов и продуктов с использованием принципов зеленой химии и зеленых технологий (что улучшает окружающую среду косвенным образом), а с другой – создание нанопродуктов, которые непосредственно участвуют в решении прошлых, настоящих и будущих проблем, связанных с защитой природы и здоровьем людей (например, сорбенты для очистки сточных вод или питьевой воды, новые катализаторы, энергетические системы).

Результаты компьютерного моделирования транспорта трех наиболее распространенных видов наночастиц (нано-Ag, нано-TiO₂ и УНТ), представленные в докладе швейцарских ученых В.Nowack и N.Mueller оказались настолько интересными, что были полностью опубликованы в журнале «Environmental Science & Technology» [4] и прокомментированы в июньском выпуске «Nature Nanotechnology» [5]. Рассмотрим их подробнее.

Наночастицы Ag и TiO₂ наиболее широко представлены в потребительских товарах. Считается, что нано-серебро обладает противомикробными, противогрибковыми и другими полезными свойствами, а нано-TiO₂ производится в больших количествах для использования в самоочищающихся, необрастающих, противомикробных покрытиях и красках, а также в косметических средствах как поглотитель УФ. (Только в Австралии имеется более 300 зарегистрированных солнцезащитных продуктов, содержащих наночастицы TiO₂). Третий изученный наноматериал – углеродные нанотрубки – не нуждается в представлении читателям ПерсТа.

В модели использовались следующие входные данные: оценки объемов мирового производства, концентрации наночастиц в различных продуктах, выход наночастиц из продуктов и параметры потоков в окружающую среду (от установок для сжигания отходов, мусорных свалок, и/или установок для очистки сточных вод) и между ее областями (воз-

дух, почва, вода). Рассмотрен весь цикл использования продуктов, содержащих наночастицы, – от производства до утилизации. Модель такого типа обычно применяется в определении воздействия химических продуктов.

Авторы сделали оценку риска для трех областей окружающей среды – воды (реки и озера), воздуха, почвы в Швейцарии (рис.1). Было рассмотрено два сценария – реалистичный (RE - realistic), основанный на имеющейся информации, и худший (HE – high exposure), основанный на оценках, предполагающих наличие более высоких концентраций. Результаты сравнивались с величинами, которые по данным токсикологических исследований не вызывают негативных эффектов (PNEC – predicted no-effect concentration). Риск выражался как отношение прогнозируемой концентрации в окружающей среде PEC (PEC – predicted environmental concentrations) к PNEC. Материалы, для которых это отношение меньше единицы, считаются безопасными.

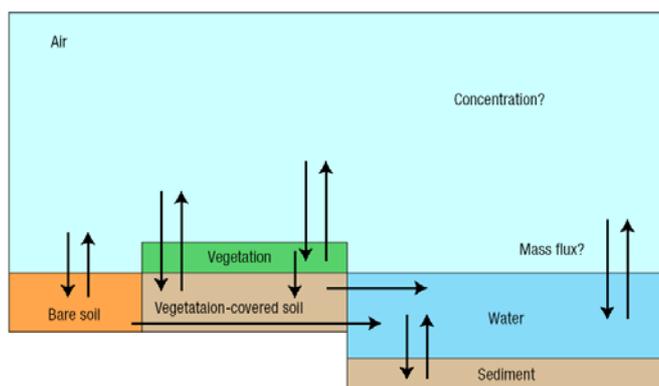


Рис.1. Возможное распределение наноматериалов в окружающей среде (воздух; почва, растительность; почва, покрытая растительностью; вода; отложения) [5].

К сожалению, невозможно найти перечень всей продукции, содержащей наночастицы. Многие производители не информируют об их наличии. Вероятно, в ближайшие годы ситуация изменится к лучшему, а пока авторы [4] использовали для анализа параметры, некоторые из которых представлены в таблице 1.

Таблица 1. Параметры, использованные при моделировании транспорта наночастиц в Швейцарии.

Наночастицы	Категория продукции	% от общего колич.	Способ выделения	%	Область выделения
нано-Ag	текстиль	10	стирание при использовании	5	воздух
			стирание при стирке	5	очистка сточных вод
			утилизация	2,5	сжигание мусора
			рецикл	0,5	живая система
			экспорт	2	живая система
	разложение	85	живая система		
косметика	аэрозоли, чис-	25	использование	95	очистка сточных вод
			утилизация	5	сжигание мусора

	тящие средства	15	использование	95	воздух, стоки, почва
	металлическая продукция	5	утилизация	5	сжигание мусора
			стирание	5	очистка сточных вод
			рецикл	47,5	живая система
	пластмассы	10	утилизация	2,5	сжигание мусора
			разложение	45	живая система
			стирание	5	очистка сточных вод
	краски	35	утилизация	50	сжигание мусора
			разложение	45	живая система
			утечка	5	почва, сточные воды
			разложение	45	живая система
			утилизация	50	место утилизации
нано-TiO ₂	пластмассы	2	стирание	5	воздух, сточные воды
	косметика	60	утилизация	95	сжигание мусора
			использование	95	сточные воды, вода
	покрытия	2	утилизация	5	сжигание мусора
			использование	95	сточные воды, воздух
	металлы	1	утилизация	5	сжигание мусора
			стирание	5	сточные воды
			рецикл	90	живая система
			утилизация	5	сжигание мусора
	хранение/ производство энергии	10	утилизация	25	сжигание мусора
		25	рецикл	75	живая система
	краски	25	утечка	50	сточные воды, почва
			утилизация	50	место утилизации
УНТ	пластмассы, спортивное оборудование	50	стирание	5	воздух
	электроника, батареи	50	утилизация	95	сжигание мусора
			рецикл	40	живая система
			утилизация	10	сжигание мусора
			экспорт	50	место утилизации
					живая система

В таблице 2 приведены величины PEC, полученные в [4] для двух сценариев (RE и HE).

Прогнозируемая концентрация (PEC) в окружающей среде							
		Нано - Ag		Нано - TiO ₂		УНТ	
Единицы		RE	HE	RE	HE	RE	HE
Воздух	мкг/м ³	1,7x10 ⁻³	4,4x10 ⁻³	1,5x10 ⁻³	4,27x10 ⁻²	1,5x10 ⁻³	2,3x10 ⁻³
Вода	мкг/л мкг/кг	0,03	0,08	0,7	16	0,0005	0,0008
Почва		0,02	0,1	0,4	4,8	0,01	0,02

Таблица 3

Оценка риска (PEC/PNEC) в окружающей среде							
		Нано - Ag		Нано - TiO ₂		УНТ	
		RE	HE	RE	HE	RE	HE
Воздух		н/о	н/о	0,0015	0,004	1,5x10 ⁻⁵	2,3x10 ⁻⁵
Вода		0,0008	0,002	>0,7	>16	0,005	0,008
Почва		н/о	н/о	н/о	н/о	н/о	н/о

н/о- не определен из-за отсутствия экотоксикологических данных

Как видно из табл. 2, величины PEC для УНТ являются самыми низкими (хотя, конечно, в будущем при росте производства ситуация может измениться). Содержание в воздухе мало для всех трех типов наночастиц. Частицы наносеребра и наноксида титана

в основном находятся в воде и почве, при этом содержание нано-Ag в 20-200 раз ниже, чем нано-TiO₂. УНТ в воду практически не попадают.

На основе полученных величин PEC теперь можно определить, какие наночастицы и где представляют наибольший риск (табл. 3).

Результаты моделирования показывают, что в настоящее время УНТ не представляют риска для окружающей среды. Основная часть продуктов, содержащих нанотрубки, или идет в повторный цикл, или попадает в установки для сжигания мусора, где УНТ в присутствии кислорода сгорают практически полностью (температура в установках примерно 850°C). А вот отношение PEC/PNEC для nano-TiO₂ в воде приближается к единице или даже больше нее, указывая на наличие значимого риска.

Конечно, это предварительные результаты. Например, сознательно не рассматриваются трансформация, деградация, биоаккумуляция наночастиц, хотя эти процессы могут играть важную роль. Не учтены выбросы из мест производства. Тем не менее, результаты дают оценку риска и могут служить отправной точкой для последующих исследований, в которых, в том числе, будут более полно отражены специфические свойства наночастиц.

О.Алексеева

1. *nanoECO. Nanoparticles in the Environment. Implications and Applications 2-7 March, 2008 Centro Stefano Franscini Monte Verità Ascona, Switzerland*

http://www.empa.ch/plugin/template/empa/*/60627/--/1=1

2. H.F. Krug et al., *nanoECO Book of Abstracts 2-7 March, 2008*, p.53

3. B. Karn. *nanoECO Book of Abstracts 2-7 March, 2008*, p.77

4. N. Mueller, B. Nowack., *Environ. Sci. Technol.* **42**, 4447 (2008)

5. M. Scheringer, *Nature Nanotechnol.*, **3**, 332 (2008), www.nature.com/naturenanotechnology

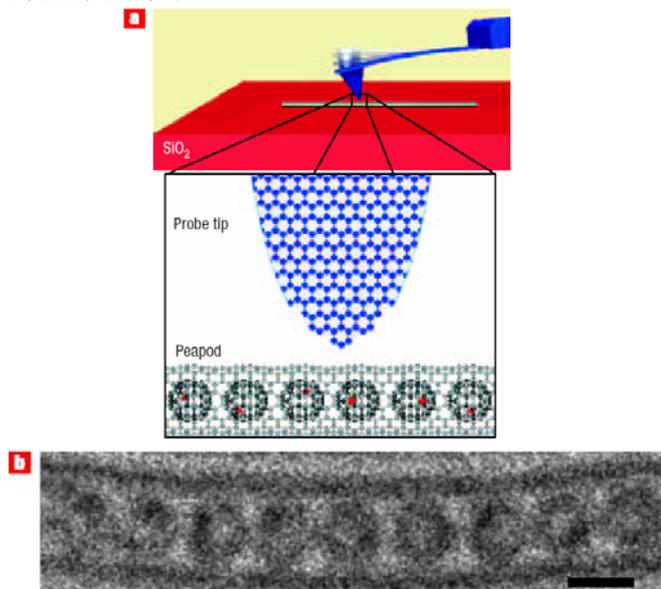
ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

Фуллерены в нанотрубке

Внутренние полости углеродных нанотрубок могут служить вместилищем для различных кластеров и молекул, в том числе для фуллеренов [1]. В работе [2] методами силовой и просвечивающей электронной микроскопии изучены “стручки” из металлофуллеренов Dy@C₈₂ в одностенных нанотрубках. Они были изготовлены путем соответствующей термообработки и последующего осаждения на подложку SiO₂/Si (см. рис.).

Расстояние между центрами соседних фуллеренов составило (1.05 ± 0.05) нм. Авторам [2] удалось с атомным разрешением построить “карту” сил, действующих на иглу микроскопа со стороны “стручка”, и таким образом определить упругие характеристики отдельных фуллеренов. Поскольку теория предсказывает, что заключенные в нанотрубку молекулы могут перемещаться вдоль ее оси практически без трения [3], то на следующем этапе было бы

интересно попытаться “подвигать” фуллерены все той же иглой.



a - Вверху – иллюстрация работы атомного силового микроскопа в динамическом режиме; внизу – схематическое изображение иглы микроскопа относительно нанотрубки с металлофуллеренами Dy@C₈₂. **b** - Изображение нанотрубки с цепочкой молекул Dy@C₈₂, полученное при комнатной температуре методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения. (длина масштабной линейки равна 1 нм).

Л.Опенев

1. B.W.Smith et al., *Nature* **396**, 323 (1998).

2. M.Ashino et al., *Nature Nanotechnol.* **3**, 337 (2008).

3. H.Su et al., *Nanotechnology* **17**, 5691 (2006).

КОНФЕРЕНЦИИ

XIII Национальная конференция по росту кристаллов (НКРК-2008), 17-22 ноября 2008 г., Москва, Россия.



Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова РАН, Российский научный центр “Курчатовский институт”

ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ

Фундаментальные проблемы образования кристаллов

- 1.1 - Элементарные процессы роста и физика образования кристаллов
- 1.2 - Образование кристаллов в многокомпонентных системах
- 1.3 - Управление дефектной структурой и самоорганизация в кристаллических системах
- 1.4 - Моделирование процессов роста кристаллов

Рост и характеристика монокристаллов

- 2.1 - Монокристаллы полупроводников
- 2.2 - Кристаллы для фотоники

- 2.3 - Функциональные кристаллы диэлектриков и проводников
2.4 - Инновационно-ориентированные исследования

Нанокристаллы и наносистемы

- 3.1 - Биоорганические кристаллы и пленки
3.2 - Многослойные, острейные и квантовые структуры
3.3 - Формирование, структура и свойства наночастиц
3.4 - Углеродные наночастицы и наноструктуры
3.5 - Жидкие кристаллы

Прием тезисов и регистрация участников
- до **31 августа 2008 г.**

Контакты:

Ученый секретарь конференции

Волошин Алексей Эдуардович

Секретари оргкомитета:

Руднева Елена Борисовна

Григорьева Марина Сергеевна 119333 Москва, Ленинский проспект, 59. Институт кристаллографии РАН

E-mail: nccg@ns.crys.ras.ru

Web: <http://ns.crys.ras.ru/nccg>

Телефон: (495) 330-78-83

Факс: (499) 135-10-11

VII Международная научно-техническая конференция «Фундаментальные проблемы радиоэлектронного и оптоэлектронного приборостроения»

(INTERMATIC - 2008), 21-23 октября 2008г., Москва, Россия

Тематика:

1. Перспективные компоненты радиоэлектроники.
2. Высокие наукоемкие технологии и оборудование.
3. Оптоэлектроника и приборы на квантовых эффектах.
4. Микросистемная техника.
5. Твердотельные сложные функциональные блоки РЭА.
6. Телекоммуникационные и информационные приборы и системы.
7. Электросвязь, волоконно-оптические линии связи.
8. Радиоэлектронные приборы и системы безопасности.
9. Вопросы диагностики, качества и надежности.

Web: <http://www.conf.mirea.ru/>

V Международная научно-техническая школа-конференция «Молодые ученые – науке, технологиям и профессиональному образованию в электронике», «Молодые ученые–2008», 10-13 ноября 2008 г., Москва, Россия

Тематика:

1. Научные проблемы прикладной физики конденсированных сред
2. Современные инженерно-физические наукоемкие технологии
3. Новые материалы, электронные компоненты и технологии будущего
4. Новые информационные технологии в профессиональном образовании

Научные направления:

1. Вопросы физики конденсированного состояния и поверхности
2. Релаксационно - диффузионные межфазные процессы и электрическая релаксация
3. Тонкие пленки и наноструктуры
4. Новые активные диэлектрики
5. Математическое моделирование физических процессов в материалах и технологиях
6. Физические процессы в материалах при их электронной обработке
7. Компоненты микро-, наноэлектроники и микро-системной техники
8. Новые методы и техника эксперимента
9. Информационные технологии
10. Телекоммуникации и системы автоматизации
11. Электроника в биологии и медицине.

Web: <http://www.conf.mirea.ru/>



Classical and Quantum Transport in the Presence of Disorder, 15-19 December 2008, Isaac Newton Institute for Mathematical Sciences, Cambridge, UK

Web: <http://www.newton.cam.ac.uk/programmes/MPA/mpaw04.html>.

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

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

Научные редакторы К.Кугель, Ю.Метлин

В подготовке выпуска принимали участие: О.Алексеева, В.Вьюрков, Л.Опенев

Компьютерный ввод, макет: И.Фурлетова

Адрес редакции: 119296 Москва, Ленинский проспект, 64