

В этом выпуске:

СНОВА К ОСНОВАМ

Броуновское движение скирмионов

Магнитные скирмионы часто становятся темой научных новостей, в том числе и на страницах Перст. Во многом это объясняется тем, что они, с одной стороны напоминают знакомые по учебникам цилиндрические магнитные домены, а с другой – являются субмикронными объектами, подчиняющимися законам наномира. Японские ученые из Nat. Inst. Advanced Industrial Science Technology (Tsukuba) и Osaka Univ. задались целью исследовать броуновское движение скирмионов, а также найти способ управлять им. Конечно, здесь не идет речь о том, чтобы контролировать движение отдельной частицы (в таком случае оно перестает быть хаотичным), а о том, чтобы изменять характеристики броуновского движения [1].

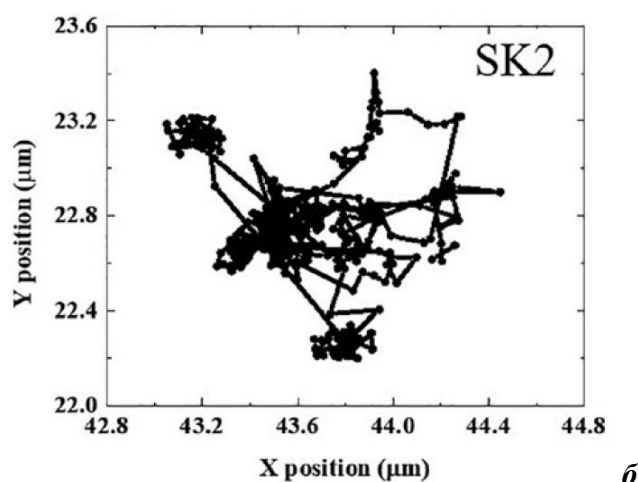
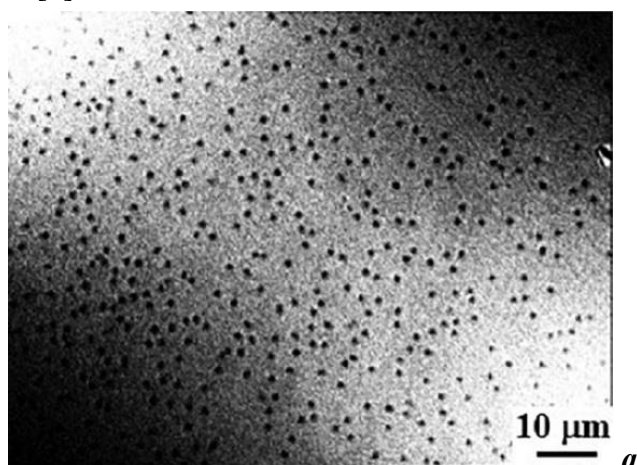


Рис. 1. *a* – Магнитооптическое изображение хаотически движущихся скирмионов (соответствующее видео доступно по ссылке: <https://doi.org/10.1063/1.5070101.1>); *б* – трек отдельного скирмиона [1].

И далее ...

ГРАФЕН

- 2 Растягиваем графен правильно

НАНОСТРУКТУРЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ

- 3 Красное вино, кофе и чай помогают создавать материалы для гибкой носимой электроники

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

- 5 Металлическая природа кремния и углерода

Условия, подходящие для наблюдений броуновского движения скирмионов, были найдены в структуре W/FeB(1nm)/Ir(0.1nm) при магнитном поле смещения 4Э (рис. 1а). Измеренный по трекам скирмионов коэффициент диффузии равен 0.1 мкм²/с. Сравнение с подобными треками для броуновских частиц, зарисованными трудолюбивыми студентами Жана Батиста Перрена более века назад (их можно найти в статье “Броуновское движение” Википедии), показывает, что магнитные скирмионы – довольно неповоротливые создания: зернышки древесной смолы размером 0.5мкм, использованные в классических опытах Перрена, характеризуются на порядок большей величиной коэффициента диффузии.

Для того чтобы броуновское движение можно было бы использовать в спиновой электронике, требуется в локальной области контролировать величину коэффициента диффузии. Авторы [1] достигают этого с помощью электрических затворов: поле, создаваемое заряженным электродом, локально меняет константу перпендикулярной магнитной анизотропии материала, что сказывается на среднем времени пиннинга скирмиона на дефектах, а это, в свою очередь, влияет на эффективный коэффициент диффузии. Электрическое напряжение 0.5В, поданное на затвор, увеличивает или уменьшает (в зависимости от его полярности) коэффициент диффузии в два раза. Создавая потенциальный рельеф на поверхности, можно за счет градиента коэффициента диффузии вызывать направленное движение скирмионов или, напротив, останавливать на время их движение, реализуя, таким образом, электронные схемы, в которых тепловое движение из помехи превращается в основную движущую силу.

А.Пятаков

1. T.Nozaki et al., *Appl. Phys. Lett.* **114**, 012402 (2019).

ГРАФЕН

Растягиваем графен правильно

В работе [1] с помощью теории функционала плотности исследователи из МИФИ проанализировали случаи одностороннего (в кресельном и зигзаговом направлениях) и равномерного двухосного растяжения графенового листа (рис. 1).

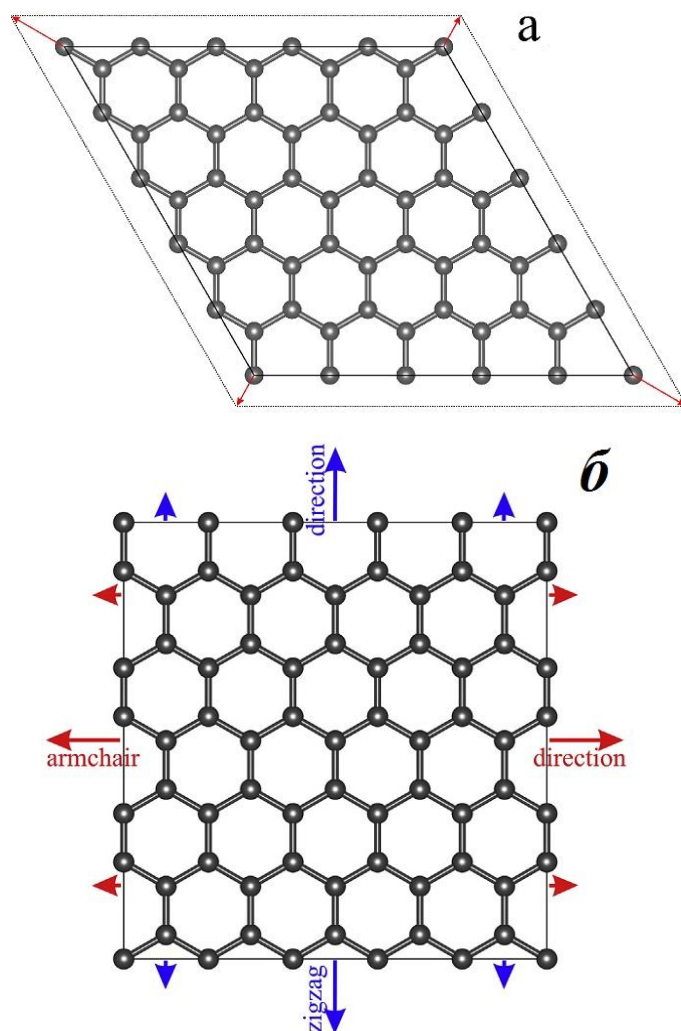


Рис. 1. Атомная структура гексагональной (а) и прямоугольной (б) сверхъячеек графена, которые использовались в процессе моделирования. Двухосное растяжение подразумевает равномерное увеличение сверхъячейки (а), тогда как одноосное растяжение увеличивает сверхъячейку в одном из выбранных направлений: зигзаг (zigzag) или кресельном (armchair) (б).

Их, в первую очередь, интересовало изменение величины диэлектрической щели под действием механических напряжений. Напомним, что неискаженный графен является бесщелевым полупроводником. Известно, что деформации, в принципе, представляют собой достаточно мощный инструмент достижения необходимых характеристик графена для широкого набора практических применений. Например, посред-

ПерсТ, 2019, том 26, выпуск 21/22

ством механических деформаций можно усилить адсорбционные свойства графена или улучшить его теплопроводность. Исследователи выполнили компьютерное моделирование в программном пакете Quantum Espresso с использованием функционала PBE и периодических граничных условий. Одноосное растяжение моделировали с помощью прямоугольной сверхъячейки, а равномерное – с помощью гексагональной (рис. 1). Выяснилось, что в случае одноосного растяжения проявляется диэлектрическая щель, которая зависит от него немонотонно, в то время как равномерное двухосное растяжение к открытию щели не приводит. В последнем случае авторы оценили поведение скорости Ферми в зависимости от механических деформаций и пришли к выводу, что под действием растяжения (вплоть до 20%) она линейно уменьшается (рис. 2).

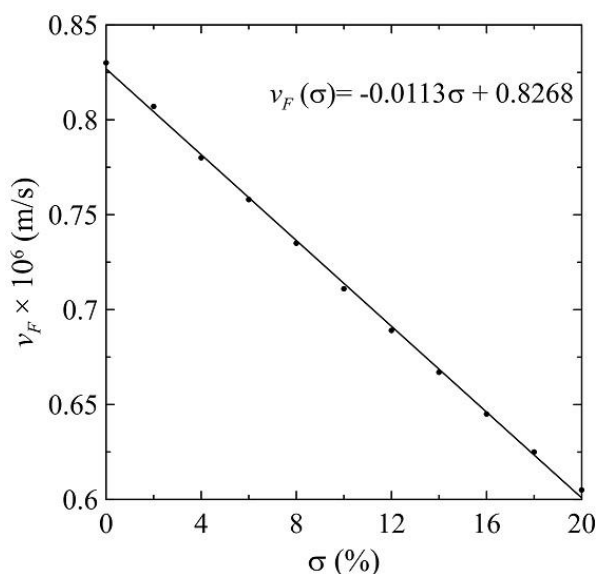


Рис. 2. Зависимость скорости Ферми от двухосной равномерной деформации графена (бесщелевой случай): кружки – результаты расчета, сплошная линия – линейная аппроксимация методом наименьших квадратов.

Таким образом, скорость Ферми в графене посредством равномерной двухосной деформации подвержена плавной настройке, что является существенным для приложений стрейнтроники и может найти свое применение в приборах “гибкой наноэлектроники”. Любопытно, что для бесщелевого графена, содержащего кулоновскую примесь, плавное изменение скорости Ферми в результате растяжения способно обеспечить превращение докритического заряда примеси в сверхкритический. К такому выводу авторы пришли, объединив результаты компьютерного моделирования с помощью теории

функционала плотности с аналитическим решением релятивистского уравнения Дирака.

М.Маслов

1. K.P.Katin et al., Diamond & Related Materials 100, 107566 (2019).

НАНОСТРУКТУРЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ

Красное вино, кофе и чай помогают создавать материалы для гибкой носимой электроники

Интерес к гибкой носимой электронике постоянно растет. Уже разработаны миниатюрные сенсоры, отслеживающие движение, имплантаты и различные медицинские датчики, электронная кожа. Один из примеров – гибкие графеновые микротранзисторы для картирования коры головного мозга (подробнее см. ПерсТ [1]). В настоящее время большинство материалов для носимой электроники получают, используя гибкие текстильные или полимерные подложки с покрытиями из металлов (Au, Ag, Cu, Ni). Проводящий металлический слой наносят осаждением из газовой фазы (CVD, PVD), путем электроосаждения или химического осаждения из растворов. Основной проблемой таких материалов является появление микротрещин при повторных сгибаниях. Это, естественно, приводит к ухудшению проводимости. Исследователи из Великобритании предложили свою методику создания качественных материалов для гибкой электроники [2]. По их мнению, оптимальным является химическое осаждение Ni или Cu. Этот способ относительно прост, не требует дорогостоящего оборудования, позволяет получать металлические слои даже на подложках сложной формы в промышленных масштабах. Ключевой момент – предварительная обработка подложек таниновой кислотой ТА (tannic acid). Танины, фенольные соединения, имеют растительное происхождение. Они содержатся в коре, листьях, коже, плодах; танинов много в красном вине, кофе, черном чае. Танины образуют прочные связи с белками, полисахаридами и другими биополимерами. Все знают, как трудно справиться с пятнами от красного вина, кофе, чая на одежде или скатерти из натуральных тканей. Авторы [2] погружали подложки (хлопковую ткань, полимерную пленку, натуральную и полиуретановую губки и др.) в водный раствор ТА для модифицирования химической природы поверхности, а затем в водный раствор $(\text{NH}_4)_2\text{PdCl}_4$ для нанесения катализатора (рис. 1).

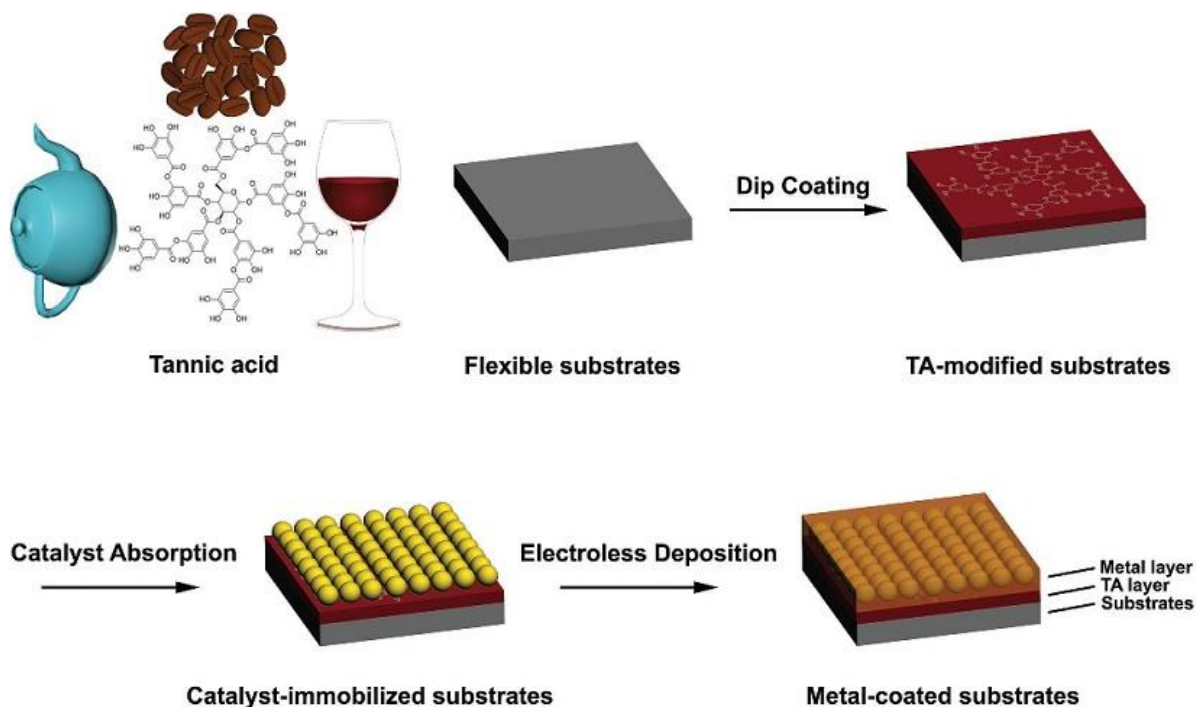


Рис. 1. Схема производства гибких проводников: модификация гибкой подложки путем окунания в ТА; иммобилизация катализатора и химическое осаждение металла.

По данным XPS и FTIR на подложках образовалось ТА покрытие, а также сформировались прочные связи между фенольными группами и ионами Pd, катализаторами процесса осаждения металла. Интересно, что эксперименты с красным вином, кофе и черным чаем, содержащими танины, показали, что эти продукты способны так же, как и таниновая кислота, обеспечить иммобилизацию катализатора и активацию осаждения металла.

Размер осаждаемых наночастиц в течение всего процесса один и тот же – 15-20 нм, но при длительности более 20 мин они начинают объединяться в кластеры. Например, при длительности 60 мин в верхних слоях образуются плотно примыкающие друг к другу кластеры размером 300-500 нм (рис. 3). При многократных изгибах на таких образцах возникают микротрещины. Материалы, полученные при длительности процесса осаждения 10 мин, гибкие, но имеют низкую электропроводность, т.к. наночастицы не полностью покрывают поверхность.

Морфология металлических покрытий была изучена с помощью SEM. На рис. 2 приведены изображения исходных хлопковых волокон и полиуретановой (PU) губки, а также изображения этих подложек с Ni покрытиями, полученными по методике [2] при длительности процесса осаждения 20 мин. Это оптимальная длительность. Видно, что наночастицы Ni плотно покрывают все поверхности. Средний размер наночастиц ~ 16,5 нм. Образцы имеют достаточно высокую электропроводность и большую гибкость.

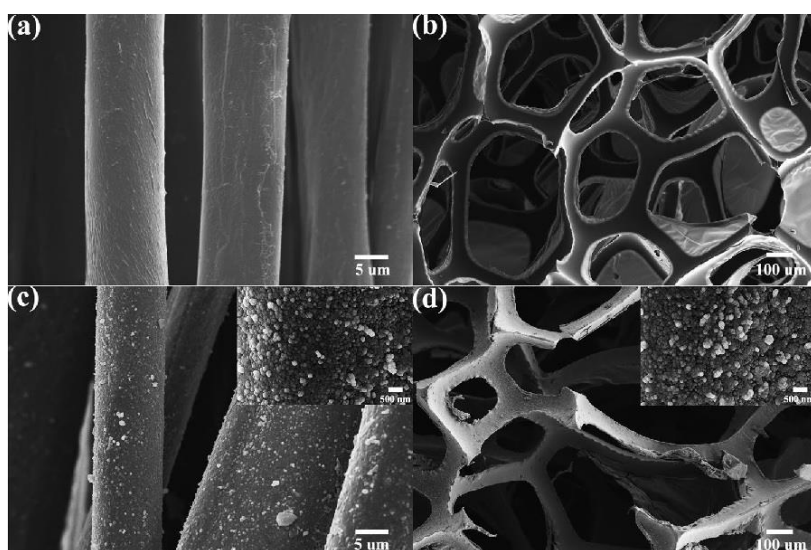


Рис. 2. SEM изображения хлопковых волокон и полиуретановой губки без обработки (a, b) и с Ni покрытием (c, d) (длительность процесса осаждения 20 мин). На врезках изображения с большим увеличением.

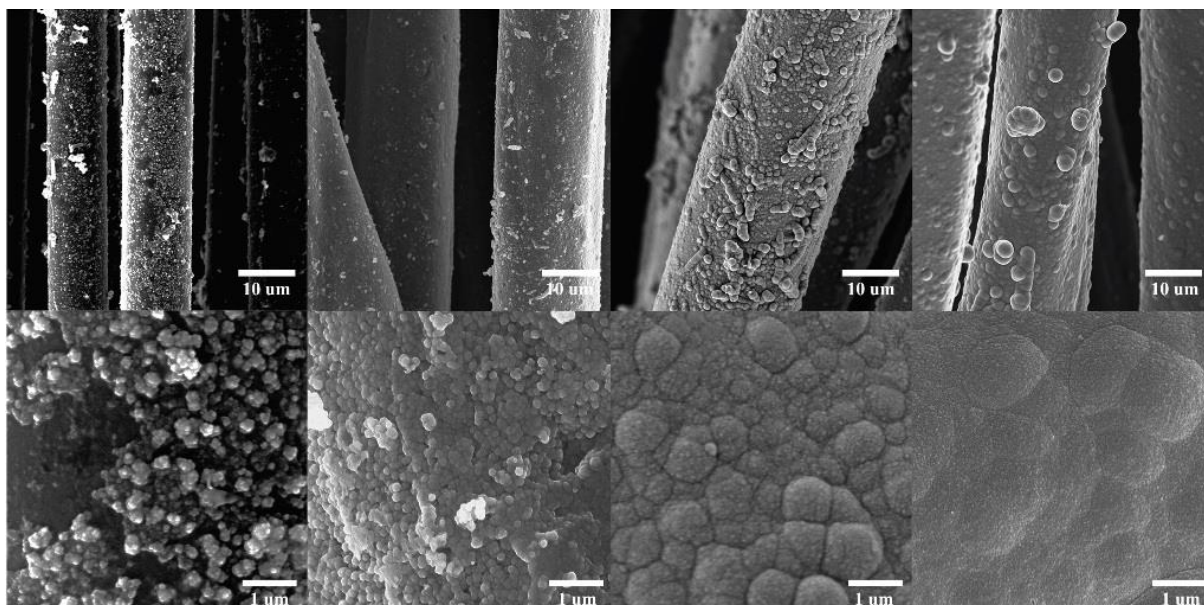


Рис. 3. SEM изображения хлопка с Ni покрытиями, осажденными в течение (слева направо) 10, 20, 30 и 60 мин.

На рис. 3 видно, что при длительности процесса 20 мин наночастицы плотно покрывают поверхность волокна, однако между ними есть многочисленные незаполненные промежутки, которые препятствуют образованию микротрещин при изгибах.

На основе хорошо известного процесса химического осаждения авторы работы [2] разработали новую оригинальную методику получения гибких дышащих долговечных материалов для носимой электроники. Понадобилось лишь добавить красного вина...

О.Алексеева

1. [ПерсТ 24, вып.9/10, с.1 \(2017\).](#)
2. *C.Zhu et al., Small 15, 1902440 (2019).*

ФУЛЛЕРЕНА И НАНОТРУБКИ

Металлическая природа кремния и углерода

Полипризмы представляют собой особый тип одностенных нанотрубок с чрезвычайно малым поперечным сечением в форме правильного многоугольника. Российские исследователи из МИФИ [1] рассмотрели полипризмы, построенные из углеродных и кремниевых пяти-, шести-, семи- и восьмичленных колец. С помощью теории функционала плотности в программе Quantum Espresso с использованием периодических граничных условий (рис. 1) они проанализировали их геометрию и электронные характеристики. Для этого ученые

провели структурную оптимизацию и рассчитали плотности электронных состояний и зонную структуру полипризм. Из полученных данных следует, что диэлектрическая щель, характерная для полупроводников, отсутствует для всех рассмотренных кремниевых наноструктур. Напротив, можно наблюдать традиционную для металлов ненулевую плотность электронных состояний на уровне Ферми (рис. 2).

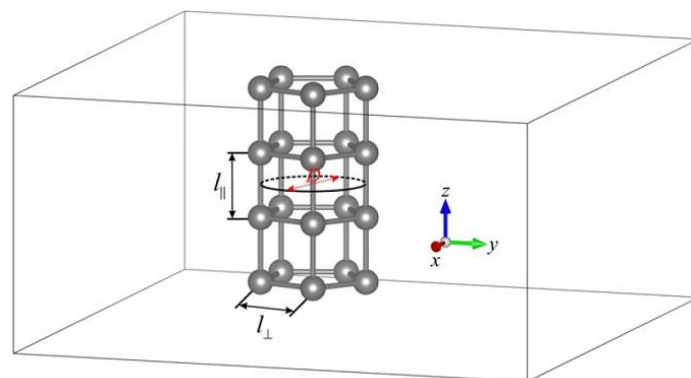


Рис. 1. Общий вид сверхъчейки для моделирования углеродного или кремниевого полипризмана, содержащей четыре ковалентно связанных правильных пятиугольника из углерода или кремния, соответственно. Символ D соответствует эффективному диаметру полипризмана, символам l_{\parallel} и l_{\perp} соответствуют межплоскостные и внутривплоскостные ковалентные связи, соответственно.

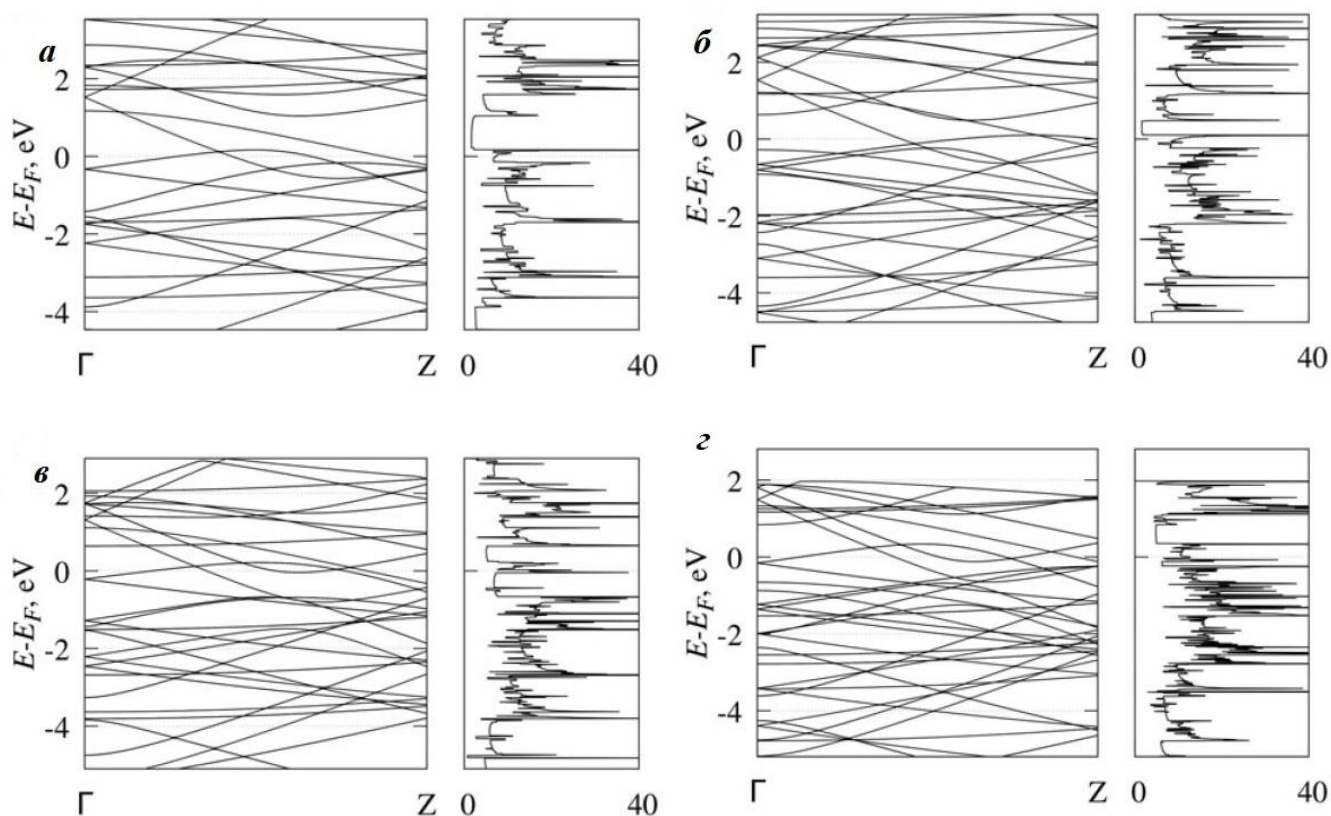


Рис. 2. Зонные структуры и плотности электронных состояний:
a – Si₅, *б* – Si₆, *в* – Si₇ и *г* – Si₈ кремниевых полипризматов

С другой стороны, углеродные полипризмы проявляют металлическую природу только при некотором критическом диаметре, не меньше, чем ~ 3.5 Å. Таким образом, первый возможный “металлический” углеродный полипризма – это C₇-полипризма. Полипризмы, построенные из C₅- и C₆-колец обладают запрещенной зоной 0.50 и 0.37 эВ, соответственно. Получается, что с увеличением эффективного диаметра углеродные полипризмы претерпевают резкое изменение электронных свойств, что можно охарактеризовать как переход от диэлектрического состояния к металлическому. Для подтверждения “металличности” авторы проанализировали электронный транспорт через рассматриваемые структуры, используя формализм Ландауэра-Буттикера. Расчет параметров электронного переноса производили без учета напряжения смещения. Полипризма была разделена на “устройство”, состоящее из сверхъядейки, содержащей четыре элементарных ячейки (рис. 1), и левый и правый “контакты”, которые были представлены точно такими же сверхъядейками.

Согласно оценке исследователей, число баллистических каналов для кремниевых полипризматов увеличивается с ростом их эффективного диаметра. Например, Si₅- и Si₆-полипризмы демонстрируют шесть баллистических каналов, в то время как Si₇- и Si₈-полипризмы – уже десять баллистических каналов, и обладают величиной проводимости $6G_0$ и $10G_0$, соответственно, где $G_0 = 2e^2/h$ – квант проводимости (здесь e – элементарный заряд и h – постоянная Планка). Металлические углеродные C₇- и C₈-полипризмы демонстрируют шесть баллистических каналов и, следовательно, обладают величиной проводимости $6G_0$. По мнению авторов, проводящие свойства полипризматов возникают в результате гибридизации локальных атомных орбиталей от различных слоев наноструктуры в глобальную молекулярную орбиталь вблизи уровня Ферми. Таким образом, электроны, принадлежащие молекулярной орбитали, которая пересекает уровень Ферми, становятся делокализованными и участвуют в появлении проводимости. Авторы отмечают, что электронная проводимость вблизи энергии Ферми традицион-

ных металлических углеродных нанотрубок существенно ниже, чем у полипризманов. Чтобы объяснить вклад различных состояний в общую плотность, авторы рассчитали парциальную плотность электронных состояний. Из последнего логично следует, что вклад в валентные состояния вблизи уровня Ферми обеспечивается, в основном, $2p$ состояниями для углерода и $3p$ состояниями для кремния. В результате, неожиданные свойства, обеспеченные морфологией призманов, открывают новые перспективы их применения в качестве базовых элементов будущей наноэлектроники.

*I. M. Maslov et al., Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures (2019).
DOI: 10.1080/1536383X.2019.1680974.*

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