

В этом выпуске:

НАНОМАТЕРИАЛЫ

Топологический изолятор в зимнем стиле

Эффекты, связанные с управлением зонной структурой в твердом теле, являются неиссякаемым источником идей для теоретиков и экспериментаторов. Одним из ярких открытий в последние годы стали топологические изоляторы, в которых за счет особой зонной структуры поверхностные состояния образуют конусы Дирака, благодаря чему поверхность диэлектрика является проводящей. При этом электроны с одним значением проекции спина могут двигаться только в одном направлении. Эти свойства не связаны с какими-то отдельными атомами на поверхности, а являются свойствами самого материала.

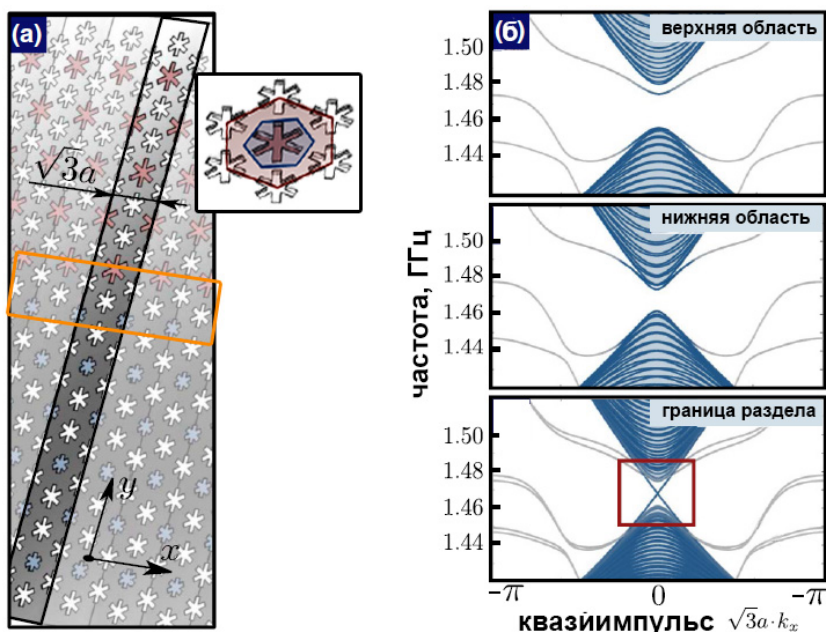


Рис. 1. а - Геометрия рассчитываемой структуры: на вставке система из “снежинок” – элементарная ячейка фононного кристалла, две области с разным размером центральных снежинок, граница раздела между ними (выделена в оранжевую рамочку); б - зонная диаграмма каждой области по отдельности и границы раздела. На зонной диаграмме границы видны конусы Дирака.

Зонная структура однородного материала определяется его химическим составом, но для искусственных материалов, таких как фотонные и фононные кристаллы, она определяется в основном геометрическими характеристиками. Естественно, возникает вопрос, а нельзя ли создать искусственный топологический изолятор, например, для акустических волн.

И далее ...

2 Управление электронной структурой графидина посредством его химического модифицирования

3 Фототермическая терапия опухолей. Старинная китайская тушь находит новое применение

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

5 Борные сенсоры диоксида азота

МАГНИТЫ

6 Приключения дислокаций в доменной структуре

КОНФЕРЕНЦИИ

7 International Conference “Scanning Probe Microscopy” (SPM-2018) combined with International Workshop “Modern Nanotechnologies” (IWMN-2018), and International Youth Conference “Functional Imaging of Nanomaterials” (FIN-2018), August 26 – 29, 2018, Ekaterinburg, Russia

International Conference “Functional Materials and NanoTechnologies - FM&NT-2018”, October 2 – 5 2018, Riga, Latvia

Для этого нужно найти такую структуру, которая в объеме имеет запрещенную зону для акустических волн, а поверхностные состояния образовывали бы конусы Дирака. Ранее [1] в ПерсТе уже писали о топологическом изоляторе для акустических волн, но в той модели были необходимы вращающиеся детали, что существенно затрудняет изготовление устройств. Система, предложенная группой ученых из Германии, США и Мальты [2], не содержит движущихся частей и обладает свойствами топологического изолятора только за счет геометрических параметров.

Авторы [2] предложили использовать двумерный фононный кристалл из кремния, представляющий собой гексагональную решетку, в узлах которой расположены структуры, напоминающие снежинки (рис. 1а, вставка). Технология создания и расчета таких структур хорошо отработана. Размер центральной “снежинки” может варьироваться. Авторы рассчитали структуру, состоящую из двух областей с разными размерами центральной “снежинки”, и оказалось, что граница раздела между такими областями обладает свойством топологического изолятора, ее поверхностные состояния образуют конусы Дирака (рис. 1б).

Правда, надо сказать, что данная система работает не для обыкновенных акустических волн, а для спиральных, обладающих псевдоспином, к недостаткам которых относятся технические сложности при возбуждении. Однако в этом тоже есть аналогия с уже ставшими привычными топологическими изоляторами для электронов, которые поддерживают распространение электронов с разными проекциями спина в разных направлениях. Расчеты показали, что акустические волны распространяются без обратного рассеяния даже в структурах с незначительными дефектами (не более 1%), что внушает оптимизм и ожидание появления таких устройств “в железе” уже в ближайшем будущем.

3. Пятакова

1. [ПерсТ 22, вып.7, с. 3 \(2015\).](#)

2. C.Brendel, et al., *Phys. Rev. B* **97**, 020102(R) (2018).

Управление электронной структурой графидина посредством его химического модифицирования

Авторы работы [1] представили исследование, посвященное изучению возможности изменения электронных свойств нового двумерного материала графидина посредством химического модифицирования. Графидин, представляющий собой новый устойчивый аллотроп углерода, который уже синтезирован экспериментально, демонстрирует уникальные свойства, включая высокие прочность и теплопроводность. В работе [1] исследована его электронная структура как экспериментально с помощью рентгеноспектрального анализа, так и с помощью расчета методом функционала плотности, что позволило выявить влияние различных химических элементов на электронный спектр графидина. Для экспериментального исследования использовали образцы графидина, выращенные на медной подложке, а для теоретического – пять различных образцов (чистый графидин, две конфигурации допированного азотом графидина и графидин с атомами кислорода и гидроксильными функциональными группами). Ранее было показано, что в электронном спектре графидина есть щель, что очень важно для его практического применения, однако ширина щели сильно зависит от метода расчета. Сравнение уже известных экспериментальных данных с результатами, полученными в работе [1] подтверждают достоверность использованного метода расчета.

В результате показано, что добавление кислорода приводит к увеличению щели, в то время как наличие гидроксильных групп приводит к уменьшению ширины щели по сравнению с чистыми образцами графидина. Кроме того, показано как в каждой из рассмотренных структур изменяется валентная зона и зона проводимости. Однако авторы отмечают, что к изменению ширины щели также может приводить локальное нарушение гексагональной симметрии графидина, присутствие других чужеродных химических элементов, способ синтеза, а также толщина полученного слоя. Природа химических элементов, так же как и их распределение по поверхности играет важную роль в формировании итоговой электронной структуры.

Полученные результаты демонстрируют возможность управления электронной структурой графидина посредством его химического мо-

дифицирования, что представляется важным для будущих его применений в нанoeлектронных устройствах.

Ю.Баимова

I. N. Ketabi, et al., Carbon 123, 1 (2017).

Фототермическая терапия опухолей.

Старинная китайская тушь находит новое применение.

С давних времен в Китае считалось, что в доме просвещенного человека непременно должны быть “четыре драгоценности” – кисть, бумага, тушь и тушечница. Как недавно выяснили китайские учёные, одна из “драгоценностей” – тушь – важна не только для искусства каллиграфии (кстати, очень популярного в наше время), но и для борьбы с онкологическими заболеваниями [1].

Фототермическая терапия (ФТТ) на основе наноматериалов (графена, углеродных нанотрубок) – перспективный метод лечения опухолей, который позволяет избежать хирургического вмешательства (см., например, ПерсТ [2, 3]). Выделение тепла при поглощении света разрушает больные клетки. Чтобы не повредить здоровые клетки, требуется излучение в ближнем ИК-диапазоне (обычно используют 808 нм лазер). В последнее десятилетие особенно активно изучают возможность устранения поражённых метастазами лимфоузлов. Однако применение искусственных наноматериалов в клинической практике затруднено – их синтез довольно сложный и дорогой, требуется тщательная очистка от примесей катализаторов. Авторы работы [1] обратили внимание на сходство наноматериалов на основе графена и традиционной чёрной китайской туши Hu-Kaiwen ink (Hu-ink), которую, как и тысячу лет назад, делают на основе сосновой сажи. Для экспериментов тушь разбавили водой. Полученные дисперсии исследовали с помощью электронной микроскопии, спектроскопии и других методов.

ТЕМ изображение дисперсии представлено на рис. 1. Видно, что наночастицы Hu-ink диаметром 20-50 нм образуют мелкие агрегаты. На рентгеновских дифрактограммах имеются только пики углерода. Рамановские спектры указывают на графеноподобную структуру. Кроме того, спектроскопические исследования выявили сильное поглощение излучения в ближнем ИК диапазоне. Воздействие 808 нм лазера на водные дисперсии Hu-ink привело

ПерсТ, 2018, том 25, выпуск 1/2

к значительному повышению температуры, особенно для концентраций 50 и 100 мкг/мл (рис. 1), в то время как температура воды без наночастиц выросла незначительно. Физико-химические свойства дисперсии в течение 90 дней не изменились. Серия экспериментов подтвердила биосовместимость Hu-ink. Эти данные, а также исключительно простой способ приготовления, говорят о перспективности “нового” наноматериала для ФТТ.

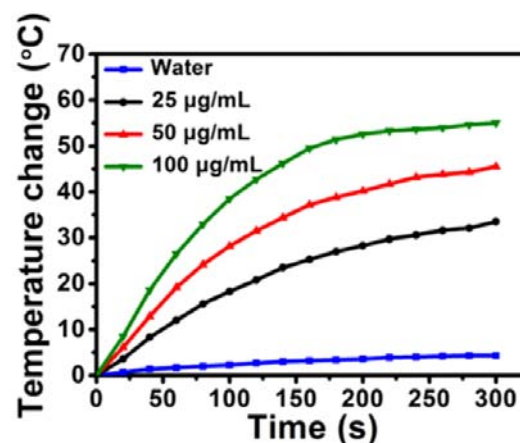
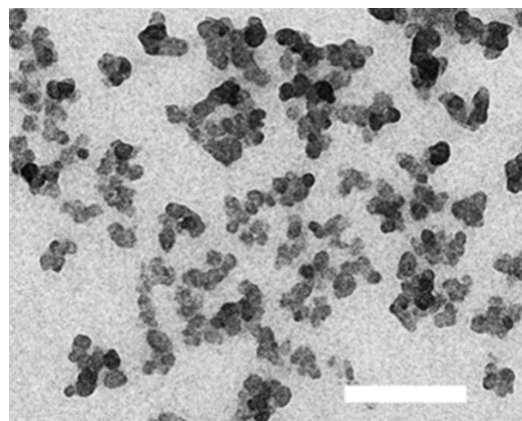


Рис. 1. Вверху: ТЕМ изображение дисперсии Hu-ink в воде (шкала 200 нм). Внизу: Изменение температуры после воздействия лазерного излучения (2 Вт/см², 5 мин.) на водные дисперсии с разной концентрацией туши (температура чистой воды выросла всего на 5 градусов).

Исследователи провели серию экспериментов на мышах с опухолями, которые уже дали метастазы в ближайшие (так называемые сторожевые) лимфоузлы. 20 мышей разделили на 4 группы по 5 мышей в каждой. Мышам в первой и второй группах путем инъекции в первичную опухоль на задней лапе вводили нормальный солевой раствор (NS), а мышам в третьей и четвертой группе – дисперсию Hu-ink. По лимфатическим сосудам дисперсия Hu-ink и NS попадали в подколенные лимфоузлы. Эти лимфоузлы у мышей из второй и четвертой групп облучали 808 нм лазером (1 Вт/см²,

5 мин) и с помощью ИК-камеры измеряли температуру лимфоузлов. У мышей четвертой группы (Hu-ink + лазер) локальная температура через 5 мин выросла с 26.4 до 58.8°C, что достаточно для уничтожения опухолевых клеток, а у мышей второй группы (NS + лазер) температура поднялась всего до 31.1°C. Через неделю мышей умертвили (под анестезией), чтобы изучить лимфоузлы. Результаты приведены на рис. 2. Как видно, для группы Hu-ink + лазер получен замечательный эффект.

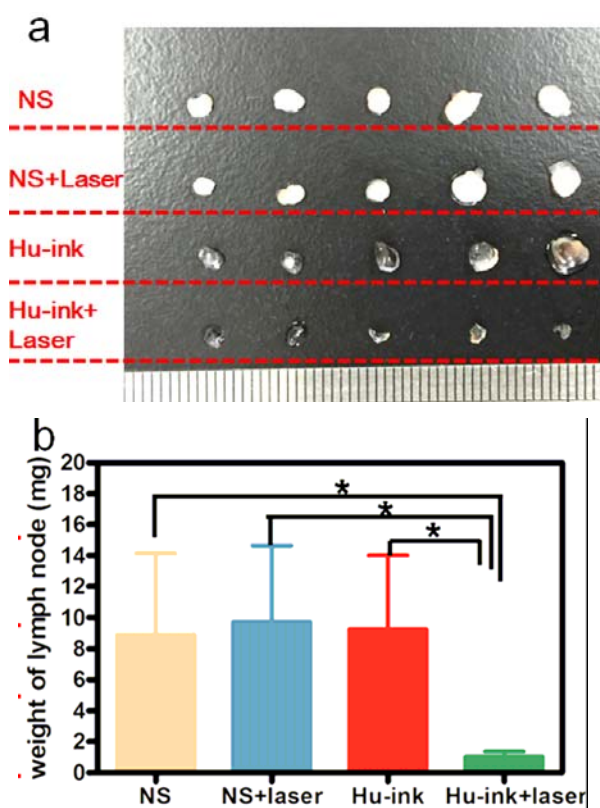


Рис. 2. а - Фотографии подколенных лимфоузлов, поражённых метастазами от первичной опухоли, для четырех групп мышей: (NS), (NS + лазер), (Hu-ink), (Hu-ink + лазер); б - вес лимфоузлов для каждой группы мышей.

Благодаря сильному поглощению в ближнем ИК-диапазоне, дисперсия Hu-ink может быть использована и как контрастный агент для фотоакустической визуализации* лимфоузлов. Исследования показали, что фотоакустические сигналы в подколенном лимфоузле после инъекции в первичную опухоль Hu-ink гораздо сильнее, чем после инъекции в первичную опухоль нормального солевого раствора (рис. 3).

Таким образом, старинному наноматериалу найдено новое важное применение. Как показано на рис. 4, Hu-ink можно использовать не только для обычного окрашивания (благодаря чёрному цвету наночастиц) и фотоакустической визуализации поражённых метастазами

лимфоузлов, но и для их последующего фототермического уничтожения.

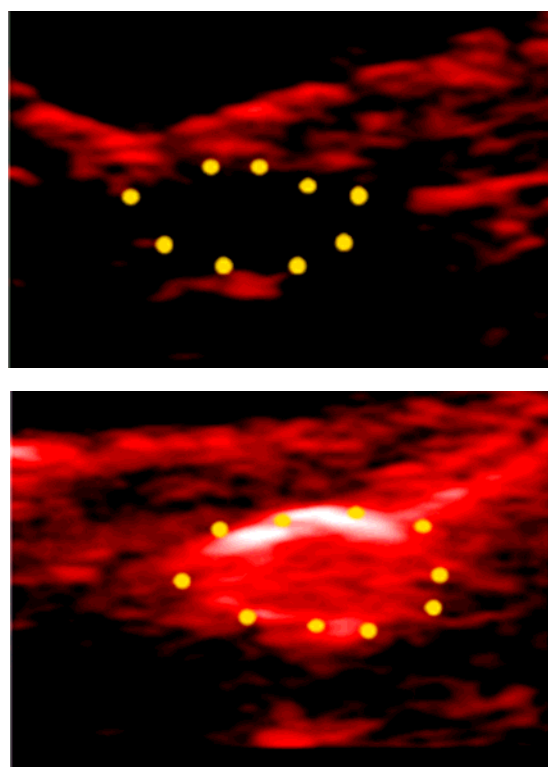


Рис. 3. Фотоакустические изображения подколенных лимфоузлов через 24 ч после инъекции в первичную опухоль нормального солевого раствора NS (вверху) и Hu-ink (внизу).



Рис. 4. Схема фототермической терапии поражённых метастазами лимфоузлов с использованием дисперсии Hu-ink. Дисперсию вводят в первичную опухоль на правой задней лапе мыши. Через 24 ч после инъекции Hu-ink из первичной опухоли переходит в поражённый метастазами лимфоузел, что подтверждают фото слева и в центре (слева – Staining, обычное окрашивание черными наночастицами Hu-ink, в центре – PAI, фотоакустическое изображение). Затем проводят фототермическую терапию РТТ с помощью воздействия на лимфоузел излучения 808 нм лазера

*Фотоакустическая (оптоакустическая) визуализация – современная медицинская методика, осно-

ванная на фотоакустическом эффекте. На биологическую ткань или специально введённые наночастицы воздействуют короткими лазерными импульсами. Поглощение света приводит к тепловому расширению и возбуждению ультразвуковых волн, которые могут быть зарегистрированы и преобразованы в изображение.

О. Алексеева

1. S.Wang et al., ACS Omega 2, 5170 (2017).
2. ПерсТ 24, вып. 17/18, с.2 (2017).
3. ПерсТ 20, вып. 7, с.2 (2013).

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

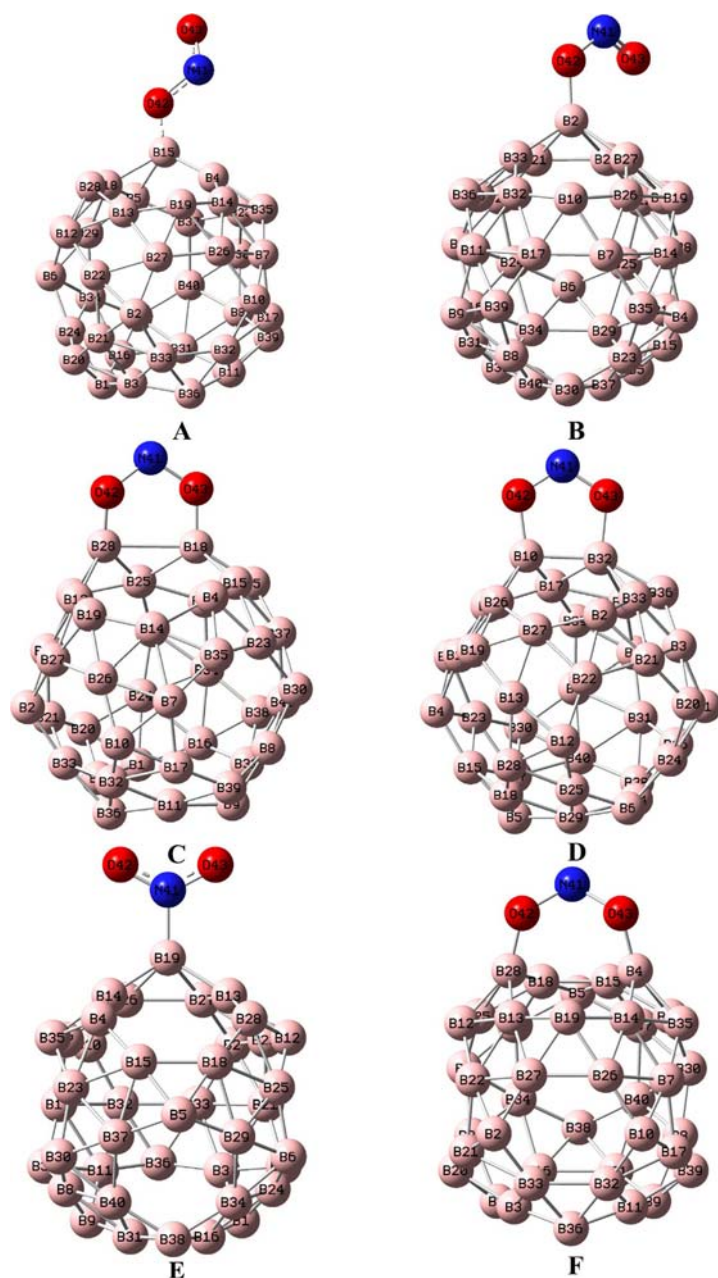
Борные сенсоры диоксида азота

Исследователи из Ирана сообщают о возможности использования борных фуллеренов в качестве эффективных детекторов диоксида азота [1]. К такому выводу авторы пришли на основании результатов компьютерного моделирования процессов адсорбции молекул NO_2 на поверхность как чистых “клеток” B_{40} , так и допированных литием эндоэдральных систем Li@B_{40} . В своих расчетах они использовали теорию функционала плотности, точнее ее реализацию в программе Gaussian 09, вместе со ставшим уже традиционным набором функционала и базиса B3LYP/6-31G(d). Согласно данным предсказательного моделирования молекулы диоксида азота хорошо связываются с поверхностью борного фуллерена, существенно изменяя при этом электронные характеристики последнего. Так, например, НОМО-ЛУМО щели различных молекулярных комплексов А, В, С, D, Е и F, представленных на рисунке, составили 1.25, 1.28, 2.14, 1.26, 1.19 и 1.89 эВ, соответственно, что на ~ 58, 56, 27, 57, 52 и 35 % ниже, чем у чистого B_{40} (2.93 эВ).

С эндоэдральными системами Li@B_{40} дело обстоит несколько иначе. Во-первых, следует отметить что внедрение лития внутрь борной клетки увеличивает ее устойчивость, и, кроме того, литий способствует усилению адсорбции NO_2 на фуллерене. Однако величина НОМО-ЛУМО щели самого Li@B_{40} существенно ниже, чем у чистого B_{40} и составляет всего 0.90 эВ. Поэтому при закреплении молекулы диоксида азота на эквивалентных чистому борному фуллерену атомах эндоэдрального комплекса она не уменьшается как в случае с B_{40} , а, напротив, увеличивается. Тем не менее, независимо от этого авторы предполагают, что если поместить фуллерен B_{40} или Li@B_{40} в электрическую цепь, то он вполне может генерировать электрический сигнал в зависимости от степени

ПерсТ, 2018, том 25, выпуск 1/2

уменьшения (в случае B_{40}) или увеличения (в случае Li@B_{40}) энергетической щели после закрепления NO_2 на его поверхности.



Оптимизированные структуры молекулярных комплексов $\text{NO}_2\text{-B}_{40}$

Таким образом, полученные результаты подтверждают, что борные фуллерены и эндоэдральные комплексы могут послужить перспективными химическими датчиками для мониторинга загрязнителей типа диоксида азота, и авторы рассчитывают, что их работа окажется полезной при разработке и проектировании эффективных борных сенсоров.

М. Маслов

1. Z.Maniei et al., Chem. Phys. Lett. 691, 360 (2018).

МАГНИТЫ

Приключения дислокаций в доменной структуре

Перед самым Новым годом в журнале *Scientific Reports* вышла статья ученых из Уральского федерального университета и Института физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, раскрывающая механизмы движения и взаимодействия магнитных дислокаций в переменном магнитном поле [1].

Дислокации (лат. *dislocatio* – смещение) в самом общем смысле представляют собой дефекты, нарушающие правильное расположение параллельных слоев, будь то атомные плоскости в кристалле, пласты в геологии или доменные границы в магнитоупорядоченном веществе.

Дислокации в полосовой доменной структуре, часто называемые головками доменов, легко наблюдать в оптически прозрачных образцах ферритов-гранатов (рис. 1). В переменном магнитном поле такие дислокации дрейфуют в направлении, перпендикулярном донным границам (рис. 1а-в), а при сближении могут аннигилировать, образовав правильную полосовую доменную структуру (рис. 1д). Процесс движения головки представляет собой последовательные стадии слияния доменных границ с образованием новой дислокации с противоположным направлением намагниченности в домене, что проявляется в виде переключения контраста головки от темного к светлому и обратно (рис. а-в).

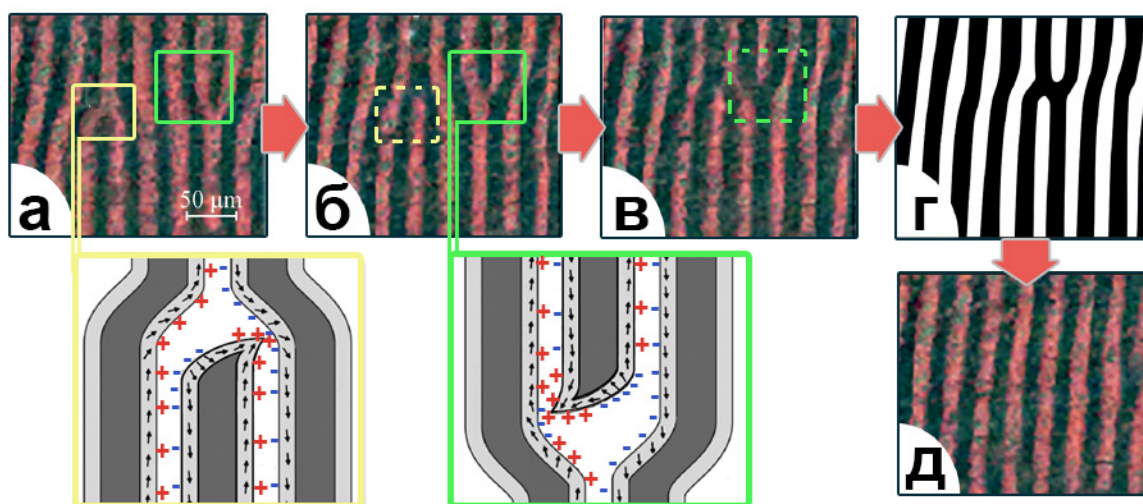


Рис. 1. Поперечный дрейф дислокаций в переменном поле, приложенном вдоль полосовой доменной структуры: а - начальное положение двух головок – светлой внизу и темной вверху (находятся в областях, выделенных желтым и зеленым, соответственно); б - переключение контраста нижней головки при ее движении вправо в области, выделенной штриховой желтой линией; в - дальнейшее сближение головок за счет перемещения в противоположных направлениях и переключения контраста; г - предполагаемая структура перед аннигиляцией дислокаций; д - полосовая структура после аннигиляции. Интервал времени, разделяющий кадры ~ 10 мс. Частота переменного поля 200 Гц, амплитуда ~100 Э.

На вставках показано распределение намагниченности в доменных границах, а также магнитные заряды (цветными значками «+» и «-»).

Механизм передвижения головок связан с наличием на кончике головок областей с разворотом намагниченности – вертикальных линий Блоха (ВБЛ). Как показано на вставках рис. 1, неоднородное распределение намагниченности в месте нахождения ВБЛ создает магнитные заряды, вызывающие притяжение соседних доменных границ и слияние их. В результате образуется головка домена с противоположным направлением намагниченности.

Таким образом, в данной работе продемонстрирован механизм нового малоизученного спо-

соба модификации распределения намагниченности – движение магнитных дислокаций в полосовой доменной структуре. Помимо важности данного наблюдения для динамики доменных структур, описанный эффект примечателен своим сходством с движением дислокаций в кристалле под действием механических напряжений – аналогии, которая при более пристальном рассмотрении может подарить новые красивые эффекты в магнетизме.

А. Пятаков

I. L.A.Pamyatnykh et al., Scientific Reports 7, 18084 (2017).

Перст, 2018, том 25, выпуск 1/2

КОНФЕРЕНЦИИ

International Conference “Scanning Probe Microscopy” (SPM-2018) combined with International Workshop “Modern Nanotechnologies” (IWMN-2018), and International Youth Conference “Functional Imaging of Nanomaterials” (FIN-2018), August 26 – 29, 2018, to be held in Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

Topics:

1. SPM in materials science
2. PFM, MFM, KPFM, SNOM, ESM, SEM, and related techniques
3. Tip-enhanced phenomena
4. Probe lithography and nanoindentation
5. Biocompatible & organic materials
6. Multiferroic phenomena and magnetoelectric coupling
7. Interface and domain engineering
8. Ferroelectrics, piezoelectrics, and ionic conductors
9. 1D and 2D nanostructured materials
10. Theory, modeling, and data processing

Official language: English

Web-site of SPM-2018:

<https://nanocenter.urfu.ru/ru/spm2018>

E-mail: spm-2018@labfer.ru

Tel/Fax: +7 (343) 2617436

International Conference “Functional Materials and NanoTechnologies - FM&NT-2018”, October 2 – 5 2018, Riga, Latvia

The prominent invited speakers from all over the world will present their invited talks about 'hot' scientific topics!

The conference topics include:

- Functional (inorganic, organic and hybrid) materials for electronics and photonics;
- Nanostructures (nanoparticles, nanotubes, core-shell structures, 3-D printing), nanocomposites and ceramics;
- Thin films and coating technologies;
- Theory and computational material science by atomistic scale modelling of technologically important materials and devices;
- Perspective materials and technologies for harvesting and saving of renewable energy: hydrogen, fuel cells, photovoltaics, piezoelectric, thermoelectric, LED and OLEDs, and developing of diverse energy systems.

Registration and abstract submission will be open in the early January, 2018.

For more information, please, follow the conference homepage <http://www.fmnt.lu.lv>.

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, Ю.Баимова, М.Маслов, А.Пятаков, З.Пятакова

Выпускающий редактор: И.Фурлетова

Адрес редакции: 119296 Москва, Ленинский проспект, 64^а