

ISSN: 2782-5515



Перст

Информационный бюллетень

перспективные технологии
наноструктуры сверхпроводники фуллерены

Том 30, выпуск 12

декабрь 2023 г.



Girlyanda.ru

Черноголовка

Том 30, выпуск 12

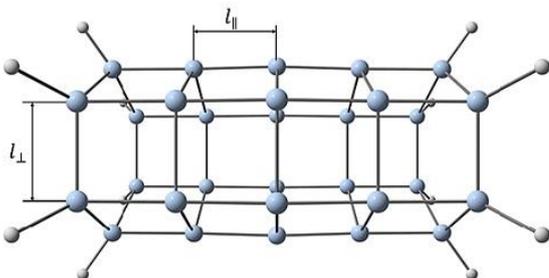
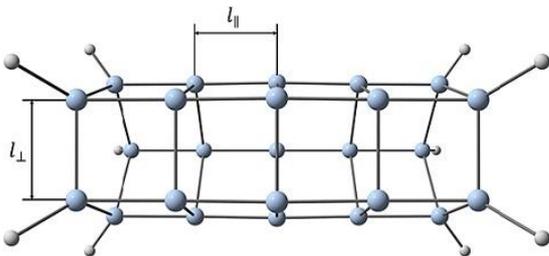
декабрь 2023 г.

В этом выпуске:

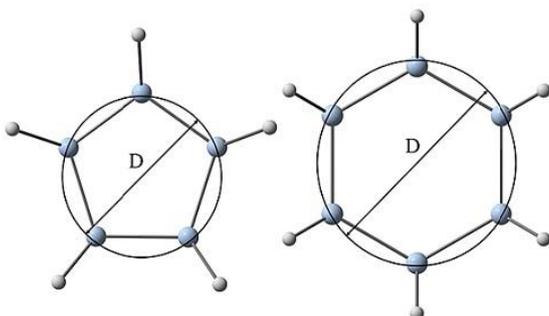
НАНОМАТЕРИАЛЫ

Металличность германиевых полипризматов

В работе [1] исследователи из МИФИ рассмотрели электронные характеристики германиевых полипризматов. Напомним, что полипризматы – это достаточно специфический класс одностенных нанотрубок с ультрамалым поперечным сечением, которые построены из уложенных слоями правильных многоугольников (см. рис.). Атомы в таких одномерных наноструктурах, в отличие от классических нанотрубок, получают четырежды координированными, как, например, в кристаллическом кремнии или алмазе. Мы уже рассказывали на страницах ПерсТа о полипризматах, построенных из углеродных [2] и кремниевых [3] колец, и вот теперь настала очередь следующего элемента подгруппы углерода – германия. Уникальной особенностью как углеродных, так и кремниевых полипризматов является проявление ими металлической природы, о чем свидетельствует отсутствие характерной щели в электронной плотности состояний и зонной структуре, свойственной для классических полупроводников.



Атомная структура финитных германиевых полипризматов, построенных из пяти- и шестичленных колец. Символ D соответствует эффективному диаметру полипризмата, символам l_{\parallel} и l_{\perp} соответствуют межплоскостные и внутривплоскостные ковалентные связи, соответственно.



Авторы работы [1] показали, что эта отличительная черта сохраняется и в случае германиевых аналогов.

И далее ...

- 3 О том, как нейросети помогают сортировать 2D материалы или еще раз о вреде “перегибов на местах”

ДЛЯ ПРАЗДНОГО УМА

- 5 Тематический анализ статей ПерсТа

ТОРЖЕСТВО

- 8 30 лет Перспективным Технологиям

Они рассмотрели наноструктуры образованные пяти- и шестичленными германиевыми кольцами, как финитные, пассивированные атомами водородами по краям (см. рис.), так и формально “бесконечные” с использованием периодических граничных условий.

Расчеты электронных характеристик и различных квантово-механических дескрипторов исследователи выполняли с помощью теории функционала плотности с использованием программы GAMESS для конечных систем (уровень теории PBE/6-31G(d)) и программного пакета Quantum Espresso для периодических структур с использованием функционала PBE и псевдопотенциала проекционно-присоединенных волн (PAW). Расчеты электронного транспорта ученые проводили в программе TranSiesta. В первую очередь, из анализа энергий когезии исследователи установили, что термодинамическая устойчивость германиевых полипризматов возрастает вместе с их эффективной длиной. Затем они выяснили, что с увеличением все той же эффективной длины НОМО-LUMO щель существенно уменьшается, достигая величины около 0.2 эВ уже при шести кольцах, составляющих германиевый полипризмат, что указывает на потенциальную возможность обеспечения электронной проводимости. Это предположение подтвердилось при дальнейшем анализе уже “бесконечных” наноструктур. Полученные электронные зонные структуры и плотности состояний свидетельствуют об отсутствии полупроводниковой щели, что подтверждает металлическую природу образцов. При этом “металличность” оказывается устойчивой и не исчезает при приложении механических напряжений, а именно, деформации (растяжении и сжатии) полипризматов в направлении главной оси. Последующий расчет электронного транспорта показал, что число баллистических каналов для германиевых полипризматов увеличивается с ростом их эффективного диаметра. Так, полипризманы, построенные из пятичленных колец, демонстрируют шесть баллистических каналов, а образованные шестичленными кольцами системы – семь баллистических каналов, и обладают величиной проводимости $6G_0$ и $7G_0$, соответственно, где G_0 – квант проводимости.

В результате германиевые полипризманы, также, как и кремниевые, и углеродные благодаря своим уникальным свойствам могут проявить себя в приложениях наноэлектроники.

Осталось лишь дождаться их экспериментального получения.

М. Маслов

1. V.V.Merinov, A.A.Khrushkova, *Comput. Theor. Chem.***1231**, 114441 (2024).
2. [ПерсТ 26, вып. 21/22, с. 5 \(2019\).](#)
3. [ПерсТ 26, вып. 23/24, с. 1 \(2019\).](#)

О том, как нейросети помогают сортировать 2D материалы или еще раз о вреде “перегибов на местах”

Пока Зоя Пятакова писала аналитическую статью, посвященную тематическому охвату Бюллетеня для юбилейного выпуска ПерсТа, я как раз мучился выбором этой самой темы. Признаться, раньше декабрьский выпуск не доставлял в этом плане забот – я просто открывал подборку “Highlights of the year” от APS (American Physical Society) и выбирал из десятка научных “хитов” пять сюжетов, подходящих по тематике для ПерсТа.

Однако в последние годы с этой подборкой стало твориться что-то странное – все большую долю в ней стали занимать новости и исследования, скажем так, междисциплинарные, уводящие от физики куда-то очень далеко... Десятка научных новостей 2023 года произвела на меня прямо-таки удручающее впечатление. Начнем с того, что там вообще не было сюжетов, посвященных физике конденсированного состояния вещества. Их место заняли темы с точки зрения составителей куда более злободневные: климат, нейронные сети, квантовые вычисления, а также, выражаясь языком английской классики, “гордость и предубеждение” в науке: “*белые цисгендерные мужчины демонстрируют невежество, бездействие и избегание ответственности*”. Последняя фраза звучала как приговор, другая, посвященная нейронным сетям, как упрек: “*не спрашивай, что Искусственный Интеллект может сделать для тебя, лучше спроси себя, что ты сделал для ИскИна!*”

Поэтому я обратился к другому источнику, к которому в последнее время припадать стал все чаще – содержанию выпусков Писем ЖЭТФ, но упреки крепко засели в голове, а прятать ее в песок, совсем игнорируя новую реальность, представлялось тем самым “избеганием”...

И тут мне попала на глаза статья [1] исследователей из Физического факультета МГУ, которая и “злобу дня” отражает, и по тематике как нельзя лучше соответствует “облаку”

ПерсТ. Речь в ней идет о том, как искусственные нейронные сети можно использовать для сортировки пленок ван-дер-ваальсовых материалов по геометрическому параметру (толщине) и для предсказания их физических свойств. Для обучения нейронной сети исполь-

зовали оптические изображения 80 чешуек нитрида бора, полученных методом отшелушивания (эксфолиации) и прошедших предварительную характеристику на атомно-силовом микроскопе (рис. 1), с помощью которого устанавливали карту толщин чешуек.

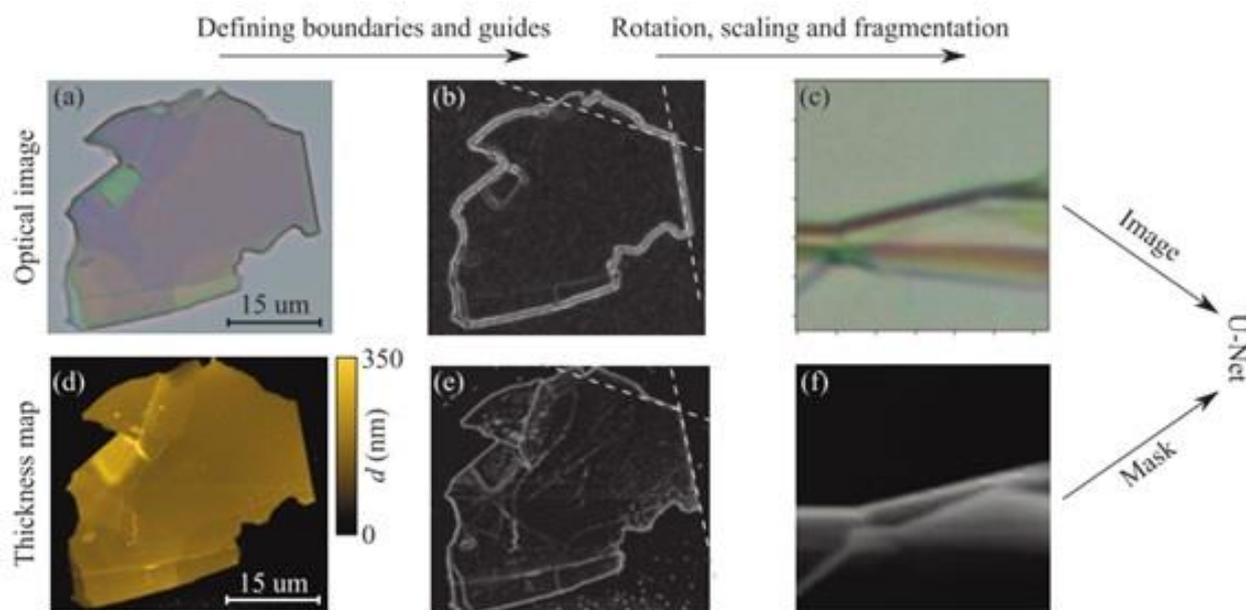


Рис. 1. Схема обучения нейронной сети: а) – оптическое изображение чешуйки нитрида бора; б) – обработанное изображение: выделены границы и направляющие (штриховые линии); в) – элемент изображения, подаваемый на вход нейронной сети; д) – изображение той же чешуйки в АСМ; е) – обработанное изображение (“карта”); ф) – элемент карты, используемый в качестве “маски” для оптического изображения “с”. (U-net – сверточная нейронная сеть, использованная авторами [1]).

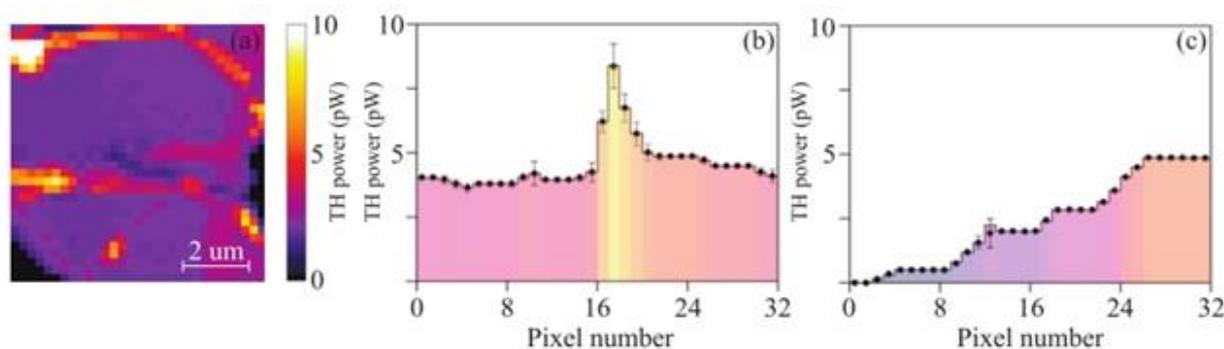


Рис. 2. Задача предсказания сигнала на третьей гармонике: а) – пример “маски” для обучения нейросети; б) – линиями показан профиль сечения изображения, точками – предсказания нейросети (среднее и погрешности получены по 10 предсказаниям); в) – то же, что на рисунке б), только для сечения изображения, не содержащего мест перегибов.

Их оптические изображения и карта толщин нарезали на фрагменты, из которых путем поворотов и других видов “аугментации” получали набор данных (“dataset”) из 10 тысяч изображений – такой объем нужен для обучения нейросети. После 300 итераций (“эпох”) обучения на полном наборе изображений качество предсказаний нейросети с 10 слоями вышло на

насыщение: она научилась предсказывать толщину образца с 65% вероятностью. Этот результат удалось существенно улучшить, удалив из обучающего набора те фрагменты, которые содержали места изгибов чешуек: так удалось достичь 90% качества предсказаний уже при минимальных размерах ядра свертки (1×1), а

при ядре 5×5 и 16 слоях качество было доведено до 95%.

Стоит отметить что авторы [1] не ограничились одной, пусть и практически очень важной, задачей “натаскивания” сети на сортировку материалов по толщине. Они также научили нейросеть предсказывать отклик на третьей гармонике. Качество предсказаний при тех же параметрах нейросети при этом уступает точности предсказания толщины на 10%, что авторы связывают как с меньшими размерами набора данных, так и с неоднозначностью в зависимости сигнала нелинейного отклика от толщины образца.

На рис. 2 показаны профили изображений на третьей гармонике с наложенными на них результатами предсказаний нейросети: опять таки “перегибы на местах” резко снижают точность предсказаний (рис. 2b).

А. Пятаков

1. А.А.Попкова, А.А.Федянин, Письма в ЖЭТФ, 118, 513 (2023).

ДЛЯ ПРАЗДНОГО УМА

Тематический анализ статей ПерсТ

Редакция бюллетеня ПерсТ на протяжении многих лет отслеживает самые горячие темы в науке, улавливает тренды, модные новинки, и не забывает про “вечные” темы, волнующие ученых на протяжении долгих лет. Тридцать лет – достаточно большой срок, и на этом периоде уже можно выявить ряд интересных закономерностей в тематике статей бюллетеня. В этой заметке проанализированы публикации, сделанные авторами ПерсТа по тематическим разделам бюллетеня. Подсчет количества публикаций в разные годы по разным разделам дает статистически усредненное понимание направленности интересов редакции и авторов, а вместе с ними, возможно – и российской научной общественности. Расчеты проводили только по статьям, опубликованным в Интернете на сайте Бюллетеня (http://www.issp.ac.ru/journal/perst/Control/Inform/index_tem.htm), начиная с 1998 года и заканчивая ноябрьским выпуском 2023 года.

Условно разделим шкалу времени жизни ПерсТ на три периода: 1998 – 2004 (конец 90-х – начало нулевых), 2005 – 2013 (середина нулевых – начало 10-х) и 2014 – 2023 (середина 10-х – начало 20-х). Наглядно представить себе изменение интересов за рассматриваемые три периода можно с помощью облака слов. Самым

крупным шрифтом отображены самые “горячие” темы, мелким – не столь широко представленные. Облака слов созданы с помощью сервиса <https://wordart.com>. Название раздела “Наноструктуры, нанотехнологии, наноэлектроника” сокращено до “Нанотехнологии”



1998 – 2004



2005 – 2013



2014 – 2023

Самыми крупными словами в “облаках” являются нанотехнологии, фуллерены и нанотрубки, и сверхпроводники. В последнем периоде к ним прибавился еще графен. Это главные темы в бюллетене, на них держится база издания, за эти статьи читатели ценят ПерсТ.

Лидирующие позиции по числу публикаций в ПерсТ занимает раздел “Фуллерены и нано-

трубки”. С 1998 по 2013 годы в каждом выпуске было в среднем почти по две публикации на эту тему. В последнее десятилетие интерес к этой теме сравнительно снизился, но все равно она представлена почти в каждом выпуске. Раздел “Наноструктуры, нанотехнологии, наноэлектроника” лидировал в первом периоде – в каждом выпуске было почти три публикации на эту тему, но в дальнейшем уступил лидерство фуллеренам.

По “нано” тематике есть ещё и раздел “Наноматериалы”, который занимает почетное четвертое место по количеству публикаций.

В таблице представлена “тройка лидеров”: абсолютное количество публикаций за все годы и по периодам, среднее количество публикаций на один выпуск бюллетеня (число, меньше единицы говорит о том, что не в каждом выпуске есть публикации по этой теме, а большее единицы – что в некоторых выпусках есть по две-три публикации по теме).

Тематический раздел	Всего статей/ в выпуске	1998 – 2004	2005 – 2013	2014 – 2023
1. Фуллерены и нанотрубки	753 /1,6	230/1,9	404/1,9	119/0,9
2. Наноструктуры, нанотехнологии, наноэлектроника	661/1,4	346/2,9	242/1,1	73/0,6
3. Сверхпроводники	631/1,4	245/2,0	295/1,4	91/0,7

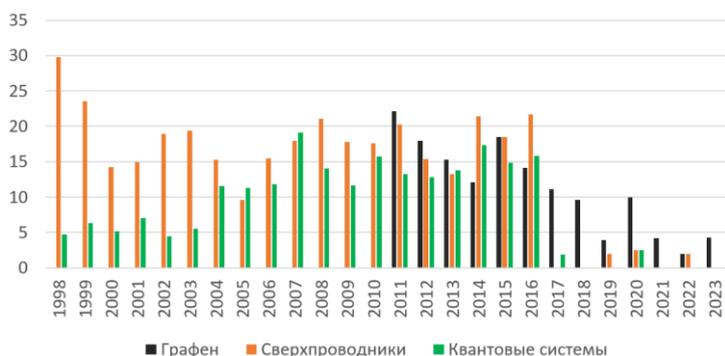
Особенностью бюллетеня, обеспечивающей ему уважение читателей, является его разноплановость и разнообразие тем. На графиках ниже представлена динамика относительного количества публикаций по некоторым разделам ПерсТ по годам. Рассчитывалось отношение количества публикаций по данной теме в данном году к общему количеству публикаций в данном году, и выражалось в процентах.

Начиная с 2010 года – с момента получения Новосёловым и Геймом Нобелевской премии за открытие графена – в бюллетене начал активно развиваться раздел “Графен”. В 2011 году в каждом выпуске было около двух статей о графене. К началу 2020-х годов количество публикаций по графену снизилось. Графен перешел из разряда остромодных новинок в хорошо изученную область.

Из графиков видно, что интерес к сверхпроводникам и квантовым системам снизился к концу 2016 года.



Процент публикаций по графену, сверхпроводникам, квантовым системам



Возрос интерес к фотонике. Конечно, нельзя сказать, что до 2012 года ПерсТ обходил стороной интереснейшую тематику фотонных кристаллов, но отдельного раздела фотоники не было, статьи по этой теме попадали в “наноматериалы”. Сравнительно грубый анализ по тематическим разделам такой тонкий момент отловить не может, а более детальный анализ занял бы слишком много времени.

Рассмотрим также графики динамики “нетвердотельных” разделов: “Для праздного ума”, “Снова к основам”. До начала нулевых годов эти темы не были представлены в ПерсТ вовсе, а в последние годы публикаций по “непрофильным” разделам стало больше. Таким образом, можно говорить о том, что спектр интересов ПерсТа в последние годы становится шире.

ПерсТ было бы не так интересно читать, если бы в нём не было разделов, освещающих жизнь научного сообщества. Всегда любопытно узнать об учёных, празднующих юбилей в этом месяце, или о том, что произошло на той или иной научной конференции. Статей по этим разделам немного, и они небольшие, но они, несомненно, украшают бюллетень. Украсим и мы данную статью графиком статистики по этим разделам.



Интересно отметить, что раздел “финансирование” активно наполнялся в конце 1990-х – начале 2000-х, а после 2010 года публикации по этому разделу сошли на нет. А статьи по юбилеям, новостям с конференций и новым изданиям остаются на плаву, испытывая только волнообразные флуктуации.

Тематический раздел	Всего статей/ в выпуске	1998 – 2004	2005 – 2013	2014 – 2023
4. Квантовые системы	402/0,9	86/0,7	245/1,1	71/0,5
5. Наноматериалы	193/0,4	0/0	91/0,4	102/0,8
6. Графен	190/0,4	0/0	105/0,5	85/0,7
7. Финансирование	182/0,4	101/0,8	81/0,4	0/0
8. Спинтроника	154/0,3	35/0,3	95/0,4	24/0,2
9. Вести с конференций	99/0,2	60/0,5	24/0,1	15/0,1
10. Снова к основам	96/0,2	11/0,1	43/0,2	42/0,3
11. Микротехнологии	95/0,2	73/0,6	10/0,1	12/0,1
12. Торжество	64/0,1	21/0,2	18/0,1	25/0,2

В заключение приведу таблицу количества публикаций по остальным наиболее популярным разделам ПерсТ в рассматриваемых трех периодах (тройка лидеров уже представлена в первой таблице, остановились на 12-ом месте для ровного счета). Также указано среднее количество статей в выпуске по данной теме за эти периоды.

Приводить полную таблицу с данными по каждой теме и по каждому году нет смысла – она занимает слишком много места и слишком трудна для наглядного анализа. Из анализа также исключены разделы “Новости физики в банке препринтов” (по нему нет полной информации на сайте) и “Конференции” (этот раздел не содержит авторской переработки информации, а только копирует официальную информацию о конференциях).

По этой таблице можно примерно отследить динамику и представленность тем в бюллетене, – какие разделы были актуальны раньше, какие становятся актуальными сейчас.

Конечно, можно провести и экстраполяцию данных, попытаться предсказать, какие темы будут актуальны в будущем. Но, на мой взгляд, гораздо интереснее и важнее проводить настоящие научные исследования, и вы, уважаемые читатели, как раз и занимаетесь этим, создаете будущее нашей науки!

3. Пятакова

ТОРЖЕСТВО

От всего сердца

Дорогие наши читатели и почитатели!

Время быстротечно и летит незаметно, и вот уже очередной Юбилей! Не поверите, ПерсТу – **30 лет!** Для такого издания, как наше, это немало.

Я думала, что написать в юбилейной статье, какие придумать слова, как написать о том, что тебе дорого, что сказать людям, работающим с тобой рядом?

Ведь ПерсТ действительно уникален не просто как издание, а событие в нашей тридцатилетней научной жизни. Своему появлению и долгому существованию в непростые девяностые годы ПерсТ обязан Светлане Тимофеевне Корецкой, ее беспокойному сердцу и энтузиазму и конечно тем людям, которые были рядом: Ю.А.Осипьян, Ю.К.Мухин, О.В.Хлыстунова, А.К.Чернышева, и др....

У нас, я считаю, уникальная команда: чего стоят удивительные обзоры несравненной Ольги Алексеевой! Какие замечательные молодые авторы пришли к нам в редакцию: умницы и красавицы Зоя Пятакова и Анастасия Грекова, рассудительный Михаил Маслов, искромётный Александр Пятаков.

Я могу петь дифирамбы всем любимым авторам и редакторам: незаменимой Ирине Фурлевой, умным-разумным Климу Кугелю и Юрию Метлину. Без их труда и бескорыстия не было бы ПерсТа. Да, впрочем, они и сами (так мы договорились) скажут обо всем, а Зоя Пятакова провела настоящее научное исследование по тематическому анализу статей ПерсТа начиная с 1998 года. И за это ей отдельное спасибо.

ПерсТ за эти годы рос и развивался, появились новые рубрики, увеличилось число наших читателей.

Мы выражаем благодарность за поддержку и внимание дирекции ИФТТ РАН, Отделению физических наук РАН и многим другим.

Спасибо, спасибо, спасибо всем нашим читателям и почитателям за теплые слова и нежную критику в наш адрес. Мы и впредь будем стараться оправдывать ваши надежды.

Хочу пожелать себе, редакции и Вам дорогие читатели новых интересных ПерсТов: а значит любознательности, любопытства и новых открытий в науке!

Главный редактор ПерсТ'а, И. Чугуева

А теперь “ненаучное” слово авторам ...

30 лет Перспективным Технологиям!

В этом году мы отмечаем важный юбилей – тридцать лет бюллетеню ПерсТ. Тридцать лет – возраст для научного информационного издания солидный, и мне очень приятно, что почти половину этого пути, а это чуть меньше пятнадцати лет, я прошел вместе с ПерсТом. Так получилось, что его продолжительная интересная история тесно пересекается с моей личной. Преданным читателем ПерсТа я стал, обучаясь на втором курсе Московского инженерно-физического института, а в коллектив авторов вошел в статусе аспиранта, написав свою первую заметку в февральский выпуск 2009 года под номером четыре. С волнением вспоминаю тот момент, когда мой учитель и наставник Леонид Артурович Опенев буквально за руку впервые привел меня в редакцию и познакомил с Ириной Николаевной Чугуевой. Именно благодаря ее содействию и поддержке началась моя писательская карьера, и с тех пор я стараюсь не пропустить ни одного номера, отправляю заметку в каждый. Потом аспирантура закончилась, я успешно защитил кандидатскую диссертацию, через немалое время дорос уже до докторской, и всегда ПерсТ был рядом, помогая в учебе и работе. Теперь уже мои студенты и аспиранты с интересом листают его страницы, узнавая актуальные новости о современных научных открытиях и достижениях. Наблюдая за тем, с каким нетерпением они ждут каждый новый выпуск, могу с уверенностью сказать, что ПерсТ воспитает еще не одно будущее поколение молодых ученых. Ведь ПерсТ – явление уникальное. В наш информационный век он не перестает развиваться и не сдает позиций, поддерживая высочайший уровень. Кратко и емко на его страницах освещаются исключительно важные и интересные события, поскольку за каждой небольшой заметкой стоит несколько десятков прочитанных публикаций в ведущих российских и международных изданиях. Любой без исключения выпуск – это самые актуальные и самые свежие новости мира науки и технологий, которые в одно мгновение оказываются на столе (или экране монитора) у читателя. Иногда, как по волшебству, заметка в ПерсТе появляется практически одновременно с оригинальной публикацией на официальном сайте журнала. За оперативность и достоверность, точность и объективность, доступность и уни-

кальное неповторимое изложение материала ПерсТ по праву можно считать лучшим специализированным информационным изданием нашего времени. Я отношусь к ПерсТу с огромной теплотой и любовью и хочу от всего сердца поздравить его с юбилеем, пожелать успехов и процветания, творческого вдохновения, долголетия, новых рубрик, талантливых авторов и преданных поклонников.

М. Маслов

Даже не верится, но нашему информационному бюллетеню “ПерсТ” (“Перспективные Технологии”) в этом году исполняется 30 лет. Хотя, если говорить точнее, он несколько старше, поскольку с 1988г. по 1994г. бюллетень выходил под названием “Новости ВТСП”.

Его создание было вызвано необходимостью информационного сопровождения работ по Государственной Программе “Высокотемпературная сверхпроводимость” под эгидой Научного совета по ВТСП, возглавлявшегося акад. Ю.А. Осипьяном. Идеологом издания и организатором творческого коллектива авторов в эти годы была Светлана Тимофеевна Корецкая. Ей оказывали поддержку сотрудники Информационного центра Научного совета Ю.К. Мухин, И.Л. Фурлетова, О.В. Хлыстунова, а в число активных авторов входили Л.Опенев, Л.Журавлева, О.Алексеева, В.Вьюрков, А.Елецкий, М.Компан и ряд других научных сотрудников.

В связи с открытием новых классов материалов (фуллерены, графены, нанотрубки) тематика бюллетеня расширилась. Этим обусловлено и изменение его названия, приоритет на которое (“ПерсТ”) принадлежит С.Т. Корецкой.

В 2007 г. главным редактором бюллетеня стала Ирина Николаевна Чугуева. Ей удалось значительно обновить авторский коллектив и существенно расширить круг обсуждаемых актуальных проблем физики конденсированных систем и материаловедения (квантовые системы, наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии, мультиферроика, спинтроника, фотоника).

Хочется пожелать ПерсТу увеличить число авторов среди молодых ученых и идти в ногу с новыми веяниями и течениями в науке.

Ю.Метлин

ПерсТ’у 30 лет! Для печатного издания это очень и очень солидный возраст. К большому сожалению, за это время ушли из жизни: создательница и вдохновительница ПерсТ’а Светлана Тимофеевна Корецкая, самый активный и эрудированный автор Леонид Артурович Опёнов, организатор технической работы Юрий Константинович Мухин...

Но повзрослевший ПерсТ жив и, надеюсь, ещё поживёт и помолодеет на радость нашим дорогим читателям.

К.Кугель

30 лет ПерсТ’у!

За годы, прошедшие с прошлой замечательной даты, ПерсТ стал мудрее, ярче, но не потерял молодой задор! Рассказывает о необычном, интересном. Приносит новые знания и читателям, и авторам (которые, конечно, тоже читатели). Радует нас всех!

Огромная благодарность Редакторам – главному, научным, выпускающему!

Поздравляю всех нас с юбилеем ПерсТ’а!

О. Алексеева

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



*Сверкают снежинки,
искрятся под светом
Весёлых ночных фонарей,
Деревья в пушистые шали
одеты.*

*Походкой неслышной своей
Легко и беспечно к нам праздник шагает,
Включая обратный отсчёт,
Секунды последние в такт отбивая,
Стучится к нам в дверь Новый год.
Пусть принесёт этот гость вам в подарок
Здоровье, любовь и успех,
Пусть счастья навеет волшебные чары,
Добра и удачи для всех!*

Редакция и авторы ПерсТа

**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 М. Маслов, А. Пятаков, З. Пятакова
Выпускающий редактор: И. Фурлетова
Адрес редакции: 119296 Москва, Ленинский проспект, 6