

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ  
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ им. А. Ф. ИОФФЕ  
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

---

# УГЛЕРОДНЫЕ И ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВЫ НАНОСТРУКТУРЫ

Тезисы докладов Молодежной конференции  
по физике полупроводников  
«Зимняя школа 2024»

Санкт-Петербург (г. Зеленогорск)  
29 февраля – 4 марта 2024 года



**ПОЛИТЕХ-ПРЕСС**

Санкт-Петербургский  
политехнический университет  
Петра Великого

Санкт-Петербург  
2024

ББК 22.379  
У25

**Углеродные и ван-дер-ваальсовы наноструктуры** : тезисы докладов Молодежной конференции по физике полупроводников «Зимняя школа 2024», Санкт–Петербург (г. Зеленогорск), 29 февраля – 4 марта 2024 г. – СПб. : ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2024. – 126 с.

Сборник содержит тезисы докладов-лекций ведущих специалистов и тезисы докладов молодых ученых-физиков по материалам собственных оригинальных работ, представленных на Молодежной конференции по физике полупроводников «Зимняя школа 2024» (29 февраля – 4 марта 2024 г.). ФТИ им. А. Ф. Иоффе ежегодно проводит Зимнюю школу по физике полупроводников для аспирантов, молодых ученых и студентов старших курсов. В 2024 году основная тематика программы – углеродные и ван-дер-ваальсовы наноструктуры. Традиционно включены лекции, посвященные Нобелевским премиям по физике и химии. К 300-летию Российской академии наук в программе представлена лекция «Миссия Российской академии наук и фрагменты ее истории, отраженные в уставах 1724–2014 гг.».

Издание предназначено для молодых исследователей, преподавателей соответствующих специальностей вузов, научных работников и инженеров, специализирующихся в области физики полупроводников.

Редакторы: *Е. В. Куницына, П. А. Дементьев*

ISBN 978-5-7422-8466-6

- © Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук, 2024
- © Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2024

## **Программный комитет**

С.А. Тарасенко (*председатель*)

А.Я. Вуль (*сопредседатель по основной тематике*)

А.Г. Забродский

С.В. Иванов

Е.Л. Ивченко

П.С. Копьев

Е.В. Куницына

А.Ю. Маслов

Р.В. Парфеньев

А.В. Родина

О.М. Сресели

Р.А. Сурис

## **Оргкомитет**

А.Г. Забродский (*председатель*)

Л.Ф. Гребеновская

П.А. Дементьев

Е.В. Дементьева

Л.В. Котова

Е.В. Куницына

Е.А. Лаврова

Н.С. Петрова

А.А. Пивоварова

## **Финансовая поддержка**

ФТИ им. А.Ф. Иоффе

ООО «ЭЛЬФОЛЮМ»

ООО «АВИРОН»

ООО «ИоффелеД»

ООО «ИНОПТ»

ООО «ДОК»

## **Техническая поддержка**

ООО «АНДЕРС»

<b>Четверг, 29 февраля</b>	<b>5</b>
<i>Н.Н. Розанов</i>	<b>14.40–15.25</b>
Предельно короткие электромагнитные импульсы. Нобелевская премия по физике 2023 года . . . . .	5
<i>А.В. Родина</i>	<b>15:30–16:15</b>
Квантовые точки. Нобелевская премия по химии 2023 года . . .	6
<i>Ю.В. Наточин</i>	<b>16.20–17.05</b>
Физиологические адаптации к физическим факторам внешней среды . . . . .	7
<i>А.Г. Забродский</i>	<b>17:30–18:15</b>
Миссия Российской академии наук и фрагменты её истории, отраженные в уставах 1724–2014 гг. . . . .	8
<i>О.В. Альмяшева, В.В. Гусаров</i>	<b>18.20–19.05</b>
Соединения, вещества, материалы: химия и технология . . . . .	10
<b>Пятница, 1 марта</b>	<b>10</b>
<i>А.Я. Вуль</i>	<b>09.30–10.15</b>
Углеродные наноструктуры — открытие на кончике пера . . . . .	11
<i>Е.Д. Образцова</i>	<b>10:20–11:05</b>
Многообразие низкоразмерных углеродных структур и их уникальные физические свойства . . . . .	12
<i>А.Г. Милёхин</i>	<b>15:00–15:45</b>
Ближнепольная спектроскопия графеноподобных материалов .	16
<i>Л.А. Чернозатонский</i>	<b>15:50–16:35</b>
Твистроника на графеновых слоях — атомные структуры и свойства: теория, эксперименты, приложения . . . . .	18
<i>А.В. Окотруб, Л.Г. Булушева</i>	<b>17.10–17.55</b>
Электронные и оптические свойства частично фторированного графена и графита . . . . .	20
<i>Н.А. Поклонский</i>	<b>18.00–18.45</b>
Релятивистский электрический потенциал одномерных проводников со стационарным током . . . . .	22

<b>Суббота, 2 марта</b>	<b>26</b>
<i>И.В. Крайнов</i>	<b>09:30–10:15</b>
Дробовой шум в резонансных туннельных структурах . . . . .	26
<i>П.С. Штернин</i>	<b>10:20–11:05</b>
Сверхтекучесть ядерной материи в наблюдениях остывающих нейтронных звёзд . . . . .	29
<i>Ю.В. Кульвелис</i>	<b>15:00–15:45</b>
Метод малоуглового рассеяния нейтронов для исследования наноматериалов . . . . .	30
<i>Д.Ю. Усачёв</i>	<b>15:50–16:35</b>
Фотоэмиссия с угловым разрешением для исследования электронной и спиновой структуры квазидвумерных материалов . . . . .	35
<i>М.М. Глазов</i>	<b>17:10–17:55</b>
Гетероструктуры на основе дихалькогенидов переходных металлов: кристаллическая структура, оптические свойства и транспортные эффекты . . . . .	37
<i>Т.В. Шубина</i>	<b>18:00–18:45</b>
Экситоны, оптические моды и экситон-поляритоны в наноструктурах на основе дихалькогенидов переходных металлов . . . . .	40
<b>Воскресенье, 3 марта</b>	<b>43</b>
<i>В.Ю. Мильников</i>	<b>09:30–10:15</b>
Генерация нерасходящихся пучков структурированного света при конической рефракции частично-когерентного излучения . . . . .	44
<i>С.В. Кидалов</i>	<b>10:20–11:05</b>
Фазовые переходы в углеродных структурах при высоких температурах и давлениях . . . . .	46
<b>Устная конкурсная стендовая сессия с докладами молодых учёных</b>	<b>48</b>
<i>С.Т. Байдак</i> Электронная структура топологических изоляторов $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ и $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ . . . . .	49
<i>М.Э. Бочкарев</i> Топология и кривизна: фотонные эффекты при замыкании диэлектрического кольца . . . . .	50
<i>А.И. Веретенников</i> Однофотонный источник на основе фотонной наноматрицы с квантовой точкой $\text{InAs}/\text{AlGaAs}$ . . . . .	52
<i>В.А. Грабарь</i> Параметры динамической поляризации ядер в $\text{Si:As}$ при низких температурах и сильных магнитных полях . . . . .	53

<i>А.В. Кузикова</i>	Лазерно-индуцированная терагерцовая эмиссия в спинтронных эмиттерах на основе гетероструктуры Co/Pt с модифицированным интерфейсом . . . . .	54
<i>В.А. Кузьмин</i>	Разработка гибридных материалов на основе GaAs нитевидных нанокристаллов и Ni для поглощающих покрытий .	56
<i>В.И. Куулар</i>	Основные свойства гидрированных детонационных наноалмазов . . . . .	58
<i>С.О. Поташин</i>	Гидродинамический эффект “храповика” при оптическом возбуждении электронной жидкости . . . . .	59
<i>И.О. Райков</i>	Определение спектральных свойств линейных систем с помощью ортогональных полиномов Якоби . . . . .	60
<i>К.И. Русских</i>	Оптические и спин-орбитальные эффекты в сферических нанокристаллах с оболочкой . . . . .	62
<i>А.Д. Трофимук</i>	Контролируемое удаление нескольких приповерхностных атомных слоёв в частицах детонационных наноалмазов . . . . .	64
<i>З.А. Яковлев</i>	Экситон-магнонное взаимодействие в слоистом двумерном полупроводнике CrSBr . . . . .	66

**Стендовая конкурсная сессия с докладами молодых учёных 67**

<i>Е.А. Алексеев</i>	Взаимовлияние параметров решетки комбинированного буферного слоя $\text{Ca}_{1-y}\text{Ba}_y\text{F}_2/\text{CaF}_2$ на Si(111) . . . . .	67
<i>Е.А. Богачёва</i>	Изучение адсорбционных свойств магнитной жидкости, модифицированной малослойным графеном, методом дисперсионной твердофазной экстракции . . . . .	69
<i>Н.А. Власов</i>	Влияние геометрических дефектов на добротность связанных состояний в континууме в структуре на основе GST	70
<i>В.А. Гергега</i>	<i>Ab-initio</i> исследование зонной структуры сплавов висмут-сурьма, богатых висмутом . . . . .	72
<i>М.А. Гребёнкина</i>	Структурные особенности фторированных графитов на основании их диэлектрических и магнитных свойств	73
<i>Е.И. Калашникова</i>	Триботехнические свойства наножидкостей (НЖ) на основе индустриального масла, модифицированных малослойным графеном . . . . .	75
<i>М.В. Левичев</i>	Анализ влияния поверхностных состояний на зонную структуру тонких пленок титаната бария . . . . .	76
<i>А.Д. Малевская</i>	Растекание тока в солнечных элементах: трёхпараметрическая трубковая модель . . . . .	78

<i>Д.Э. Мартьянов</i>	Формирование зольей детонационных наноалмазов в неводных растворителях на примере диметилсульфоксида . . . . .	80
<i>А.А. Молодцова</i>	Образование мицелл в активной материи на основе скопления роботов . . . . .	81
<i>Н.П. Пахольчук</i>	Двухфотонное возбуждение фотolumинесценции нанокристаллов CsPbBr <sub>3</sub> во фторфосфатной матрице . . . . .	82
<i>Н.Д. Подложнюк</i>	Модифицирование эпоксидных смол малослойным графеном . . . . .	84
<i>А.А. Пуговкин</i>	Формирование контактов к полупроводниковым приборам . . . . .	85
<i>А.К. Романчук</i>	Фотолитография в технологии изготовления полупроводниковых приборов . . . . .	87
<i>Н.С. Сандаков</i>	Параметры энергетического спектра электронов в квантующих магнитных полях в метаморфных гетероструктурах InGaAs/InAlAs . . . . .	88
<i>А.А. Сахнов</i>	Исследование однофотонной фотolumинесценции одиночных InAs/InAlGaAs квантовых точек на 1.55 мкм . . . . .	90
<i>К.В. Семушев</i>	Влияние материальных потерь на добротность связанных состояний в континууме в двуслойной диэлектрической структуре . . . . .	91
<i>А.И. Соломонов</i>	Перестраиваемые структуры для управления топологическим зарядом оптического вихря . . . . .	93
<i>С.И. Титова</i>	Влияние добавок малослойного графена, полученного в условиях СВС, на характеристики фотополимерных изделий, полученных DLP методом 3D-печати . . . . .	94
<i>К.А. Труханова</i>	Получение гидрозоля детонационного наноалмаза с узким распределением по размерам частиц . . . . .	96
<i>А.П. Четверикова</i>	Горячие точки и спектры рассеяния диэлектрического димера «кольцо-диск» . . . . .	97
<i>А.С. Чижикова</i>	Алмазные наночастицы как контрастный агент для магнитно-резонансной томографии . . . . .	99
<i>И. Шмидт</i>	Разработка технологии селективного травления GST для создания метаповерхностей с высоким оптическим контрастом . . . . .	100

<i>Е.В. Бодяго</i>	Применение функционализированных посредством азотной кислоты углеродных нанотрубок в светоизлучающих электрохимических ячейках на основе перовскита . . . . .	102
<i>С.А. Вотьяков</i>	Система метастабильных объемно-локализованных электронных состояний в положительно заряженных полупроводниковых одностенных углеродных нанотрубках . . . . .	104
<i>П.А. Дементьев, Е.В. Дементьева, А.А. Шакирова, К.Н. Орехова, М.В. Загорянская</i>	Структурные и люминесцентные свойства кубической керамики $ZrO_2-HfO_2-Y_2O_3-Eu_2O_3$ , выращенной методом соосаждения . . . . .	105
<i>А.А. Дмитриев</i>	Исключительные точки в собственных оптических модах димеров частиц из диэлектрических и полупроводниковых материалов . . . . .	107
<i>Д.М. Колесникова, Д.С. Березина, Ю.А. Салий, Ю.М. Задиранов, И.П. Смирнова, С.И. Трошков, А.Н. Семенов, Д.В. Нечаев, Е.А. Европейцев, М.М. Кулагина, В. Н. Жмерик</i>	Формирование 3D–2D гетероструктур с монослойными квантовыми ямами GaN/AlN методом двухстадийного плазменного и химического травления . . . . .	108
<i>А.А. Кутузова</i>	Сенсор на основе суперрезонансных мод повышенной чувствительности к изменениям системы . . . . .	110
<i>О.М. Кущенко</i>	Гибридная платформа GST-перовскит для динамического управления интенсивностью фотolumинесценции	112
<i>О.Е. Лакунцова</i>	Моделирование спектров отражения эпитаксиальных гетероструктур с распределенными брэгговскими отражателями для задач квантовой фотоники . . .	113
<i>Д.А. Литвинов</i>	Усиление спонтанного излучения перовскитов с помощью материалов с фазовой памятью . . . . .	115
<i>Е.Э. Маслова</i>	Связанные состояния в континууме: устойчивость к структурному беспорядку . . . . .	117
<i>В.Ю. Мильников</i>	Модовый состав излучения квантово-каскадных лазеров среднего ИК диапазона . . . . .	118
<i>А.В. Окотруб, А.А. Ворфоломеева, Л.Г. Булушева</i>	Строения и свойства углеродных нанотрубок, заполненных фосфором и серой . . . . .	119
<i>А.А. Середин</i>	Усиление фотolumинесценции коллоидных квантовых точек в плазмонной метаповерхности со связанными состояниями в непрерывном спектре . . . . .	120



# Предельно короткие электромагнитные импульсы. Нобелевская премия по физике 2023 года

Н.Н. Розанов

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Нобелевская премия по физике 2023 г. присуждена Пьеру Агостини, Ференцу Краушу и Анн Л'Юилье “За экспериментальные методы генерации аттосекундных импульсов света для изучения динамики электронов в материи” [1]. Метод получения столь коротких импульсов, предложенный, разработанный и использованный лауреатами, заключается в суммировании большого числа сфазированных гармоник лазерного излучения при распространении интенсивного лазерного излучения в газе. Достигнутая длительность импульсов уже менее кеплеровского периода вращения электрона по боровской орбите атомов. Аттосекундные импульсы с успехом использованы лауреатами и их последователями для контроля динамики электронов в атомах, молекулах и конденсированных средах.

Указанный метод обладает ограничениями, не допускающими дальнейшее сокращение длительности импульсов. Ввиду этого естественен вопрос о путях такого сокращения. В докладе приводится обзор подходов к решению этого вопроса, рассматривается физика предельно коротких электромагнитных импульсов и обсуждаются их возможные приложения [2].

Российский научный фонд, грант 23-12-00012.

## Литература

- [1] Н.Н. Розанов, *Природа*, №12, 41–47 (2023).
- [2] Н.Н. Розанов, М.В. Архипов, Р.М. Архипов, А.В. Пахомов, в коллективной монографии *Терагерцовая фотоника*, М.: РАН, 2023, с. 360–393.

## Квантовые точки.

### Нобелевская премия по химии 2023 года

А.В. Родина

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Нобелевская премия по химии 2023 года присуждена Алексею Екимову, Луису Брюсу и Мунги Бавенди за “открытие и синтез квантовых точек”. Полупроводниковые квантовые точки или нанокристаллы — первые в мире низкоразмерные полупроводниковые наносистемы, обеспечивающие пространственное ограничение носителей заряда во всех трех направлениях. Эффект размерного квантования приводит к формированию дискретного спектра электронных состояний, который и определяет зависящие от размера оптические свойства квантовых точек. Исследования оптических свойств полупроводниковых нанокристаллов в стеклянной матрице А.И. Екимовым и сотрудниками в ГОИ им. С.И. Вавилова в Ленинграде, и в водном растворе Л. Брюсом и сотрудниками в лаборатории Белла (США), в начале восьмидесятых годов прошлого века положили начало новой области — физики полупроводниковых нульмерных структур. Основы теории оптических свойств сферических квантовых точек были заложены теоретиками из ФТИ им. А.Ф. Иоффе Ал.Л. и А.Л. Эфросами. Современная технология химического коллоидного синтеза, основы которой были заложены в работах М. Бавенди в Массачусетском технологическом институте в начале девяностых годов, позволяет получать полупроводниковые квантовые точки с заданным “цветом” и другими оптическими свойствами. В настоящее время квантовые точки широко применяются в оптоэлектронике (источники белого света, светодиоды, дисплеи и телевизоры), фотовольтаике (элементы солнечных батарей), медицине и биологии (сенсоры и метки). Лекция будет посвящена истории открытия полупроводниковых нанокристаллов [1], а также обзору основных направлений их исследований и применений в настоящее время [2, 3]. Мы постараемся ответить на вопрос, относятся ли исследования полупроводниковых нанокристаллов к области химии или к области физики [4].

#### Литература

[1] Al.L. Efros, L.E. Brus, *ACS Nano* **15**, 6192 (2021).

[2] F.P. Garcia de Arquer *et al.*, *Science* **373**, 640 (2021).

[3] C.R. Kagan *et al.*, Chem. Rev. **121**, 3186 (2021).

[4] А.В. Родина, Природа **12**, 48 (2023).

## **Физиологические адаптации к физическим факторам внешней среды**

Ю.В. Наточин

Институт эволюционной физиологии и биохимии им. И.М. Сеченова РАН, Санкт-Петербург, Россия

Здоровье человека — возможность думать, быть счастливым, генерировать идеи, радоваться поэтическим строкам и спортивным достижениям, физиологически связано с быстрой и эффективной адаптацией к физическим условиям окружающей среды, жить в гармонии с внешним миром, но быть свободным и независимым. Для этого физиологические системы организма человека создают стабильную внутреннюю среду, оптимальную для работы каждой клетки и органа тела. Они обеспечивают гомеостаз — динамическое, непрерывно возобновляемое постоянство основных физико-химических констант жидкостей внутренней среды, которая служит внешней для клеток разных органов и тканей. Тем самым, организм приспосабливается к таким физическим факторам внешней среды как гравитация, жизнь в пресной или морской воде, безводной пустыне. В лекции будут перечислены проблемы и даны решения, касающиеся механизма физиологических адаптаций к физическим факторам внешней среды, обсуждена ключевая роль почек в поддержании водно-солевого гомеостаза.

### **Проблемы и решения**

1. Искусственная почка — гемодиализ, замещение почки как органа выделения, и ответ — почему она не смогла полностью заменить почки человека. Функции почки.
2. Как выжить в океане — кровь человека и многих животных имеет осмоляльность ниже, чем вода океана, для опреснения морской воды появились солевые железы у акул, черепах, птиц, секреторная функция в жабрах у рыб.
3. Почему осетр Каспия назван Русский осетр.
4. Новая гипотеза происхождения жизни на Земле — в море или в калиевом водоеме?

5. Загадка  $-K^+/Na^+$  отношение в жидкости  $\sim 0.03$ : океан, Вселенная, сы-воротка крови.
6. Полет в космос — способы адаптации человека к микрогравитации.
7. Голодание: роль почки в выживании жителей блокадного Ленинграда.
8. Орфанные болезни, пневмония у детей — причина потери жажды, син-дром секреции вазопрессина в легких.

## **Миссия Российской академии наук и фрагменты её истории, отраженные в уставах 1724–2014 гг.**

А.Г. Забродский

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

28 января (8 февраля) 1724 г. Правительствующий Сенат указом известил о том, что император Петр I “указал учинить Академию, в которой бы учились языкам, также протчим наукам и знатым художествам и переводили бы книги” и утвердил “Проект Положения об учреждении Академии наук и художеств”. Документ был составлен по поручению Петра I его лейб-медиком Л.Л. Блюментростом, который стал её первым президентом, под большим влиянием Г.В. Лейбница (основателя и первого президента Берлинской Академии наук, члена Лондонского королевского общества, иностранного члена Французской Академии наук), был выправлен одобрен Петром I.

Академия создавалась как научное учреждение с состоящими при ней гимназией и университетом. Университет определялся “как собрание людей, которые наукам высоким ... до какого состояния оные ныне дошли, младых людей обучают”. Академия же — как “собрание ученых и искусных людей, которые не только сии науки в своем роде, в том градусе, в котором оные ныне обретаются, знают, но и чрез новые инвенты (изобретения) оные совершать и умножить тщатся”. Академия и академики (11 человек) делилась на 3 класса — математический (чистая математика-1, астрономия, география, навигация-1, механика-2), физический (физика теор. и эксп.-1, анатомия-1, химия-1, ботаника-1) и гуманитарный (ораторское искусство и антиковедение-1, история древняя и нынешняя-1, право, политика и этика-1), а классы — на кафедры. Она отличалась от европейских аналогов, как и Университет, который состоял из трех факультетов — юридического, медицинского и философского.

Каждый академик должен был регулярно готовить обзоры (“экстракты”) по состоянию соответствующей области мировой науки и изобретениям в ней, а также, по указанию императора, заниматься прикладным применением своей науки. Академики были обязаны еженедельно обсуждать вместе свои результаты, подготавливать для студентов курсы лекций, 3 раза в год устраивать тематические публичные ассамблеи с участием иностранных ученых. Для пользы государства Академия находилась в ведении императора, как своего защитника, и была самоуправляемой организацией под руководством избираемого (эта норма стала работать лишь с 1917 г.) президента. Академикам в помощь придавались молодые студенты, которые получали за это жалование. В пользование Академии предоставлялись Кунсткамера и Библиотека. Предусматривался необходимый штат (секретари, библиотекари, переводчики вплоть до художника и гравюровального мастера) и бюджет 24912 “рублев, которые збираютца з городов Нарвы, Дерпта, Пернова и Аренсбурха таможенных и лицентных” (начертано на полях Петром I).

Большинство статей содержало мотивацию, что облегчало понимание логики документа и последующую оценку, сколь успешно прошла она испытания временем. Миссия Академии состояла в том, чтобы, не копируя зарубежный опыт и исходя в развитии наук из реального состояния российского государства, иметь целью не только повышение его научного имиджа, но и принесение практической пользы.

Функционал Академии сводился, в основном, к обязанностям академиков: быть в курсе достижений своей науки и развивать её; писать обзоры экстракты; еженедельно по несколько часов обсуждать всем вместе новые результаты и демонстрировать опыты; апробировать зарубежные изобретения и сообщать: “верны ли оные изобретения, великой ли пользы или малой; известны ли они или нет”; выполнять указания императора в области своей науки; готовить курсы для учащихся; для академии в целом — проводить ежегодно 3 ассамблеи с участием чужестранных ученых. Много места уделено заботе об эффективности труда академиков: наличию ассистентов, технического персонала, переводчиков и в решении бытовых проблем, без чего немислимо было привлечь иностранных ученых к работе в России.

На основе этого документа Академия функционировала до 1747 г., когда был утвержден её Регламент, а, по сути, устав. Потом было еще 10 других уставов. Изменение уставов отражало новые запросы государства на развитие отечественной науки, а также изменения общественно-политической системы, за которыми менялись и названия Академии (уставы 1925 и 1991 г.). Обозреть их в одной лекции невозможно, да и не имеет смысла, поскольку не все они содержали принципиальные новации, оказавшие заметное влия-

ние на развитие науки и государства. В лекции, наряду с петровским будет рассмотрен последний императорский устав 1836 г., последний устав предвоенных пятилеток 1935 г., последний устав зрелого социализма 1963 г. и последние постсоветские уставы. Это — устав 2007 г., когда в РАН состояло порядка 1000 членов, а в сотнях её институтов работало несколько десятков тысяч научных сотрудников, и последовавший за ним устав 2014 г. реформированной (согласно 253 ФЗ) РАН путем включения в её состав членов двух академий — РАН и РАСХН, передачи учреждений всех академий в ведение ФАНО России и изменения решаемых РАН задач и выполняемых функций.

## **Соединения, вещества, материалы:**

### **ХИМИЯ И ТЕХНОЛОГИЯ**

О.В. Альмяшева, В.В. Гусаров

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Рассмотрены принципиальные подходы, последовательность и иерархическая структура действий, потенциально возможные строительные элементы (блоки) при создании новых материалов в зависимости от характера, целей и задач стоящих перед химией неорганических веществ и материалов.

Приведены некоторые примеры создания новых материалов и новых классов материалов, над разработкой которых работала наша научная группа — материалы для пассивных систем безопасности АЭС (жертвенные материалы и оксидные катализаторы окисления водорода), оксидные мультиферроики на основе нанокристаллов и соединений со слоистой структурой, материалы на основе гидросиликатных нанотрубок и квазиодномерных гетерофазных структур — продуктов химической трансформации гидросиликатных нанотрубок.

Показана роль физико-химического моделирования для прогноза состояния материалов в области относительно низких температур и перспективы развития низкотемпературной химии — химии “низкоэнтальпийных” (высокоупорядоченных) твёрдых фаз, как основы создания большого класса новых химических соединений и новых материалов.

Рассмотрены возможности и перспективы развития химической технологии наноматериалов на основе процессов с самоорганизующимися ограничениям массопереноса — самоорганизующимися нанореакторами.

# Углеродные наноструктуры — открытие на кончике пера

А.Я. Вуль

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

В докладе рассказывается об удивительной истории открытия фуллеренов, названных в честь архитектора Бакминстера Фуллера — автора купольных конструкций из пяти- и шестиугольников [1].

Фуллерены появились “на кончике пера” (“at the tip of a pen”) теоретиков в Японии и России [2,3], были обнаружены экспериментально спустя 15 лет [4], а способ их получения в макроскопических количествах был предложен спустя еще пять лет — в 1990 году [5]. Именно с этого момента, когда фуллерены стали доступны широкому кругу исследователей, начался “фуллереновый бум”, связанный с изучением уникальных физических и химических свойств фуллеренов, а также нанотруб — углеродных кластеров диаметром около десяти ангстрем и с длиной, в тысячи раз превышающей их диаметр. Интересно отметить, что первые работы по нанотрубам были также выполнены в Японии и России [6,7].

Наука о фуллеренах принципиально носит междисциплинарный характер. Например, обнаружение фуллеренов было связано с намерением радиоастрономов обнаружить химические молекулы в межзвездной среде (inter stellar molecules), в тоже время медики изучают фуллерены для применения в медицине [8].

Сегодня, спустя 30 лет после открытия фуллеренов, исследования углеродных наноструктур, включая фуллерены, нанотрубки, наноалмазы и, конечно, различные формы графена, являются одним из основных направлений науки о материалах.

Поэтому представлялось интересным проследить историю открытия, удостоенного Нобелевской премии по химии в 1996 году: R. Curl, R.E. Smalley, H.W. Kroto “..за открытие фуллеренов” (“... for their discovery of fullerenes”), открытия, которое во многом определило всплеск интереса и развитие исследований углеродных наночастиц во всем мире.

Откровенные интервью [9] и знакомство с действующими лицами, определившими открытие фуллеренов [10,11], облегчили задачу автора доклада.

## Литература

- [1] R.B. Fuller. *Operating manual for space ship Earth* 2nd print. Carbondale-Edwardsville: South. Illinois Univ. press; London-Amsterdam: Feffer. Simons, 1970, 143 p.
- [2] E. Osawa. Kagaku (Kioto), **25**, 854–863 (1970) (in Japanese); Chem. Abstr., **74**, 575698v. (1971).
- [3] Д.А. Бочвар, Е.Г. Гальперн. *О гипотетических системах: карбододекаэдре, s-икосаэдре и карбо-s-икосаэдре*. ДАН СССР, **209**, 610–612, (1973).
- [4] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl, R.E. Smalley. *Buckminster fullerene*. Nature, **318**, 162–163 (1985).
- [5] W. Kratschmer, L.D. Lamb, K. Fostiropoulos, D.R. Huffman. *Solid C<sub>60</sub>: a new form of carbon*. Nature, **347**, 354–358 (1990).
- [6] S. Iijima. *The 60-carbon cluster has been revealed!* J. Phys. Chem., **91**, 3446–3467 (1987).
- [7] L.A. Chernozatonskii. *A non-fullerene from C<sub>60</sub> and metal-doped C<sub>60</sub> solid*. Phys. Lett. A., **160**, 392–396 (1991).
- [8] Л.Б. Пиотровский, О.И. Киселев. *Фуллерены в биологии*. СПб.: Росток. 2006. с. 336
- [9] I. Hargittai. *Candid Science. Conversation with famous chemists*. Imperial, College Press. 2000, London. ISBN 1-86094-151-6
- [10] A.Ya. Vul', D. Huffman. *Fullerene Applications: the first steps from dreams to reality*. Mol. Mater. **10**, 37–46 (1998).
- [11] V.V. Lemanov, S.V. Kozyrev, S.V. Kidalov, A.Ya. Vul'. *Fullerenes in Russia*. Fullerene Science and Technology, **6**, 361–374 (1998).

## Многообразие низкоразмерных углеродных структур и их уникальные физические свойства

Е.Д. Образцова

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва,  
Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

Углерод является прекрасным образцом для демонстрации влияния размерных эффектов на структуру и свойства материала. Уже в макро-состоянии существует 3 прообраза одно-, двух- и трех-мерных углеродных структур — это алмаз, графит и карбин, обладающие  $sp^3$ -,  $sp^2$ -, и  $sp^1$ - типами химических связей, соответственно [1]. При уменьшении размера структурных элементов до 10 нм и менее возникает 3 семейства наноуглеродных структур. Например, для алмаза это — алмазные иглы (1-мерные структуры) и наноалмаз



(0-мерная структура). Наиболее богатым на модификации оказался графит — это и графен (2-мерная модификация), и одностенные углеродные нанотрубки и сверхузкие полосы графена — (одномерные структуры), и графеновые квантовые точки (0-мерная структура). Кроме того, возможны комбинации различных модификаций, например, одностенные углеродные нанотрубки, заполненные молекулами  $C_{60}$ , — углеродные стручки (“carbon reapods”), ОУН с прикрепленными снаружи молекулами  $C_{60}$  — углеродные нанопочки (“carbon nanobuds”), сферические сетки различного диаметра, многократно вставленные одна в другую, — лукообразный углерод (“onion-like carbon”). Почти все эти структуры уже сегодня нашли технологические применения.

Хотелось бы остановиться на основных технологических применениях углеродных наноструктур различной размерности. Начнем с графена и одностенных углеродных нанотрубок.

С 2004 года [2] одностенные углеродные нанотрубки стали рассматриваться в качестве материала для сверхбыстрых нелинейно-оптических модуляторов, работающих в широком спектральном диапазоне — так называемых “насыщающихся поглотителей” [3–6], необходимых для осуществления оптических коммуникаций и лазерной хирургии. Эти элементы, введенные в резонатор лазера, позволяют преобразовать непрерывное излучение в последовательность субпикосекундных импульсов [3–6]. Однако из-за ограниченных геометрических параметров (максимального возможного диаметра стабильных нанотрубок) затруднительно расширить рабочий спектральный диапазон за пределы “окна” 0,7–3,0 мкм. В 2009 году одиночный лист графита — графен — также продемонстрировал замечательные нелинейно-оптические свойства [7–10]. Применение графена обеспечивает возможность работать в гораздо более широком спектральном диапазоне (минимум до 12 мкм). Сегодня спектральный рабочий диапазон лазеров 1–2 мкм полностью исследован, и взгляды исследователей обращаются в диапазон 2–5 мкм, тем более, что недавно были сформированы тербиевые волокна с рабочей длиной волны 5 мкм [11].

Вторым крупным применением графена и углеродных нанотрубок в оптоэлектронике является создание проводящих прозрачных электродов. После процесса синтеза ОУН обычно представляют из себя смесь нанотрубок с полупроводниковой и металлической проводимостью (в среднем, в соотношении 2:1). Недавно был предложен новый подход к модификации проводящих свойств нанотрубок (от полупроводникового до металлического типа). Метод состоит во внедрении во внутреннее пространство нанотрубки различных молекул (акцепторов или доноров электронов) из газовой фазы. Новые молекулы образуют различные структуры (от моно- и мультицепей [12] до одно-

мерных кристаллов) в зависимости от диаметра и геометрии исходной нанотрубки. В результате электроны движутся к (или от) этих новых внутренних структур, а уровень Ферми исходной нанотрубки смещается в валентную зону или зону проводимости. При этом электрическое сопротивление материала уменьшается. Электрофизические измерения для заполненных нанотрубок проводятся довольно редко. Им мешает низкое качество конечного материала, обычно заполняемого из расплава. При газофазном заполнении ОУН (например, йодом или  $\text{CuCl}$ ) структура и оптическая прозрачность пленок ОУН после заполнения практически не изменяется. Тем не менее, измерения HRTEM выявляют хорошо упорядоченные одномерные кристаллы внутри нанотрубок. Электрическое сопротивление пленок ОУН после заполнения снижается более, чем на порядок (до 70 Ом/кв.) [13–16]. Такие пленки имеют высокий потенциал для создания проводящих прозрачных электродов в оптоэлектронике. Они работают даже в УФ спектральной области, что важно, например, для формирования GaN фотодиодов.

Одномерные углеродные наноматериалы (одностенные углеродные нанотрубки (ОУН) и сверхузкие полосы графена (ГНП) [17] имеют электронную и экситонную структуру сингулярного типа и представляют интерес для электронных и оптических приложений. Если ОУН изучены достаточно подробно, то исследования другого одномерного материала — сверхузких графеновых полос — затруднены из-за сложного синтеза (особенно в больших количествах). ГНП совместимы с 2D-материалами и могут быть эффективно внедрены в плоскую электронику. Среди всех возможных геометрий нанолент 3-AGNR кресельные графеновые наноленты имеют самую узкую ширину — менее 1 нм [19]. Обычно 3-AGNR синтезируют в условиях сверхвысокого вакуума (СВВ) на подложках из благородных металлов. Выход довольно низкий, поскольку ГНР образуются практически в виде монослоя. В последнее время реализован более эффективный подход, основанный на методе химического газофазного осаждения, осуществляемого методом “снизу-вверх”. На основе предложенного метода мы успешно синтезировали пленки 3-AGNRs различной толщины на никелевой фольге в условиях низкого вакуума. Полученные ГНП были исследованы методами оптической спектроскопии. Они демонстрировали яркую фотолюминесценцию (ФЛ) в синей области спектра с характерными особенностями, расположенными при 430 и 455 нм. Это свойство перспективно для применения ГНП (как и ОУН) в качестве оптических маркеров, а также активного материала для лазерной генерации [20].

Несмотря на то, что разговор о 0-мерных графеновых структурах — квантовых точках (ГКТ) — ведется давно, ГКТ с кристаллическим графеновым ядром получены относительно недавно [21]. Обычно их производят в сверх-

высоком вакууме методом “снизу вверх” на поверхности золота или другого благородного металла с монослойным покрытием молекулами ДББА. Недавно ГКТ с регулируемыми размерами, были синтезированы простым и удобным (используемым при атмосферном давлении), методом — за счет микроплазменного преобразования натурального биосовместимого материала — хитозана. Такой быстрый синтез не нуждался в сильных кислотах и основаниях, ядовитых растворителях и химикатах, а также в высокотемпературных и вакуумных условиях [21–23]. Контроль размеров и структуры ГКТ произведен методами оптической спектроскопии.

ГКТ демонстрируют яркую фотолюминесценцию (ФЛ) в УФ спектральной области. Оказалось, что ее можно эффективно использовать для индикации присутствия и оценки количества тяжелых металлов в водных растворах. ГКТ использовались также в качестве фильтров для очистки суспензий от тяжелых металлов [22]. ГКТ с добавлением азота использовались для выявления белков в водных суспензиях [23]. При различных уровнях pH в растворе регистрировались различные биомолекулы (глюкоза, фруктоза, тирозин, глицин и т.д.) Такой подход может быть эффективно применен для проведения многочисленных медицинских анализов.

Здесь приведен небольшой обзор применений наноуглерода различной размерности в нелинейной оптике и лазерной физике, оптоэлектронике, сенсорах, экологии, биофизике. Он дает основание полагать, что сфера применения этих уникальных материалов будет существенно больше.

Работа поддержана РФФ — 21-72-20050.

## Литература

- [1] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P.C. Eklund, в кн. *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, New York, NY, San Diego, CA: Academic Press, 1996.
- [2] Y. Set, H. Yaguchi, *et al.*, Book of Abstracts OFC'03 USA, 2003, Paper №. PDP44.
- [3] N.N. Il'ichev, E.D. Obratsova, S.V. Garnov *et al.*, *Quantum Electronics*, **34**, 572 (2004).
- [4] S.V. Garnov, S.A. Solokhin, E.D. Obratsova *et al.*, *Las. Phys. Lett.*, **4**, 648 (2007).
- [5] M.A. Solodyankin, E.D. Obratsova, A.S. Lobach *et al.*, *Opt. Lett.*, **33**, 1336 (2008).
- [6] A.V. Tausenev, E.D. Obratsova, A.S. Lobach *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **92**, 171113 (2008).
- [7] L.J. Bao, H. Zhang, Yu Wang *et al.*, *Adv. Func. Materials*, **19**, 3077 (2009).
- [8] Z. Sun, T. Hasan, F. Torrisi, D. Popa *et al.*, *ACS Nano*, **4**, 803 (2010).
- [9] M.G. Rybin, A.S. Pozharov and E.D. Obratsova, *Phys. Stat. Solidi C*, **7**, 2785 (2010).
- [10] P.A. Obratsova, M.G. Rybin, A.V. Turnina *et al.*, *NanoLetters*, **11**, 1540. S 2004 (2011).
- [11] B. Denker, B. Galagan, V. Koltashev, V. Plotnichenko, G. Snopatin, M. Sukhanov, S. Sverchkov, A. Velmuzhov. *Optics and Laser Technology* **154**, 108355 (2022).
- [12] D.V. Rybkovskiy, A. Impellizzeri, E.D. Obratsova, C.P., *Carbon* **142**, 123–130 (2019).

- [13] A.A. Tonkikh, D.V. Rybkovskiy, A.S. Orekhov, A.I. Chernov, A.A. Khomich, C.P. Ewels, E.I. Kauppinen, S.D. Rochal, A.L. Chuvilin, E.D. Obraztsova *Carbon* **109**, 87–97 (2016).
- [14] V.I. Tsebro, A.A. Tonkikh, D.V. Rybkovskiy, E.A. Obraztsova, E.I. Kauppinen, E.D. Obraztsova, *Phys. Rev. B* **94**, 245438 (1–10) (2016).
- [15] P.V. Fedotov, V.A. Eremina, A.A. Tonkikh, A.I. Chernov, E.D. Obraztsova, *Phys. Status Solidi B* **253**, 2400–2405 (2016).
- [16] A.A. Tonkikh, V.I. Tsebro, E.A. Obraztsova, D.V. Rybkovskiy, A.S. Orekhov, I.I. Kondrashov, E.I. Kauppinen, A.L. Chuvilin, E.D. Obraztsova, *Nanoscale* **11**, 6755–6765 (2019).
- [17] P.V. Fedotov, D.V. Rybkovskiy, A.I. Chernov, E.A. Obraztsova, E.D. Obraztsova, *J. Phys. Chem. C* **124** (47), 25984–25991 (2020).
- [18] P.V. Fedotov, E.D. Obraztsova, *Appl. Phys. Lett.* **122**, 013101 (1–6) (2023).
- [19] P.V. Fedotov, D.V. Rybkovskiy, I.V. Novikov, E.D. Obraztsova, *Phys. Stat. Solidi B* **259** (4), 2100501 (2022).
- [20] Jia-Shiang Chen, Anushka Dasgupta, Darien J. Morrow, Ruggero Emmanuele, Tobin J. Marks, Mark C. Hersam, and Xuedan Ma *ACS Nano*, **16**, 16776–16783 2022.
- [21] D. Kurniawan, W.-H. Chiang, *Carbon* **167**, 675–684 (2020).
- [22] D. Kurniawan, M.R. Rahardja, P.V. Fedotov, E.D. Obraztsova, K. Ostrikov, W.-H. Chiang, *Chem. Eng. Journ.*, **451**, 139083 (1–12) (2023).
- [23] Yan-Yi Chen, Darwin Kurniawan, Seyyed Mojtaba Mousavi, Pavel V. Fedotov, Elena D. Obraztsova, Wei-Hung Chiang, *Journ. of Materials Chemistry*, **10**, 9654–966 (2022).

## **Ближнепольная спектроскопия графеноподобных материалов**

А.Г. Милёхин

Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия

Методы ближнепольной оптической спектроскопии, или наноскопии, включая плазмон-усиленные комбинационное рассеяние света (нано-КРС) и фотoluminesценцию (нано-ФЛ) основаны на усилении оптического сигнала от наноструктур, находящихся в ближнем поле локализованного поверхностного плазмона металлического зонда атомно-силового микроскопа.

В докладе будут представлены основные достижения методов нано-КРС и нано-ФЛ для изучения фононного и электронного спектров графеноподобных

материалов с пространственным разрешением много меньше дифракционного предела.

Демонстрируются возможности методов наноскопии для изучения локальных свойств ряда графеноподобных материалов и структур на их основе. Обсуждаются результаты исследования нано-КРС и нано-ФЛ пленок мультиграфена [1], графена [2] и двумерных островков дихалькогенидов металлов ( $\text{MoS}_2$  и  $\text{WS}_2$ ) [3]. При этом пленки графена, мультиграфена и монослои  $\text{MoS}_2$ , помещенные на плазмонную подложку, позволяют реализовать режим “щелевого” плазмона (от англ. gap-mode TERS, tip-enhanced Raman scattering) и значительное увеличение оптического отклика до  $10^8$  раз. На основе анализа спектров нано-КРС могут быть определены не только размеры и форма наноструктур, но и структурные дефекты, и возникающие в них локальные механические напряжения.

Нано-ФЛ от монослойных островков  $\text{MoS}_2$  и  $\text{WS}_2$ , выращенных на кремниевой подложке, демонстрируют локальное изменение энергии и интенсивности экситонной ФЛ в зависимости от числа монослоев и наличия структурных дефектов.

Обсуждаются перспективы использования методов наноскопии для изучения отдельных полупроводниковых наноструктур.

Исследование поддержано Российским научным фондом (грант № 22-12-00302).

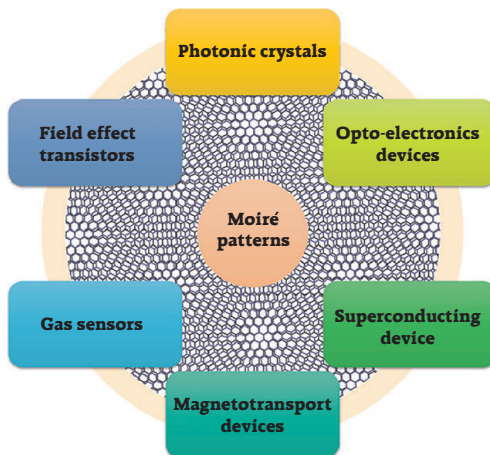
## Литература

- [1] N.N. Kurus, I.A. Milekhin, N.A. Nebogatikova, I.V. Antonova, E.E. Rodyakina, A.G. Milekhin, A.V. Latyshev, D.R.T. Zahn, *Journal of Physical Chemistry C*, **127**, 5013–5020 (2023). DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c07972.
- [2] N.N. Kurus, V. Kalinin, N.A. Nebogatikova, I.A. Milekhin, I.V. Antonova, E.E. Rodyakina, A.G. Milekhin, A.V. Latyshev, D.R.T. Zahn, *RCS Advances*, (2024) in print.
- [3] И.А. Милёхин, Н.Н. Курусь, Л.С. Басалаева, А.Г. Милёхин, Э.О. Чиглинцев, А.И. Чернов, А.В. Латышев, *Сибирский физический журнал* **18**, № 4, (2023), в печати.

# Твистроника на графеновых слоях — атомные структуры и свойства: теория, эксперименты, приложения

Л.А. Чернозатонский

Институт биохимической физики РАН, Москва, Россия



**Рис. 1.** Приложения материалов из свернутых гексагональных слоев.

Наблюдение муаровых узоров в уложенных слоях графена привело к появлению и быстрому прогрессу в исследованиях целой области графена и других двумерных слоев, названной — ТВИСТРОНИКА (TWISTRONICS) [1]. Эти муаровые узоры возникают из-за относительной разницы в ориентации механически уложенных слоев графена. С момента своего первого появления муаровые сверхрешетки стали платформой для современных материалов и различных квантовых явлений. Слабые межслоевые силы могут вызвать угловой беспорядок в атомном массиве, что приводит к нетрадиционному укладке слоев. Эта укладка вызывает в скрученном двухслойном графене (t-BLG) зависящих от угла свойств, которые беспрецедентны для самого графена. В этом обзоре рассматриваются последние достижения в области свернутых структур, охватывающие аспекты их электронной структуры, изготовления, углово-зависимых свойств и спектроскопических характеристик.

Будут рассмотрены структуры — сверхрешетки из двух и трех свернутых (twisted) графеновых слоев (полупроводники с плоскими минизонами, сверхпроводники, магнетики, топологические изоляторы, а также муаровые алмазоподобные пленки), — атомные структуры и свойства (теория, эксперименты, приложения) следующих квазидвумерных пленок:

Ia. Графеновые муаровые структуры с малыми около  $1^\circ$  магическими углами свертки около двухслойного и многослойного графена [1–5].

Ib. Сверхрешетки с большими, близкими к  $30^\circ$  углами свертки графеновых слоев [1,6–9].

II. Муаровые диаманты-алмазоподобные из  $sp^3$ -гибридизированных атомов — гидрированные или фторированные муаровые графеновые бислои [10–14].

III. Квазикристаллы на основе свернутых двух или трех графеновых и hBN слоев [14].

Успех графена заставил ученых обратить внимание и на аналогичные свойства плоских поверхностей из других элементов. Поэтому в заключении будут кратко отражены последние достижения твистроники на основе других гексагональных слоев (нитриды [17,18] и дихалькогениды переходных металлов [19]).

Исследование выполнено в рамках гранта Российского научного фонда №24-22-0044.

## Литература

- [1] K. Saumya, S. Naskar and T. Mukhopadhyay. *Magic' of twisted multi-layered graphene and 2D nano-heterostructures* Nano Futures **7**, 032005 (2023) DOI 10.1088/2399-1984/acf0a9.
- [2] Y. Cao, *et al.* *Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices*. Nature **556**, 43–50 (2018).
- [3] H. Kim, *et al.* *Evidence for unconventional superconductivity in twisted trilayer graphene*. Nature **606**, 494–500 (2022).
- [4] I.M. Craig, *et al.* *Local atomic stacking and symmetry in twisted graphene trilayers*. Nature Materials (2024) <https://doi.org/10.1038/s41563-023-01783-y>.
- [5] Z. Song, *et al.* *All magic angles in twisted bilayer graphene are topological*. Phys. Rev. Lett. **123**, 036401 (2019).
- [6] C.N. Lau, M.W. Bockrath, K.F. Mak, & F. Zhang. *Reproducibility in the fabrication and physics of moiré materials*. Nature **602**, 41–50 (2022).
- [7] Y.-B. Liu, *et al.* *Tuning commensurability in twisted van der Waals bilayers*. Nature **625**, 494–499 (2024). <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06904-w>.
- [8] Y.-B. Liu, *et al.* *High-angular-momentum topological superconductivities in twisted bilayer quasicrystal systems*. Phys. Rev. B **107**, 014501 (2023).

- [9] F. Eriksson, *et al.* *Tuning the Through-Plane Lattice Thermal Conductivity in van der Waals Structures through Rotational (Dis)ordering*. ACS Nano **17**, 24, 25565–25574 (2023).
- [10] L.A. Chernozatonskii, V.A. Demin, D.G. Kvashnin. *Fully Hydrogenated and Fluorinated Bigraphenes-Diamanes: Theoretical and Experimental Studies*. C — Journal of Carbon Research, **7**, 17 (2021).
- [11] F.R.M. Lavini, E. Riedo. *Two-dimensional diamonds from  $sp^2$ -to- $sp^3$  phase transitions*. Nat. Rev. Mater. 1–19 (2022).
- [12] L.A. Chernozatonskii, V.A. Demin, D.G. Kvashnin. *Ultrawide-bandgap Moiré diamanes based on bigraphenes with the twist angles  $\Theta \sim 30^\circ$* . Applied Physics Letters **117** 253104 (2020).
- [13] S. Chowdhury *et al.* *Ultra-Low Thermal Conductivity of Moiré*. Diamanes Membranes, **12**, 925 (2022). <https://doi.org/10.3390/membranes12100925>.
- [14] V.A. Demin, L.A. Chernozatonskii. *Diamane-like Films Based on Twisted G/BN Bilayers: DFT Modelling of Atomic Structures and Electronic Properties*. Nanomaterials **13**, 841 (2023).
- [15] C.Y. Hao, *et al.* *Robust flat bands in twisted trilayer graphene quasicrystals*, arXiv:2401.090102024.
- [16] L.A. Chernozatonskii, *et al.* *Diamane quasicrystals*, App. Surface Sci. **572**, 151362 (1922).
- [17] N.R. Walet and F. Guinea. *Flat bands, strains, and charge distribution in twisted bilayer h-BN* Phys. Rev. B **103**, 125427 (2021).
- [18] L.A. Chernozatonskii, *et al.* *Moiré M-Nitridanes (M = Al, B, Ga) Analogues of Carbon Diamanes*. ACS Applied Electronic Materials **5** 5677–5686 (2023).
- [19] N. Gupta, *et al.* *Twistronics in two-dimensional transition metal dichalcogenide (TMD)-based van der Waals interface*. RSC Adv., **14**, 2878–2888 (2024).

## Электронные и оптические свойства частично фторированного графена и графита

А.В. Окотруб, Л.Г. Булушева

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия

Частично фторированный графен может быть получен при фторировании графита в парах  $\text{BrF}_3$  при комнатной температуре. Нам удалось получить серию фторидов графита и графена  $\text{C}_2\text{F}_x$  ( $0 < x < 1$ ). В соединениях  $\text{C}_2\text{F}$  атомы фтора образуют ковалентные связи с половиной атомов углерода графенового слоя, а нефторированный углерод представлен сопряженными уг-



леродными цепочками [1]. При понижении содержания фтора образуются области сопряженных гексагонов, размер которых зависит от степени фторирования [2]. Изменения электронной структуры  $C_2F_x$  проводилось методами РФЭС, NEXAFS, рамановской и оптической спектроскопии. Оптические спектры поглощения и люминесценции зависят от размера сопряженных областей, разделенных фторуглеродными цепочками [3]. Нами проведено измерение электропроводимости полученных материалов и определено содержание фтора для перкаляционного перехода [4]. Фторированный графит легко эксфалируется в органических растворителях, что позволяет получать пленки фторированного графена. Проведено восстановление поверхностного слоя пленки путем химического воздействия, облучения электронами и УФ излучения. Рассмотрена возможность использования пленок восстановленного фторированного графена для регистрации молекул  $NH_3$  и  $NO_2$  [5]. Пленки фторированного графена толщиной 1–5 мкм являются перспективной платформой для создания элементов гибкой углеродной электроники. Обработка поверхности пленки сфокусированным УФ-излучением приводит к локальному восстановлению фторированного графена. В зависимости от условий облучения можно варьировать степень функционализации получаемого графенового материала. Электропроводящие слои могут использоваться в качестве электродов плоскостных микросуперконденсаторов с емкостью, достигающей  $1,5 \text{ мФ/см}^2$  [6]. Создание гибкой периодической структуры позволило получить метаповерхность с контролируемыми отражательными параметрами в ТГц области [7].

## Литература

- [1] A.V. Okotrub, N.F. Yudanov, I.P. Asanov, *et al.* *Anisotropy of Chemical Bonding in Semifluorinated Graphite C<sub>2</sub>F Revealed with Angle-Resolved X-ray Absorption Spectroscopy*. ACS Nano, **7**, 65–74 (2013).
- [2] R.D. Yamaletdinov, Y.A. Nikiforov, L.G. Bulusheva, A.V. Okotrub, *Fluorine patterning of graphene: Effects of fluorine content and temperature*. Nanoscale, **13**, 1206–212 (2021).
- [3] A.V. Okotrub, G.N. Chekhova, D.V. Pinakov, I.V. Yushina, L.G. Bulusheva. *Optical absorption and photoluminescence of partially fluorinated graphite crystallites* Carbon, **193**, 98–106 (2022).
- [4] M. Kolesnik-Gray, V.I. Sysoev, S. Gollwitzer, D.V. Pinakov, G.N. Chekhova, L.G. Bulusheva, A.V. Okotrub, V. Krstic. *Electrical transport in devices based on edge-fluorinated graphene*. Adv. Electron. Mater., **4**, 1800073 (2018).
- [5] V.I. Sysoev, A.V. Gusef'nikov, M.V. Katkov, I.P. Asanov, L.G. Bulusheva, A.V. Okotrub. *Sensor properties of electron beam irradiated fluorinated graphite* J. Nanophotonics, **10**, 012512 (2016).

- [6] V.I. Sysoev, D.V. Gorodetskiy, K.M. Popov, A.A. Makarova, L.G. Bulusheva, A.V. Okotrub. *Fabrication of high-rate microsupercapacitors by ultraviolet laser-assisted scribing of fluorinated graphene films*. J. Power Sources, **557**, 232549–232549 (2023).
- [7] N.I. Valynets, A.G. Paddubskaya, V.I.Sysoev, D.V. Gorodetskiy, L.G. Bulusheva, A.V. Okotrub. *Fluorinated graphene grating metasurface for terahertz dark state excitation*. Nanotechnology, **34**, 185702 (2023).

## **Элементы приборных структур из углерода: молекулярные аспекты**

Н.А. Поклонский

Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь

В лекции дается мини-обзор актуальных для практики исследований электрических, оптических и магнитных явлений в трехмерных, двумерных, одномерных и нульмерных системах и элементах приборных структур из углерода. Объекты исследований — одиночные и консолидированные углеродные системы различной размерности в их физико-математическом, химическом и биомедицинском аспектах. Предметы исследований — квантовые состояния и процессы в таких разноразмерных системах. Вначале излагаются результаты исследований для трехмерных, а затем для двумерных, одномерных и нульмерных систем. Обозначены схемы разработки новых функциональных элементов и устройств из углеродных систем. Некоторые практические реализации приборных структур из таких систем приведены в обзорах [1–3].

### **Трехмерные системы.**

Экспериментально открыто явление поглощения микроволнового электромагнитного излучения левитирующими в вакууме над поверхностью природного образца алмаза фотоэлектронами, возникающими при его межзонном фотовозбуждении [4]. Это явление обусловлено появлением положительного трибологического заряда [5] на поверхности алмаза вследствие влажной шлифовки его корундовым порошком с последующими промывкой в дистиллированной воде и сушкой на воздухе. Методом вибрационной магнитометрии при температуре  $T < 150$  К выявлено [6] магнитное упорядочение нескомпенсированных электронных спинов радиационных дефектов в облученных быстрыми реакторными нейтронами кристаллических зернах природного алмаза. Методом электронного спинового резонанса при лабораторных услови-

ях обнаружено состояние спинового стекла радиационных дефектов [7] в пластинках поликристаллического CVD-алмаза (выращенных по технологии [8]). Созданы алмазные  $p-i-n$ -светодиоды [9], испускающие одиночные фотоны в видимой области спектра электромагнитных волн при  $T \approx 300$  К. Разработаны полевой транзистор на электропроводящей гидрированной поверхности (110) природного алмаза [10] и ультрафиолетовые солнечно-слепые электронно-оптические преобразователи с фотокатодами из легированных бором поликристаллических алмазных пленок на сапфире [11]. Изготовлены [12] тонкие электроды на основе легированных бором кристаллов синтетического алмаза (адаптированные для регистрации нейрхимических процессов в человеческом мозгу [13]).

### **Двумерные системы.**

Выдвинута концепция электромеханического нанодинамометра на основе бислоя (двух монослоев) графена с электрической проводимостью между слоями [14] и проведен расчет его параметров (методом туннельного гамильтониана Бардина [15]). Рассчитаны поверхности потенциальной энергии межслоевого взаимодействия ряда структур муара из бислоев графена [16]. Даны оценки энергетического барьера относительного сдвига и поворота монослоев (листов) графена из соизмеримого в полностью несоизмеримое состояние. Показано, что полученная величина барьера допускает сверхскользкость (см., например, [17]) бислоев графена при лабораторных условиях. Методами квантовой термодимии рассчитана схема получения радикалов  $\text{OH}^-$  и молекул водорода из потока паров воды между двумя изогнутыми в одном направлении листами графена [18]. Предложена [19] схема получения отрицательно заряженных молекул из потока электрически нейтральных молекул между двумя изогнутыми в противоположных направлениях листами графена. Методами теоретической электромеханики показана возможность скручивания листа графена в устойчивый рулон в виде спирали Архимеда [20]. Выполнен аналитический расчет квантовой электрической емкости двух плоских листов графена, разделенных монослоем из атомов аргона [21]. Расчетным путем показано [22], что чередующиеся слои параллельно расположенных рулонов из бислоев графен/нитрид бора и одностенных углеродных нанотрубок (угол между направлениями вдоль рулонов и нанотрубок в слоях равен  $\pi/2$ ) образуют метаматериал с отрицательным показателем преломления в инфракрасном диапазоне длин волн. Предложена [23] новая электромеханическая ячейка архивной памяти на основе тонкой мембраны (из нескольких монослоев графена), взаимодействующей кулоновскими силами и силами Ван-дер-Ваальса (см. эссе [24]) с торцевой поверхностью цилиндрического электрода, и проведен расчет ее рабочих характеристик. Квантовохимическими расчетами показано,

что поверхность потенциальной энергии межслоевого молекулярного взаимодействия в различных двумерных графеноподобных материалах универсально описывается первыми пространственными гармониками двумерного ряда Фурье (в параллельной слоям плоскости) [25]. Методом молекулярных орбиталей проведены расчеты [26] нанополоски графена типа *zigzag* 10zGNR (с числом *zigzag* цепочек 10) и установлено, что для такой полоски антиферромагнитное состояние является полупроводниковым (с энергетической щелью в спектре значений энергии  $\pi$ -электронов), а ферромагнитное состояние — полуметаллическим (*half-metal*; т.е. электропроводящим только для одной ориентации спиновых магнитных моментов  $\pi$ -электронов нанополосок). Это свойство углеродной *zigzag* полоски может быть применено для целей двумерной спинтроники [27]. В работе [28] дан расчет параметров  $\delta$ -легированных акцепторной примесью (бором) слоев в алмазе, необходимых для создания высокочастотных полевых транзисторов.

### **Одномерные системы.**

Теоретически показано [29], что электрическое сопротивление наполненной атомами калия одностенной углеродной нанотрубки (квантовой проволоки) ступенчатым образом увеличивается при увеличении ее диаметра. Используя потенциалы Лиенара–Вихерта, предсказано возникновение релятивистского электрического поля вблизи прямой квантовой проволоки со стационарным баллистическим переносом в ней электронов [30]. Предложен и методами квантовой магнитомеханики рассчитан геркон на основе наполненных магнитными эндофуллереами двух углеродных нанотрубок [31]. Предсказан фазовый переход «узкозонный полупроводник–металл» при аксиальном упругом растяжении одностенных углеродных нанотрубок [32], на основании которого могут быть разработаны новые элементы стрейнтроники [33].

### **Нульмерные системы.**

Квантовохимическими расчетами предсказана углеродная молекула  $C_{10}$  в форме плоской пятилучевой звезды — прекурсор формирования низкоразмерных систем в углеродной плазме [34]. Теоретически показано [31], что эндофуллерен  $Fe@C_{20}$  обладает нескомпенсированным магнитным моментом электронов ( $\approx 8\mu_B$ , где  $\mu_B$  — магнетон Бора). При этом учтено, что электронный терм  $^5D_4$  свободного атома Fe в основном состоянии под действием возмущения с икосаэдрической симметрией карбододекаэдра  $C_{20}$  не расщепляется [35]. Предложены аналитический и численный алгоритмы решения загадки формирования полых макромолекул из атомов углерода [36]. Методом функционала плотности рассчитаны атомная и электронная структуры углеродных нанобраслетов — макромолекул, проявляющих свойства нульмерных, одномерных и двумерных систем [37].

Работа выполнена в рамках гранта № Ф23РНФ-049 Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований.

## Литература

- [1] В.В. Климов, *УФН*, **191**, 1044–1076 (2021).
- [2] D. Araujo, M. Suzuki, F. Lloret, G. Alba, P. Villar, *Materials*, **14**, 7081 (2021).
- [3] H. Fei, D. Sang, L. Zou, S. Ge, Y. Yao, J. Fan, C. Wang, Q. Wang, *Front. Phys.*, **11**, 1226374 (2023).
- [4] А.Г. Захаров, Н.А. Поклонский, В.С. Вариченко, *ЖТФ*, **79**, 95–101 (2000).
- [5] Е.В. Рябов, Ю.С. Мухачев, *Письма в ЖТФ*, **36**, 32–40 (2010).
- [6] N.A. Poklonski, A.A. Khomich, I.A. Svito, S.A. Vyrko, O.N. Poklonskaya, A.I. Kovalev, M.V. Kozlova, R.A. Khmel'nitskii, A.V. Khomich, *Appl. Sci.*, **13**, 6221 (2023).
- [7] О.Н. Поклонская, *Вестн. БГУ. Сер. 1: Физ. Мат. Информ.*, № 2, 60–65 (2013).
- [8] В.Г. Ральченко, В.И. Конов, *Электроника: Наука, технология, бизнес*, № 4, 58–67 (2007).
- [9] A. Lohrmann, S. Pezzagna, I. Dobrinets, P. Spinicelli, V. Jacques, J.-F. Roch, J. Meijer, A.M. Zaitsev, *Appl. Phys. Lett.*, **99**, 251106 (2011).
- [10] Ю.В. Гуляев, А.Ю. Митягин, Г.В. Чучева, М.С. Афанасьев, К.Н. Зяблук, Н.Х. Талипов, П.Г. Недосекин, А.Э. Набиев, *Радиотехника и электроника*, **59**, 304–310 (2014).
- [11] В.А. Беспалов, Э.А. Ильичёв, И.П. Казаков, Г.А. Кирпиленко, А.И. Козлитин, П.В. Минаков, В.В. Сарайкин, А.В. Клековкин, С.В. Куклев, Г.Н. Петрухин, Г.С. Рычков, Д.С. Соколов, Е.Г. Теверовская, *Письма в ЖТФ*, **47**, 3–6 (2021).
- [12] K.E. Bennet, J.R. Tomshine, H.-K. Min, F.S. Manciu, M.P. Marsh, S.B. Paek, M.L. Settell, E.N. Nicolai, C.D. Blaha, A.Z. Kouzani, S.-Y. Chang, K.H. Lee, *Front. Hum. Neurosci.*, **10**, 102 (2016).
- [13] Г.Р. Иваницкий, А.А. Морозов, *УФН*, **190**, 1165–1188 (2020).
- [14] N.A. Poklonski, A.I. Siahlo, S.A. Vyrko, A.M. Popov, Yu.E. Lozovik, I.V. Lebedeva, A.A. Knizhnik, *J. Comput. Theor. Nanosci.*, **10**, 141–146 (2013).
- [15] J. Bardeen, *Phys. Rev. Lett.*, **6**, 57–59 (1961).
- [16] A.S. Minkin, I.V. Lebedeva, A.M. Popov, S.A. Vyrko, N.A. Poklonski, Yu.E. Lozovik, *Phys. Rev. B*, **108**, 085411 (2023).
- [17] N.V. Brilliantov, A.A. Tsukanov, A.K. Grebenko, A.G. Nasibulin, I.A. Ostanin, *Phys. Rev. Lett.*, **131**, 266201 (2023).
- [18] N.A. Poklonski, S.V. Ratkevich, S.A. Vyrko, A.T. Vlassov, N.N. Hieu, *Int. J. Nanosci.*, **18**, 1940008 (2019).
- [19] N.A. Poklonski, S.V. Ratkevich, S.A. Vyrko, A.T. Vlassov, *Journal of the Belarusian State University. Physics*, № 3, 57–64 (2023).
- [20] A.I. Siahlo, N.A. Poklonski, A.V. Lebedev, I.V. Lebedeva, A.M. Popov, S.A. Vyrko, A.A. Knizhnik, Yu.E. Lozovik, *Phys. Rev. Mater.*, **2**, 036001 (2018).
- [21] I.V. Lebedeva, A.M. Popov, A.A. Knizhnik, Yu.E. Lozovik, N.A. Poklonski, A.I. Siahlo, S.A. Vyrko, S.V. Ratkevich, *Comput. Mater. Sci.*, **109**, 240–247 (2015).

- [22] A.I. Siahlo, N.A. Poklonski, S.A. Vyrko, S.V. Ratkevich, *Semiconductors*, **52**, 1886–1889 (2018).
- [23] A.I. Siahlo, A.M. Popov, N.A. Poklonski, Yu.E. Lozovik, S.A. Vyrko, S.V. Ratkevich, *Physica E*, **84**, 348–353 (2016).
- [24] Е.И. Кац, *УФН*, **185**, 964–969 (2015).
- [25] A.V. Lebedev, I.V. Lebedeva, A.M. Popov, A.A. Knizhnik, N.A. Poklonski, S.A. Vyrko, *Phys. Rev. B*, **102**, 045418 (2020).
- [26] N.A. Poklonski, E.F. Kislyakov, S.A. Vyrko, O.N. Bubel', S.V. Ratkevich, *J. Nanophotonics*, **6**, 061712 (2012).
- [27] П.В. Ратников, А.П. Силян, *УФН*, **188**, 1249–1287 (2018).
- [28] В.А. Кукушкин, *ФТП*, **56**, 966–972 (2022).
- [29] Н.А. Поклонский, Е.Ф. Кисляков, Г.Г. Федорук, С.А. Вырко, *ФТТ*, **42**, 1911–1916 (2000).
- [30] N.A. Poklonski, I.A. Halimski, S.A. Vyrko, A.T. Vlassov, N.N. Hieu, *Journal of the Belarusian State University. Physics*, № 1, 20–25 (2021).
- [31] N.A. Poklonski, E.F. Kislyakov, S.A. Vyrko, N.N. Hieu, O.N. Bubel', A.I. Siahlo, I.V. Lebedeva, A.A. Knizhnik, A.M. Popov, Yu.E. Lozovik, *J. Nanophotonics*, **4**, 041675 (2010).
- [32] N.A. Poklonski, S.V. Ratkevich, S.A. Vyrko, E.F. Kislyakov, O.N. Bubel', A.M. Popov, Yu.E. Lozovik, N.N. Hieu, N.A. Viet, *Chem. Phys. Lett.*, **545**, 71–77 (2012).
- [33] А.А. Бухарасв, А.К. Звездин, А.П. Пятаков, Ю.К. Фетисов, *УФН*, **188**, 1288–1330 (2018).
- [34] N.A. Poklonski, S.A. Vyrko, A.I. Siahlo, O.N. Poklonskaya, S.V. Ratkevich, N.N. Hieu, A.A. Kocherzhenko, *Mater. Res. Express.*, **6**, 042002 (2019).
- [35] Н.А. Поклонский, А.Т. Власов, С.А. Вырко, *Конечные группы симметрии. Основы и приложения* (БелЭн, 2011, Минск) 464 с.
- [36] A.M. Popov, I.V. Lebedeva, S.A. Vyrko, N.A. Poklonski, *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, **29**, 755–766 (2021).
- [37] S.A. Vyrko, Yu.G. Polynskaya, N.A. Matsokin, A.M. Popov, A.A. Knizhnik, N.A. Poklonski, Yu.E. Lozovik, *Chem. Phys. Lett.*, **835**, 140999 (2024).

## Дробовой шум в резонансных туннельных структурах

И.В. Крайнов

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

В данном докладе рассматривается шум тока в низкоразмерных системах, который позволяет получить дополнительную информацию о свойствах состояний электронов проводимости, не содержащуюся в среднем токе. Доклад

будет состоять из 4 частей: введения, дробовый шум в резонансных туннельных структурах, дробовый шум в интерферометре Ааронова–Бома, влияние шума тока в дефектах около края 2D топологического изолятора на транспорт краевых состояний. Ниже приведена их краткая аннотация:

*Дробовый шум в резонансных туннельных структурах.* Нарушение когерентности фаз электронных волн из-за неупругих процессов рассеяния играют ключевую роль в низкоразмерном транспорте: при уменьшении интенсивности данных столкновений система переходит из классического режима транспорта в квантовый, когда интерференционные эффекты становятся определяющими. Одним из самых простых и важных для практических применений эффектов является резонансное туннелирование через квантовую точку (КТ) с туннельными контактами, демонстрирующее узкие пики в проводимости при пересечении уровнем Ферми уровня размерного квантования состояний в КТ и низких температурах. В докладе рассмотрено влияние неупругих процессов рассеяния на фактор Фано — величины характеризующей шум тока в одномерном транспорте. Шум тока состоит из двух вкладов: теплового, пропорционального температуре, и дробового, наблюдающегося в нелинейном режиме, когда приложенное напряжение превышает температуру. Для одномерной системы с двумя барьерами, демонстрирующей резонансное туннелирование, фактор Фано в нелинейном режиме равен:  $F = (\Gamma_L^2 + \Gamma_R^2) / (\Gamma_L + \Gamma_R)^2$ , где  $\Gamma_L$  и  $\Gamma_R$  — силы барьеров. До настоящего момента нет точного ответа на вопрос о влиянии темпа сбоя фазы на фактор Фано двухбарьерной структуры. Этот вопрос широко обсуждался в литературе и исследовался разными методами, например при помощи кинетических уравнений [1,2] (т.е. полностью некогерентный транспорт), сил Ланжевена [3], и приводил к указанному выше выражению. В случае картины квантового транспорта, и расчета с использованием квантового кинетического уравнения или неравновесных функций Грина получается тот же результат [4,5]. Так же, имеется ряд работ, демонстрирующих отклонения от данного результата [6,7]. Однако, во всех работах, использовались те или иные приближения и упрощения. Для однозначного ответа на данный вопрос необходимо точно учесть неупругие процессы в квантовой интерференционной картине электронного транспорта [8]. О чем пойдет речь в данном докладе.

*Дробовый шум в интерферометре Ааронова–Бома.* Другой низкоразмерной системой в которой важны интерференционные эффекты в транспорте является интерферометр Ааронова–Бома. Важным отличием от двухбарьерной структуры является наличие двух путей, что приводит к наличию интерференции даже в высокотемпературном случае, когда температура превосходит расстояние между уровнями квантования в интерферометре. В докладе бу-

дет рассмотрен дробовый шум в таком интерферометре, для случая обычного материала и сделанного из края топологического изолятора. Так же будет рассмотрено влияние магнитного дефекта на шум тока.

*Влияние шума тока в дефектах около края 2D топологического изолятора на транспорт краевых состояний.* Хорошо известно, что на краю 2D топологического изолятора (ТИ) существуют киральные 1D состояния, причем электроны в этих состояниях двигаются в противоположных направлениях и имеют противоположные направления спина. Транспорт через такие состояния хорошо исследован экспериментально. Экспериментально установлено (см. [9] и ссылки там), что в коротких образцах, с длиной до 3-х мкм, состояния хорошо защищены топологически. В то же время, в образцах длиной более 3 мкм наблюдается рассеяние назад, вплоть до низких температур, порядка сотен мили кельвин, причём темп этого рассеяния слабо зависит от температуры. Принципиально важно, что разрушение топологической защиты, наблюдается в нулевом магнитном поле и в отсутствие магнитных примесей. Известные теоретические механизмы немагнитного рассеяния назад в краевом состоянии предполагают обязательное наличие неупругих процессов либо в заряженном островке рядом с краевым состоянием [10], в который электрон мажет выскочить и через некоторое время вернуться обратно, либо непосредственно в топологическом 1D канале [11]. Однако, темп неупругого рассеяния и, как следствие, темп рассеяния назад по механизмам [10,11], должен быстро падать с уменьшением температуры, что противоречит экспериментальным данным.

В докладе рассмотрен, предлагаемый, новый механизм рассеяния назад между двумя киральными состояниями, связанный с наличием островков, которые могут захватывать электрон. Также как в механизме [10], опирающемся на наличие таких островков, принципиальную роль играет электрон-электронное взаимодействие. Однако, в отличие от [10], неупругие процессы не вовлекаются и, соответственно, нет сильного подавления эффекта при уменьшении температуры. Ключевую роль в предлагаемом нами механизме играет наличие циркулярных токов в островке. Важность таких токов можно пояснить на базе самой простой модели островка в виде отверстия в объёме 2D ТИ. В таком островке также существуют “правые” ( $R$ ) и “левые” ( $L$ ) краевые состояния, отвечающие, соответственно, за движение по и против часовой стрелки. За счёт туннельной связи, электрон из края ТИ может перескочить в  $R$  или  $L$  состояние островка, а потом вернуться обратно в край ТИ, причём в отсутствие взаимодействия,  $R$  и  $L$  вклады в амплитуду рассеяния назад точно сокращают друг друга. При наличии взаимодействия, характеризующегося малой константой  $g$  ( $g \ll 1$ ), в островке возникает флуктуирующий



циркулярный ток,  $J = g(NR - NL)$ , где  $NR$  ( $NL$ ) — число правых (левых) электронов в температурной полоске. Эффекты, связанные с флуктуациями  $J$ , обсуждались ранее в работе [12] в контексте токовой блокады квантовых интерферометров. Ток  $J$  приводит к тому, что при обходе островка  $R$  и  $L$  электроны набирают разную фазу. Как следствие, вклады этих процессов в амплитуду рассеяния назад перестают сокращать друг друга и возникает вероятность рассеяния назад, пропорциональная  $(\sin J)^2$ . Хотя тепловое среднее от флуктуационного тока  $J$  равно нулю, среднее от  $(\sin J)^2$  не равно нулю и возникает конечный темп рассеяния назад, обусловленный “выпрямлением” флуктуаций  $J$ . Также рассматриваются другие модели островка.

Работа выполнена при поддержке РФФИ 22-12-00139.

## Литература

- [1] J.H. Davies, P. Hyldgaard, *et al.*, Phys. Rev. B **46**, 9620 (1992).
- [2] L.Y. Chen and C.S. Ting, Phys. Rev. B **46**, 4714 (1992).
- [3] Y. Blanter and M. Büttiker, Physics Reports **336**, 1 (2000).
- [4] H.Bi Sun and G.J. Milburn, Phys. Rev. B **59**, 10748 (1999).
- [5] O.L. Bo and Y. Galperin, Phys. Rev. B **55**, 1696 (1997).
- [6] G. Iannaccone, M. Macucci, and B. Pellegrini, Phys. Rev. B **55**, 4539 (1997).
- [7] J.H. Davies, J.C. Egues, and J.W. Wilkins, Phys. Rev. B **52**, 11259 (1995).
- [8] I.V. Krainov, A.P. Dmitriev and N.S. Averkiev, Phys. Rev. B **106**, 245421 (2022).
- [9] E.B. Olshanetsky, Z.D. Kvon, *et al.*, Physica E, **147**, 115605 (2023).
- [10] J.I. Väyrynen, M. Goldstein *et al.*, Phys. Rev. Lett. **110**, 216402 (2013).
- [11] T.L. Schmidt, S. Rachel *et al.*, Phys. Rev. Lett. **108**, 156402 (2012).
- [12] A.P. Dmitriev, I.V. Gornyi, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **105**, 036402 (2010).

## Сверхтекучесть ядерной материи в наблюдениях остывающих нейтронных звёзд

П.С. Штернин

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Нейтронные звёзды — самые плотные материальные объекты во вселенной, содержащие в своих недрах вещество сверхъядерной плотности. Определение свойств такого вещества представляет собой увлекательную проблему современной физики и астрофизики, поскольку оно недоступно для экспериментов в земных условиях и его непросто изучать теоретически. Как следствие, поведение ядерной материи при высоких плотностях и низких (по меркам ядерной физики) температурах можно изучать только астрофизическими

методами, строя модели для разнообразных наблюдательных проявлений нейтронных звёзд и сравнивая результаты моделирования с наблюдениями.

Одним из предсказаний теории строения нейтронных звёзд является вывод о присутствии в их недрах явления куперовского спаривания нуклонов за счёт притягивательной составляющей ядерного взаимодействия. Это приводит к появлению в недрах нейтронных звезд сверхтекучих (в случае спаривания нейтронов) и сверхпроводящих (в случае спаривания протонов) фаз ядерной жидкости с критическими температурами перехода  $10^8$ – $10^{10}$  К. Астрономические следствия (т.е. то, что доступно наблюдениям) феномена сверхтекучести в нейтронных звёздах довольно разнообразны и вряд ли могут быть описаны в рамках одного выступления. Здесь мы рассмотрим влияние сверхтекучести на процессы остывания нейтронных звёзд и обсудим какие ограничения на параметры сверхтекучих фаз можно (и можно ли) получить из имеющихся на сегодняшний день данных наблюдений тепловых состояний нейтронных звёзд.

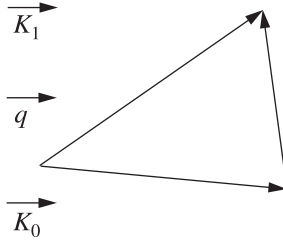
## **Метод малоуглового рассеяния нейтронов для исследования наноматериалов**

Ю.В. Кульвелис

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова,  
НИЦ “Курчатовский институт”, Гатчина, Россия

В экспериментах по малоугловому рассеянию обычно используются тепловые и холодные нейтроны, длина волны которых находится в диапазоне 2–20 Å. Нейтронная волна, длина которой сравнима с межатомными расстояниями в твердом теле (жидкости) или даже превышает это расстояние, вступает во взаимодействие не с одним атомом, а с коллективом атомов. Это обстоятельство позволяет рассматривать рассеяние медленных нейтронов, используя общие оптические понятия когерентного и некогерентного рассеяния, применяемые к рассеянию волн любой природы. Атомы ансамбля могут участвовать в рассеянии волн двояким образом: либо как единый коллектив, либо как набор отдельных независимых рассеивающих центров. Этот факт выражается в разбиении сечения рассеяния  $\sigma$  на два слагаемых — когерентное ( $\sigma_c$ ) и некогерентное ( $\sigma_i$ ):  $\sigma = \sigma_c + \sigma_i$ .

Рассмотрим случай квазиупругого рассеяния. Пусть падающие на образец нейтроны рассеиваются под некоторым углом  $\Theta$  таким образом, что измене-



нием энергии нейтронов, происходящим в процессе рассеяния, можно пренебречь, то есть,  $E_0 \approx E_1$ , где  $E_0$  и  $E_1$  — энергии падающей и рассеянной волн, соответственно. Процесс рассеяния в этом случае иллюстрируется диаграммой:

$\mathbf{K}_0$  и  $\mathbf{K}_1$  — волновые векторы падающей и рассеянной волн, причем  $|\mathbf{K}_0| = |\mathbf{K}_1| = 2\pi/\lambda$ , где  $\lambda$  — длина волны нейтронов,  $\mathbf{q}$  — результирующий вектор:

$$\mathbf{q} = \mathbf{K}_1 - \mathbf{K}_0 \quad (1)$$

Длина вектора  $\mathbf{q}$  (вектор рассеяния), определяется из приведенной диаграммы простым соотношением:

$$q = \frac{4\pi \sin(\Theta/2)}{\lambda},$$

где  $\Theta$  — угол рассеяния. Если умножить обе части уравнения (1) на приведенную константу Планка  $\hbar$ , то можно записать:  $\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0$ , где  $\mathbf{p}_1$  и  $\mathbf{p}_0$  — импульсы рассеянного и падающего на образец нейтрона, соответственно. Таким образом, в результате упругого рассеяния происходит изменение импульса при постоянной энергии излучения, другими словами, измеряемой величиной является переданный импульс  $\hbar\mathbf{q}$ , а точнее, длина вектора рассеяния  $|\mathbf{q}|$ . В эксперименте обычно измеряется зависимость интенсивности или сечения рассеяния от угла, пропорционального переданному импульсу [1].

Можно указать две причины появления некогерентной составляющей сечения рассеяния. Первая причина связана с хаотическим распределением изотопов одного и того же элемента с разными ядерными амплитудами рассеяния (изотопическая некогерентность), вторая — с взаимной ориентацией спинов нейтрона и ядра, которая в большинстве случаев носит случайный характер. Спиновая некогерентность, дающая обычно основной вклад в некогерентное рассеяние, присуща ядрам, имеющим отличный от нуля спин. Ядра с нулевым спином, такие как  $^{12}\text{C}$ ,  $^{16}\text{O}$ , не дают некогерентной составляющей рассеяния, которая велика для водорода. Некогерентное рассеяние изотропно и не несет

структурной информации об объекте, однако, его вклад необходимо учитывать при планировании нейтронного эксперимента, так как оно создает фон, вносящий существенный вклад в ошибку измерения.

Для характеристики рассеивающей способности ядер различных химических элементов в нейтронной оптике пользуются понятием когерентной  $b_c$  и некогерентной  $b_i$  амплитуд рассеяния. В случае, когда поглощением можно пренебречь, полное интегральное сечение определяется через  $b_c$  и  $b_i$  с помощью простого соотношения:  $\sigma = 4\pi(b_c^2 + b_i^2)$ . Интенсивность когерентного рассеяния зависит от угла, и выделение когерентной составляющей как раз и является задачей малоуглового нейтронного анализа. Для дифференциального сечения когерентного рассеяния (в единицу телесного угла  $\Omega$ ) можно записать:

$$\frac{d\sigma_c}{d\Omega} = \sum_{i,j} b_i b_j \exp[i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)],$$

где суммирование проводится по всем парам атомов с амплитудами  $b_{i,j}$ , и положениями  $\mathbf{r}_{i,j}$ . Таким образом, распределение интенсивности упругого когерентного рассеяния в пространстве является функцией распределения атомов в образце, тогда как для некогерентного рассеяния переход от рассеяния на одном атоме к ансамблю атомов выражается в обычном суммировании. Известны значения амплитуд когерентного и некогерентного ядерного рассеяния для ядер химических элементов, из которых состоит большинство органических соединений [2]. Основной фоновый вклад дает некогерентное рассеяние на водороде, а рассеяние для остальных элементов мало по сравнению с ним. Если сравнить амплитуды когерентного ядерного рассеяния тепловых нейтронов с амплитудами рассеяния рентгеновских лучей ( $f_x$ ), можно заметить, что значения  $f_x$  возрастают с ростом порядкового номера элемента  $z$ , тогда как значения  $b_c$  не обнаруживают никакой регулярности. Это утверждение справедливо для всех химических элементов:  $f_x$  возрастает как  $z^{1,2}$ , тогда как для значений  $b_c$  можно указать лишь приближенный интервал от  $3 \times 10^{-13}$  см до  $10^{-12}$  см.

Амплитуда  $b_c$  изотропна, тогда как  $f_x$  уменьшается с увеличением угла рассеяния. Наконец, обратим внимание на тот факт, что амплитуды когерентного ядерного рассеяния изотопов одного и того же химического элемента могут сильно отличаться друг от друга, например, водорода и дейтерия, что является основой метода изотопного контрастирования в малоугловом нейтронном эксперименте. Особенно эффективен этот метод при исследовании полимеров, для которых часто удается получать информацию об их строении, недоступную другим методам.

Метод вариации контраста развит в работах Штурмана [3]. Для интенсив-

ности рассеяния на одной частице в растворе можно записать:

$$I(q) = \langle | \int_V [\rho(\mathbf{r}) - \rho_S] \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) d^3r |^2 \rangle,$$

где  $V$  — объем, занятый атомами макромолекулы,  $\rho_S$  — плотность амплитуды рассеяния растворителя. Контраст  $\Delta\rho$  между рассеивающей частицей и растворителем определяется следующим образом:

$$\Delta\rho = \frac{1}{V} \int_V \rho(\mathbf{r}) d^3r - \rho_S.$$

Метод вариации контраста заключается в том, что, варьируя  $\rho_S$  путем изменения изотопного состава растворителя, можно изменить контраст между объектом и растворителем и получить информацию о его внутреннем строении. Проще всего это достигается изменением соотношения  $H_2O/D_2O$  в растворителе.

Применяемые методы структурной интерпретации данных малоуглового рассеяния можно условно разбить на три группы: методы определения интегральных характеристик рассеивающих частиц, методы моделирования, прямые методы восстановления структуры частиц.

К первой группе относятся методы, позволяющие определять инварианты малоуглового рассеяния. Из числа наиболее важных инвариантов, прежде всего, следует назвать радиус инерции  $R_g$  и молекулярный вес частицы, который пропорционален интенсивности рассеяния в нулевой угол  $I(0)$  при фиксированной объемной доле частиц в системе. Эти величины можно определять из известного приближения Гинье для малых углов рассеяния.

Построение предполагаемых моделей исследуемых частиц и сравнение теоретической кривой рассеяния с экспериментальной — это метод проб и ошибок. Дебай получил выражение для интенсивности рассеяния  $I(q)$  в случае произвольной функции  $\rho(r)$ . Наиболее простой вид аналитического выражения для  $I(q)$  имеет в случае сферической симметрии. Для однородных трехосных форм — эллипсоидов, цилиндров, параллелепипедов и др. отыскание вида функции  $I(q)$  усложняется. Для тел произвольной формы предложен метод “собираемых” моделей, когда тело разбивается на рассеивающие области. В общем случае тела с произвольной плотностью можно записать:

$$I(q) = g(q) \sum_i \sum_j W_i W_j \frac{\sin qR_{ij}}{qR_{ij}},$$

где  $W_i, W_j$  — факторы рассеяния области,  $g(q)$  — усредненная по всем ориентациям функция формы области. Как правило, в качестве областей разбиения выбираются шеры или кубики.

Для ускорения поиска модели целесообразно использовать стороннюю информацию об изучаемом объекте (электронно-микроскопические, физико-химические, биохимические и т.д. данные). Дополнительная информация необходима для выбора лучшей модели, так как, во-первых, невозможно показать единственность предлагаемой модели и, во-вторых, критерии согласия кривых рассеяния моделями с экспериментальной кривой не всегда достаточны для выбора лучшей модели.

Развиваются прямые методы структурной интерпретации данных малоуглового рассеяния. Задача восстановления трехмерной функции распределения рассеивающей плотности  $\rho(r)$  по одномерной функции интенсивности малоуглового рассеяния  $I(q)$  имеет бесконечное множество решений. Под прямым методом понимается алгоритм, который позволяет максимально сузить класс возможных решений путем наложения на них физически обоснованных ограничений.

Прямая интерпретация кривых рассеяния в пространстве импульсов не всегда дает наглядное представление о структуре исследуемого образца, не всегда очевидна модель, которую следует использовать. Как правило, более наглядно выглядят корреляционные функции  $\gamma(R) \sim \langle \Delta\rho(0)\Delta\rho(r) \rangle$ , построенные в прямом пространстве с помощью преобразования Фурье измеренной кривой рассеяния:  $\gamma(R) = \frac{1}{2\pi^2} \int I(q) \frac{\sin(qR)}{qR} q^2 dq$ . Модифицированная корреляционная функция в сферическом представлении  $P(R) = \gamma(R)R^2$ , которая описывает усредненные молекулярные корреляции плотности длины когерентного рассеяния внутри частицы и в сферических слоях вокруг произвольной точки выбранной частицы на расстоянии  $R$ , как правило, позволяет судить о детальной структуре образца. Первый максимум функции  $P(R)$  соответствует радиусу отдельных элементарных образований (частиц) в образце, а следующие пики, в случае их наличия отвечают корреляциям плотности на определенных расстояниях и могут соответствовать структурным ассоциатам. По ширине пиков можно судить о распределении отдельных частиц и ассоциатов по размерам. Восстановить корреляционную функцию из кривой рассеяния (перейти от обратного к прямому пространству) позволяет метод регуляризации (пакет ATSAS [4]), разработанный в Институте кристаллографии РАН.

## Литература

- [1] Д.И. Свергун, Л.А. Фейгин. *Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние*. М.: Наука, 1986. 280 с.
- [2] V.F. Sears. *Neutron scattering lengths and cross sections* Neutron News. **3**, 26–31 (1992).
- [3] H.B. Stuhrmann. *Neutron small-angle scattering of biological macromolecules in solution* J. Appl. Cryst. **7**, 173–178 (1974).
- [4] D.I. Svergun. *Determination of the regularization parameter in indirect-transform methods using perceptual criteria* J. Appl. Cryst. **25**, 495–503 (1992).

## Фотоэмиссия с угловым разрешением для исследования электронной и спиновой структуры квазидвумерных материалов

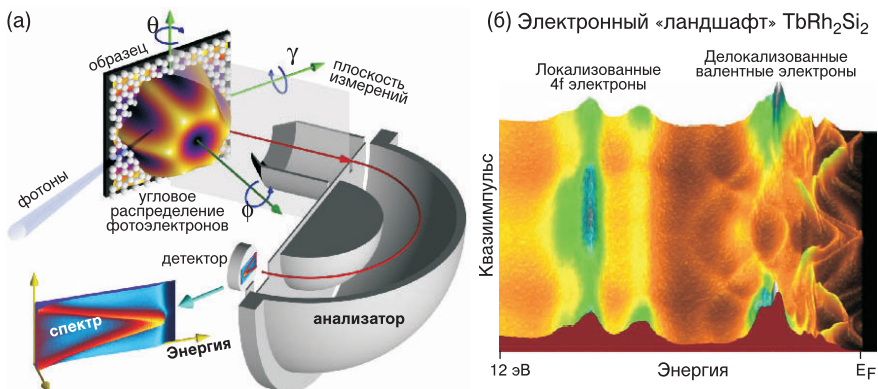
Д.Ю. Усачёв

СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

Фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ФЭСУР, ARPES) — один из наиболее прямых и информативных методов изучения электронной структуры твердых тел. Измеряя кинетическую энергию и угловое распределение фотоэлектронов, можно получить подробную информацию о зависимости между энергией и квазиимпульсом электронов, распространяющихся внутри кристаллического материала (рис. 1). Это имеет большое значение для выяснения связи между электронными, магнитными и химическими свойствами твердых тел. Дополнительно анализируя угловые распределения фотоэлектронов основных уровней, можно получить информацию об атомной структуре с помощью метода фотоэлектронной дифракции (ФЭД, PED) [1].

В докладе будут рассмотрены фотоэмиссионные методы, а также представлены результаты использования фотоэлектронной спектроскопии для изучения электронной структуры и связанных с ней свойств материалов на примере двумерных решеток (графен,  $\text{MoS}_2$ ), а также слоистых кристаллов соединений лантаноидов  $\text{LnT}_2\text{X}_2$ , где Ln — редкоземельный элемент, T — переходный металл и X = Si или P. Некоторые из этих материалов демонстрируют сильно коррелированное поведение электронов и необычные магнитные свойства. Демонстрируются возможности использования методов ФЭСУР и ФЭД для выявления особенностей электронной и спиновой структуры объемных и

поверхностных электронных состояний, эффектов спин-орбитального взаимодействия, изменения валентности 4f-элементов, отличий магнитных свойств поверхностных слоев от объемных, изменений кристаллического поля вблизи поверхности и соответствующих изменений направления магнитных моментов, эффектов магнитной близости, а также структурных характеристик исследуемых материалов [1–5].



**Рис. 1.** (а) Схема измерений ФЭСУР. (б) Пример данных ФЭСУР для материала  $\text{TbRh}_2\text{Si}_2$ .

Работа выполнена при поддержке Санкт-Петербургского государственного университета (грант 94031444).

## Литература

- [1] W. Schattke, M.A. Van Hove (Eds.), *Solid-State Photoemission and Related Methods*. WILEY-VCH (2003).
- [2] D.Yu. Usachov *et al.*, *J. Phys. Chem. Lett.* **13** 7861 (2022).
- [3] D.Yu. Usachov *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **124** 237202 (2020).
- [4] V. Voroshnin *et al.*, *ACS Nano* **16**, 7448 (2022).
- [5] A.G. Rybkin *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **129**, 226401 (2022).
- [6] D.Yu. Usachov *et al.*, *Phys. Rev. B* **102**, 205102 (2020).



# Гетероструктуры на основе дихалькогенидов переходных металлов: кристаллическая структура, оптические свойства и транспортные эффекты

М.М. Глазов

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Появление экстремально-двумерных кристаллов: графена, монослоев дихалькогенидов переходных металлов, гексагонального нитрида бора и многих других привело к своего рода революции в полупроводниковой технологии. На основе таких систем можно создавать гетероструктуры с необычайно широким спектром новых свойств и явлений просто укладывая слои диэлектриков (нитрид бора), полупроводников (монослои дихалькогенидов переходных металлов) и графена в желаемой последовательности [1]. Относительно слабое взаимодействие между слоями за счет сил Ван-дер-Ваальса позволяет не принимать во внимание при создании таких структур различие постоянных решетки отдельных слоев и разную химическую природу материалов, что качественно отличает ван-дер-ваальсовы гетероструктуры от классических, получаемых эпитаксиальными методами.

Среди ван-дер-ваальсовых гетероструктур, которые особенно активно изучаются в последнее время, особое место занимают системы на основе дихалькогенидов переходных металлов, описываемых общей формулой  $MX_2$ , где  $M = Mo$  или  $W$  — переходной металл, а  $X = S, Se$  или  $Te$  — халькоген. Основным интерес исследователей сосредоточен на двухслойных структурах, причем изучаются как гомо-, так и гетеробислои: в гомобислоях оба слоя сформированы из одного материала, а в гетеробислоях материалы различные.

В лекции будет дан обзор ключевых свойств гетероструктур на основе дихалькогенидов переходных металлов. Во-первых, будет обсуждаться кристаллическая структура и ее связь с электронными и оптическими свойствами таких систем. Ключевым эффектом для гетеробислоев с точки зрения взаимосвязи кристаллической структуры и электронных свойств является формирование областей — доменов с различным регистром (registry) — относительным расположением атомов в соседних слоях. Это связано с небольшим, но конечным рассогласованием постоянных решетки различных дихалькогенидов переходных металлов и возможным разворотом слоев (twist) относи-

тельно друг друга. При этом формируется структура — муар — повторяющаяся текстура, отсутствовавшая в исходных кристаллах [2]. Различные реестры обладают различными правилами отбора при междюзонных оптических переходах и различными  $g$ -факторами электронов и дырок [3–5], что позволяет определять ориентацию слоев в оптических эксперименте [6]. Наличие чередующихся регистров приводит к формированию сверхрешетки: дополнительного почти периодического потенциала действующего на носители заряда в таких системах [7–9].

Во-вторых, в лекции будет приведен анализ кулоновских эффектов в гетероструктурах. Будут описаны результаты расчетов состояний и энергий связи экситонов и трионов в гомо- и гетеробислоях [10,11] и проявления этих комплексов в линейном и нелинейном оптическом отклике [12–14]. Особое внимание будет уделено эффектам муара в оптических свойствах экситонов [15–18] и трионов [19–21].

В-третьих, мы обсудим транспортные свойства гетероструктур на основе дихалькогенидов переходных металлов. Речь пойдет как про особенности электронного транспорта в таких системах, включая как проявление коррелированных многочастичных фаз [22], так и эффекты распространения взаимодействующих экситонов [23].

## Литература

- [1] A.K. Geim and I.V. Grigorieva, Van der Waals heterostructures, *Nature* **499**, 419 (2013).
- [2] C. Zhang, C.-P. Chuu, X. Ren, *et al.*, Interlayer couplings, Moiré patterns, and 2D electronic superlattices in MoS<sub>2</sub>/WSe<sub>2</sub> hetero-bilayers, *Science Advances* **3**, e1601459 (2017).
- [3] H. Yu, G.-B. Liu, and W. Yao, Brightened spin-triplet interlayer excitons and optical selection rules in van der Waals heterobilayers, *2D Materials* **5**, 035021 (2018).
- [4] M. Förg, L. Colombier, R.K. Patel, *et al.*, Cavity-control of interlayer excitons in van der Waals heterostructures, *Nature Communications* **10**, 3697 (2019).
- [5] P.E. Faria Junior and J. Fabian, Signatures of Electric Field and Layer Separation Effects on the Spin-Valley Physics of MoSe<sub>2</sub>/WSe<sub>2</sub> Heterobilayers: From Energy Bands to Dipolar Excitons, *Nanomaterials* **13**, 1187 (2023).
- [6] S. Zhao, Z. Li, X. Huang, *et al.*, Excitons in mesoscopically reconstructed moiré heterostructures, *Nature Nanotechnology* **18**, 572 (2023).
- [7] R. Bistritzer and A.H. MacDonald, Moire bands in twisted double-layer graphene, *PNAS* **108**, 12233 (2011).
- [8] Y. Wang, Z. Wang, W. Yao, *et al.*, Interlayer coupling in commensurate and incommensurate bilayer structures of transition-metal dichalcogenides, *Phys. Rev. B* **95**, 115429 (2017).

- [9] F. Wu, T. Lovorn, and A.H. MacDonald, Topological exciton bands in moiré heterojunctions, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 147401 (2017).
- [10] М.А. Семина, Экситоны и трионы в двухслойных ван-дер-ваальсовых гетероструктурах, *ФТТ* **61**, 2234 (2019).
- [11] S. Kundu, T. Amit, H.R. Krishnamurthy, *et al.*, Exciton fine structure in twisted transition metal dichalcogenide heterostructures, *npj Computational Materials* **9**, 186 (2023).
- [12] N. Leisgang, S. Shree, I. Paradisanos, *et al.*, Giant Stark splitting of an exciton in bilayer MoS<sub>2</sub>, *Nature Nanotechnology* **15**, 901 (2020).
- [13] S. Shree, D. Lagarde, L. Lombez, *et al.*, Interlayer exciton mediated second harmonic generation in bilayer MoS<sub>2</sub>, *Nature Communications* **12**, 6894 (2021).
- [14] E. Barré, O. Karni, E. Liu, *et al.*, Optical absorption of interlayer excitons in transition-metal dichalcogenide heterostructures, *Science* **376**, 406 (2022).
- [15] E.M. Alexeev, D.A. Ruiz-Tijerina, M. Danovich, *et al.*, Resonantly hybridized excitons in moiré superlattices in van der Waals heterostructures, *Nature* **567**, 81 (2019).
- [16] C. Jin, E.C. Regan, A. Yan, *et al.*, Observation of moiré excitons in WSe<sub>2</sub>/WS<sub>2</sub> heterostructure superlattices, *Nature* **567**, 76 (2019).
- [17] K.L. Seyler, P. Rivera, H. Yu, *et al.*, Signatures of moiré-trapped valley excitons in MoSe<sub>2</sub>/WSe<sub>2</sub> heterobilayers, *Nature* **567**, 66 (2019).
- [18] K. Tran, G. Moody, F. Wu, *et al.*, Evidence for moiré excitons in van der Waals heterostructures, *Nature* **567**, 71 (2019).
- [19] M. Brotons-Gisbert, H. Baek, A. Campbell, *et al.*, Moiré-trapped interlayer triions in a charge-tunable WSe<sub>2</sub>/MoSe<sub>2</sub> heterobilayer, *Phys. Rev. X* **11**, 031033 (2021).
- [20] E. Liu, E. Barré, J. van Baren, *et al.*, Signatures of moiré triions in WSe<sub>2</sub>/MoSe<sub>2</sub> heterobilayers, *Nature* **594**, 46 (2021).
- [21] X. Wang, J. Zhu, K.L. Seyler, *et al.*, Moiré triions in MoSe<sub>2</sub>/WSe<sub>2</sub> heterobilayers, *Nature Nanotechnology* **16**, 1208 (2021).
- [22] Y. Xu, S. Liu, D.A. Rhodes, *et al.*, Correlated insulating states at fractional fillings of moiré superlattices, *Nature* **587**, 214 (2020).
- [23] E. Wietek, M. Florian, J. Göser *et al.*, Nonlinear and negative effective diffusivity of interlayer excitons in moiré-free heterobilayers, *Phys. Rev. Lett.* **132**, 016202 (2024).

# Экситоны, оптические моды и экситон-поляритоны в наноструктурах на основе дихалькогенидов переходных металлов

Т.В. Шубина

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

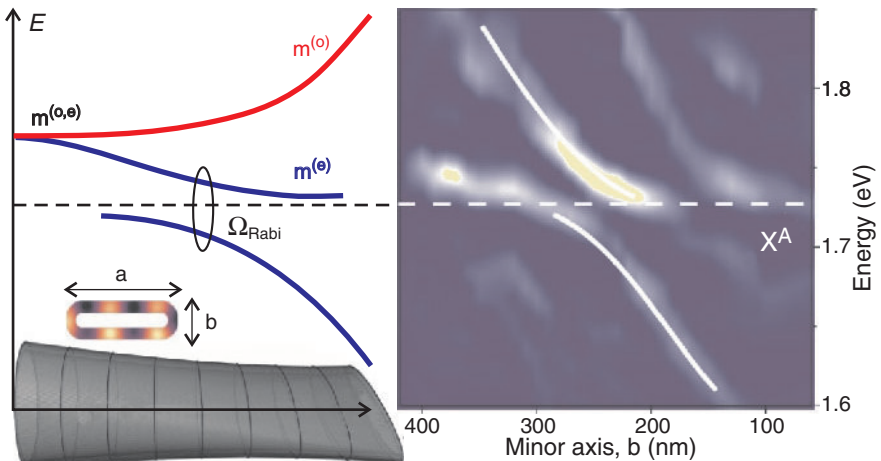
Слоистые полупроводниковые соединения — дихалькогениды переходных металлов (ДПМ), такие как  $\text{MoS}_2$  и  $\text{WSe}_2$ , активно изучаются с середины прошлого века. Установлен непрямозонный характер зонной структуры объемных кристаллов и сильное спин-орбитальное расщепление валентной зоны, приводящее к появлению экситонов А и В. Сильные резонансы этих экситонов отчетливо наблюдались в спектрах поглощения многослойных структур, тогда как люминесценция, как правило, была пренебрежимо слабой. Беспрецедентное развитие в XXI веке физики двумерных (2D) структур на основе ДПМ и других материалов, оказалось возможным благодаря появлению и широкому распространению методов микро-диагностики, таких как микроспектроскопия фотолюминесценции, отражения и комбинационного рассеяния света, а также разнообразных лазеров для эффективной накачки. Отсчет обычно начинается с 2010 г., когда впервые было показано, что монослой  $\text{MoS}_2$  является прямозонным полупроводником, хотя ранее это явление было предсказано теоретически. Возрастающий интерес к 2D ДПМ определяется тем, что они имеют запрещенную зону в видимом диапазоне и чрезвычайно высокие энергии связи экситонов ( $\sim 0.5$  эВ). Создание новых типов приборов на их основе, таких как источники однофотонного излучения, предполагает развитие инженерии деформации. В данном докладе обсуждается влияние деформации на тип зонной структуры и спектр экситонных состояний в атомарно-тонких слоях, а также на оптические моды и экситон-поляритоны в микро- и нанотрубках ДПМ, которые излучают сильную экситонную люминесценцию и могут поддерживать моды шепчущей галереи [1,2].

Уникальное свойство монослоев ДПМ — доминирование прямых  $K-K$  оптических переходов — реализуется в относительно узком диапазоне деформации кристаллической решетки, порядка  $\pm 1\%$ . Приближение к этой величине как при сжатии, так и при растяжении приводит к изменению зонной структуры таким образом, что непрямые переходы  $\Lambda - K$  или  $\Gamma - K$  могут оказаться более низкими по энергии. При этом радиационное время оптиче-

ских переходов удлиняется, а интенсивность излучения существенно снижается. Наряду с типом зонной структуры, тонкая структура спектра экситонных состояний — последовательность и величина энергии расщепления  $\Delta_{AF}$  между светлыми, спин-разрешенными (Allowed) и темными, спин-запрещенными (Forbidden) экситонами — определяет эффективность излучения 2D наноструктур. Расщепление  $\Delta_{AF}$  может иметь различный знак и величину, поскольку оно в основном определяется  $\Delta_c$  — спин-орбитальным расщеплением подзон в зоне проводимости и  $\Delta_{ex}$  — электрон-дырочным обменным взаимодействием, которые могут иметь разный знак и частично компенсировать друг друга. Несколько иначе обстоит дело со спектром экситонных состояний в бислоях, исходная зонная структура которых уже содержит не прямой переход. Кроме того, бислой как структура с четным числом слоев характеризуется вырождением подзон в зоне проводимости. Экспериментальные данные о спектре экситонных состояний в бислоях отсутствовали и были крайне противоречивы для монослоев, что требовало проведение альтернативных исследований [3].

Цикл исследований, проведенный нами, базировался на спектроскопии микро-фотолюминесценции (микро-ФЛ), измеренной с временным разрешением в широком температурном интервале, 10–300 К [4]. Быстрое, среднее и медленное характерные времена затухания микро-ФЛ были отнесены к светлым, темным и непрямым экситонам. Как было показано, времена удлиняются с увеличением температуры, если сверху находится темный по спину или импульсу экситон, и наоборот. Картирование спектров комбинационного рассеяния света (микро-Раман) позволило определить величину и характер деформации (сжатие, растяжение) в слоях, перенесенных на плоские и профилированные подложки. Установлено, что уже при деформации  $\sim 0.3\%$  появляется медленная компонента со временем затухания  $\sim 10$  нс, что указывает на частичную модификацию зонной структуры. В соответствии с теоретическими предсказаниями, в недеформированном монослое светлый экситон является нижним в А-серии экситонов (1.9 эВ), причем найденная энергия расщепления  $\sim 2$  мэВ может увеличиваться в несколько раз при деформации сжатия. Влияние деформации растяжения имеет противоположный знак и слабее по величине. В А-серии недеформированного бислоя наблюдалось отсутствие расщепления между экситонами. Приложение сжимающих напряжений приводит к расщеплению состояний, причем нижнее также является спин-разрешенным. Напротив, для не прямых экситонов в бислое (1.5 эВ) спин-запрещенное состояние оказывается нижним. Подобная последовательность наблюдалась также для не прямых экситонов в многослойных пластинках и нанотрубках [5].

Микро- и нанотрубки ДПМ представляют собой микрорезонаторы с модами шепчущей галереи, которые могут участвовать в формировании экситон-поляритона, то есть квантовой суперпозиции экситона и фотонной моды [6]. Слои в нанотрубках испытывают растягивающую деформацию, приводящую в ряде случаев к уплощению поперечного сечения и его повороту вдоль оси скрученной (twisted) трубки [7]. В спектрах микро-ФЛ, измеренных вдоль одиночных скрученных трубок  $\text{MoS}_2$ , обнаруживается расщепление оптических мод на симметричную и антисимметричную составляющие из-за взаимодействия электромагнитных полей, возбужденных на противоположных сторонах уплощенного сечения, когда они туннелируют через зазор, аналогично тому, как это происходит при двухямном потенциале, в данном случае оптическом [8].



**Рис. 1.** ДПМ трубка с постепенно изменяемым сечением (слева). Расщепление оптической моды на две составляющие и превращение симметричной (e) компоненты в поляритонные ветви вблизи экситонного резонанса. Антипересечение поляритонных ветвей в спектрах отражения вблизи экситона A, смещенного в сторону меньших энергий из-за растягивающих напряжений в слоях (справа).

Величина расщепления мод экспоненциально зависит от соотношения осей  $a/b$  ( $b$  — малая ось) сплюснутого поперечного сечения и достигает 150 мэВ. Сильная зависимость энергии мод была использована для исследования дисперсии экситон-поляритонов в одиночной трубке  $\text{MoS}_2$  методом спектроскопии микро-отражения (Рис. 1). Постепенное изменение величины  $b$  от 400 нм до 150 нм продемонстрировало трансформацию чисто оптических мод в по-

ляритонные ветви вблизи сильных экситонных резонансов, а также антипересечение верхней и нижней поляритонных ветвей с расщеплением Раби  $\Omega_R \sim 40$  мэВ для экситона А и  $\Omega_R \sim 60$  мэВ для экситона В, имеющего более высокую силу осциллятора. Полученные значения сравнимы с  $\Omega_R$  для монослоя во внешнем брэгговском резонаторе. В области трубки с постоянным зазором реализуются поляритоны с постоянной энергией, демонстрирующие отличное совпадение расщепленных пиков в спектрах отражения и фотолюминесценции [9].

Подводя итог, при создании нанофотонных устройств на основе ДПМ необходимо учитывать влияние деформации на зонную структуру и спектр экситонных состояний в атомарно-тонких слоях, а также на оптические моды и поляритоны в наноструктурах.

Оригинальные исследования выполнены частично при поддержке гранта Российского научного фонда № 23-12-00300, <https://rscf.ru/project/23-12-00300/>.

## Литература

- [1] T.V. Shubina *et al.* *Excitonic emission in van-der-Waals nanotubes of transition metal dichalcogenides*. *Annalen der Physik*, 1800415 (2019).
- [2] D.R. Kazanov *et al.* *Multiwall MoS<sub>2</sub> tubes as optical resonators*. *App. Phys. Lett.* **113**, 101106 (2018).
- [3] T.V. Shubina *et al.* *Effect of strain on the fine structure of exciton states in atomically thin transition metal dichalcogenides*, *Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys.* **87**, S52–S59 (2023).
- [4] Eliseyev *et al.* *Photoluminescence kinetics of dark and bright excitons in atomically thin MoS<sub>2</sub>*, *Phys. Status Solidi RRL*, 2100263 (2021).
- [5] O.O. Smirnova *et al.* *Temperature activation of indirect exciton in nanostructures based on MoS<sub>2</sub>*. *J. Phys. Conf. Ser.* **1482**, 012038 (2020).
- [6] D.R. Kazanov *et al.* *Towards exciton-polaritons in an individual MoS<sub>2</sub> nanotube*, *Nanomaterials* **10**, 373 (2020).
- [7] M. Remskar *et al.* *Confinement related phenomena in MoS<sub>2</sub> tubular structures grown from vapour phase*, *Isr. J. Chem.* **61**, 1–11 (2021).
- [8] I.A. Eliseyev *et al.* *Twisted nanotubes of transition metal dichalcogenides with split optical modes for tunable radiated light resonators*, *Adv. Opt. Mater.* **11**, 2202782 (2023).
- [9] A.I. Galimov *et al.* *Direct observation of split-mode exciton-polaritons in a single MoS<sub>2</sub> nanotube*. *ArXiv*: 2401.00348 (2023).

# **Генерация нерасходящихся пучков структурированного света при конической рефракции частично-когерентного излучения**

В.Ю. Мыльников

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Структурирование света — это активно развивающееся направление современной оптики, связанное с созданием и применением световых полей с регулируемой интенсивностью, поляризацией, фазой и когерентностью. Хорошо известными представителями семейства структурированных пучков являются оптические вихри, обладающие ненулевым орбитальным угловым моментом, а также векторные пучки, характеризующиеся неоднородным в пространстве распределением поляризации. Зачастую такие пучки генерируют с помощью дорогостоящих пространственных модуляторов света, цифровых микрзеркальных устройств, а также q-пластинок, что значительно усложняет экспериментальную установку и требует достаточно тонкой настройки при эксплуатации. В связи с этим, следует обратить внимание на альтернативный способ генерации структурированного света, использующий коническую рефракцию излучения [1]. Данное явление возникает при прохождении луча света вдоль одной из оптических осей двуосного кристалла. В результате после кристалла такой пучок обладает кольцевым распределением интенсивности, дробным орбитальным угловым моментом и неоднородным в поперечной плоскости состоянием поляризации. Значительный прогресс в теории конической рефракции в последние два десятилетия и активное развитие технических возможностей современных лабораторий позволили создать большое количество практических приложений конической рефракции для оптической связи и поляриметрии, захвата частиц и оптической манипуляции, а также для генерации и аннигиляции оптических вихрей. В подавляющем большинстве современных работ по изучению конической рефракции в качестве источника излучения используются газовые или твердотельные лазеры. Однако, для практического применения данного явления большой интерес представляет исследование конической рефракции частично-когерентного излучения. С практической точки зрения это очень выгодно благодаря свойствам низкокогерентных источников света, таких как лазерные диоды и светодиоды, ко-



торые просты, компактны и очень экономичны. Кроме того, пространственная когерентность дает дополнительную возможность управлять свойствами света, помимо уникальных поляризационных, фазовых и пространственных характеристик конической рефракции.

В данной работе впервые была построена строгая теория конической рефракции излучения с частичной пространственной когерентностью [2]. Было показано, что в случае гауссовского источника модели Шелла корреляционные функции конической рефракции можно представить через хорошо известные интегралы Бельского-Хапалука-Берри. Кроме того, предполагая случайность фазы электрического поля входного пучка, мы переформулировали и значительно упростили строгую теорию конической рефракции, используя предложенную ранее бессель-гауссову модель конической рефракции [3]. Разработанный подход позволил нам рассматривать распространение частично-когерентного света через двусный кристалл точно так же, как и в случае полностью когерентного излучения. Используя разработанный метод, нами были получены аналитические выражения для интенсивности конической рефракции как в фокальной плоскости, так и в дальнем поле. Их анализ позволил объяснить и строго обосновать ранее полученные экспериментальные результаты [4] и предсказать новые явления. К последним относятся контринтуитивный эффект сужения ширины кольца конической рефракции и исчезновение темного кольца Поггендорфа в плоскости Ллойда, а также смещение пятен Рамана для низко-когерентного излучения, падающего на кристалл. Помимо этого, предсказана универсальная степенная зависимость степени когерентности конусов конической рефракции от корреляционной длины и бездифракционное распространение низко-когерентного пучка конической рефракции в дальнем поле.

## Литература

- [1] A. Turpin, Y.V. Loiko, T.K. Kalkandjiev, and J. Mompart, *Conical refraction: Fundamentals and applications*, Laser Photon. Rev. 10, 750–771 (2016).
- [2] V.Yu. Mylnikov, V.V. Dudelev, E.U. Rafailov, and G.S. Sokolovskii, *Partially coherent conical refraction promises new counter-intuitive phenomena*, Scientific Reports 12, 16863 (2022).
- [3] V.Yu. Mylnikov, E.U. Rafailov, and G.S. Sokolovskii, *Close relationship between Bessel-Gaussian and conical refraction beams*, Opt. Express 28, 33900–33910 (2020).
- [4] V.Yu. Mylnikov, S.N. Losev, V.V. Dudelev, K.A. Fedorova, E.U. Rafailov, and G.S. Sokolovskii, *Conical refraction with low-coherence light sources*, Opt. Express 27, 25428–25435 (2019).

# Фазовые переходы в углеродных структурах при высоких температурах и давлениях

С.В. Кидалов

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Открытие на рубеже веков многообразных аллотропных форм углерода — фуллеренов, нанотрубок, графена и параллельный переход в нанотехнологии от методов “сверху вниз” (top-down) к методу “снизу-вверх” (bottom-up) определило новые направления исследований в физике конденсированных сред.

Как известно, такое многообразие углеродных наноструктур определяется способностью атомов углерода к различному типу гибридизации электронных оболочек — от “чисто графитовой” —  $sp^2$  до “чисто алмазной”  $sp^3$  и смешанной (“фуллереновой”)  $sp^{2+x}$  или  $sp^{3-x}$ , впервые введенной в таких обозначениях в классической монографии [1].

Открытие аллотропных форм углерода привело к постановке ряда принципиальных вопросов в физике конденсированных сред, среди которых одними из первых были вопросы об относительной стабильности различных углеродных наноструктур, возможности и механизмах фазовых переходов между ними. Теоретические результаты этих исследований привели к, казалось, парадоксальному выводу о том, что не графит, а алмаз является термодинамически стабильной формой углерода при размерах менее 30 ангстрем [2,3]. Ярким экспериментальным результатом было обнаружение возможности трансформации луковичной формы углерода (многослойного фуллерена) в алмазную наночастицу под действием электронного или ионного пучков [4].

Первые теоретические [5] и экспериментальные [6,7] результаты изучения структурных фазовых переходов в фуллеренах при высоких статических давлениях и температурах (НРНТ синтез) привели к неожиданным результатам, говорящим о том, что синтезируемые из фуллеренов  $C_{60}$  и  $C_{70}$  фазы высокого давления по твердости превосходят алмаз.

В последующие годы результаты этого направления исследований в отечественных и зарубежных работах [8–12] привели к построению модели трансформации фуллеренов в условиях высоких давлений и температур, изучению деталей структуры полимеризованных фаз  $C_{60}$  и  $C_{70}$ , определили создание современной неравновесной  $P - -T$  диаграммы состояний фуллеренов, одного из необходимых элементов физического материаловедения.

При этом был синтезирован ряд новых структурных модификаций углеро-

да, например, аморфный алмаз при температуре заметно ниже температуры Дебая алмаза [13]. Было обнаружено, что синтез алмаза из фуллерена  $C_{60}$  при статическом давлении 6.7 ГПа и температуре 1200–1850° С существенно зависит от металла-катализатора, в то время как при тех же условиях фазовый переход графит-алмаз от этого не зависит [14]. Подобные экспериментальные факты привели к постановке вопроса об особенностях фазовых переходов в условиях НРНТ, когда в качестве исходного вещества используется смесь двух углеродных материалов различной кристаллической структуры.

Тот факт, что начальное кристаллическое состояние существенно влияет на механизм, последовательность структурных превращений и кристаллическую фазу углеродных материалов, формирующихся при НРНТ синтезе [15–18], определяет актуальность постановки задачи об исследованиях НРНТ фазовых переходов графит–алмаз, происходящих в присутствии других углеродных наноструктур.

В качестве одной из таких наноструктур естественно было выбрать фуллерены  $C_{60}$  и  $C_{70}$ , в качестве второй — алмазные нанокристаллы детонационного синтеза, единственный углеродный наноматериал, производимый в промышленных масштабах, приоритет открытия которого принадлежит российским исследователям [19,20].

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 24-49-10014.

## Литература

- [1] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus and P.C. Eklund. *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, Elsevier 1996. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-221820-0.X5000-X>.
- [2] M.Y. Gamarnik, *Energetical preference of diamond nanoparticles*, Phys. Rev. B, **54**, 2150 (1996).
- [3] P. Badziag, W.S. Verwoerd, W.S. Ellis, & N.R. Greiner. *Nanometre-sized diamonds are more stable than graphite*. Nature, **343**(6255), 244–245. doi:10.1038/343244a0 (1990).
- [4] F. Banhart, P.M. Ajayan, *Carbon onions as nanoscopic pressure cells for diamond formation*, Nature, **382**, 433–435 (1996).
- [5] R. Ruoff, A. Ruoff. *Is  $C_{60}$  stiffer than diamond?* Nature, **350**, 663–664 (1991).
- [6] V.D. Blank, S.G. Buga, N.R. Serebryanay, V.N. Denisov, G.A. Dubitsky, A.N. Ivlev, B.N. Mavrin, M.Yu. Popova. *Ultrahard and superhard carbon phases produced from  $C_{60}$  by heating at high pressure: structural and Raman studies*. Physics Letters A, **205**, 208–216 (1995).
- [7] В.Д. Бланк, К.В. Гоголинский, К.В. Денисов, В.А. Ивденко, Б.Н. Маврин, Н.П. Серебряная, С.Н. Сульянов. *Механические, структурные и спектроскопические свойства фаз фуллеритов  $C_{70}$ , полученные при высоком давлении со сдвиговой деформацией*. ЖТФ, **72**, 49–53 (2002).
- [8] B. Sundqvist. *Fullerenes under high pressure*. Advances in Physics. **48**, 1–134 (1999).

- [9] А.Г. Ляпин, В.В. Бражкин. *Корреляции физических свойств углеродных фаз, полученных из фуллерита  $C_{60}$  при высоком давлении*. ФТТ **44**, 393–397 (2002).
- [10] M.V. Korobov, A.G. Bogachev, A.A. Popov, V.M. Senyavin, E.B. Stukalin, A.V. Dzyabchenko, V.A. Davydov, L.S. Kashevarova, A.V. Rakhmanina, V. Agafonov. *Relative stability of polymerized phases of  $C_{60}$ : Depolymerization of a tetragonal phase*. Carbon, **43**, 954–961 (2005).
- [11] O. Chernogorova, E. Drozdova, I. Ovchinnikova, A.V. Soldatov, E. Ekimov. *Structure and properties of superelastic hard carbon phase created in fullerene-metal composites by high temperature-high pressure treatment*. J. Appl. Phys. **111**, 112601 (2012); doi: 10.1063/1.4726155.
- [12] Y.A. Kvashnina, A.G. Kvashnin, L.A. Chernozatonskii, P.B. Sorokin. *Fullerite-based nanocomposites with ultrahigh stiffness. Theoretical investigation*. Carbon, **115**, 546–549 (2017).
- [13] H. Hirai, K. Kondo. *Amorphous diamond from  $C_{60}$  fullerene*, Appl. Phys. Lett., **64**, 1797 (1994).
- [14] G. Bocquillon, C. Bogicevic, C. Fabre, C. Rassat.  *$C_{60}$  fullerene as a carbon source for diamond synthesis*. J. Phys. Chem., **97**, 12924 (1993).
- [15] I. Margiolaki, S. Margadonna, K. Prassides, S. Assimopoulos, K.P. Meletov, G.A. Kourouklis, T.J.S. Dennis, H. Shinohara. *High pressure study of the  $C_{84}$  fullerene*. Physica B, **318**, 372 (2002).
- [16] Y.Q. Zhu, T. Sekine, T. Kobayashi, E. Takazawa, M. Terrones, H. Terrones. *Collapsing carbon nanotubes and diamond formation under shock waves*. Chem. Phys. Lett. **287**, 689 (1998).
- [17] K. Yamada. *Shock synthesis of a new cubic form of carbon*. Carbon, **41**, 1309 (2003).
- [18] K. Yamada. *Shock-induced phase transition of oriented pyrolytic graphite to diamond at pressures up to 15 GPa*. Carbon, **40**, 261 (2002).
- [19] А.И. Лямкин, Е.А. Петров, А.П. Ершов, Г.В. Сакович, А.М. Ставер, В.М. Титов. *Получение алмазов из взрывчатых веществ*. ДАН СССР, **302**, 611–613 (1988).
- [20] А.Т. Дидеикин, А.Е. Aleksenskii, M.V. Baidakova, P.N. Brunkov, M. Brzhezinskaya, V.Y. Davydov, V.S. Levitskii, S.V. Kidalov, Y.A. Kukushkina, D.A. Kirilenko, V.V. Shnitov, A.V. Shvidchenko, M.S. Shestakov, A.Ya. Vul'. *Rehybridization of carbon on facets of detonation diamond nanocrystals and forming hydrosol of individual particles*. Carbon, **122**, 737–745 (2017).

## Электронная структура топологических изоляторов $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ и $\text{Bi}_2\text{Se}_3$

С.Т. Байдак<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup> Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

Халькогениды висмута  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  и  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  являются типичными представителями семейства топологических изоляторов. С помощью внешних воздействий (магнитного поля, температуры, давления и др.) можно изменять их электронную структуру и, следовательно, изменять их физические свойства. Это, в свою очередь, можно использовать в различных устройствах спинтроники и термоэлектроники, а также в оптоэлектронике и других приложениях. Поэтому получение новых знаний об особенностях электронной структуры в таких топологических материалах представляет большой интерес.

В работе проведены теоретические расчеты электронной структуры соединений  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  и  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  в рамках теории функционала плотности с учетом спин-орбитального взаимодействия [1]. В зонной структуре соединений получена запрещенная зона, в  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  ее ширина составила 0.48 эВ, а в  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  — 0.41 эВ, которые согласуются с предыдущими расчетами. Для учета различных значений температуры, при которых проводились экспериментальные исследования, использовались данные параметров кристаллической структуры при соответствующих значениях температуры и температурное размытие, что привело к небольшой электронной плотности на уровне Ферми  $E_F$ . Плотность электронных состояний на уровне Ферми  $N_{EF}$  является одной из важнейшей характеристик и тесно связана со многими электронными свойствами, в частности, с концентрацией носителей тока  $n$ . С помощью экспериментальных исследований [1] была обнаружена корреляция между изменением плотности электронных состояний на уровне Ферми и изменением концентрации носителей тока. В случае  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  плотность электронных состояний на уровне Ферми  $N(E_F)$  и концентрация носителей тока  $n$  растут с увеличением температуры с 0.296 состояний/(эВ \* эл. ячейку) (5 К) до 0.307 состояний/(эВ \* эл. ячейку) (300 К) и с  $0.9 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  (5 К) до  $2.6 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  (300 К) соответственно. А в случае  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , наоборот, плотность электронных состояний  $N_{EF}$  падает с увеличением температуры с 0.201 состояний/(эВ \* эл. ячейку) (5 К) до 0.198 состояний/(эВ \* эл. ячейку) (300 К) и, как следствие, также уменьшается концентрация носителей заряда с  $2.94 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  (5 К) до  $2.81 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  (300 К) [1].

Выражаю благодарность научному руководителю А.В. Лукоянову<sup>1,2</sup> и коллегам, проводившим экспериментальные исследования: Б.М. Фоминых<sup>1,2</sup>, А.Н. Переваловой<sup>1</sup>, С.В. Наумову<sup>1</sup>, Е.Б. Марченковой<sup>1</sup>, В.В. Марченкову<sup>1,2</sup>.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-42-02021.

## Литература

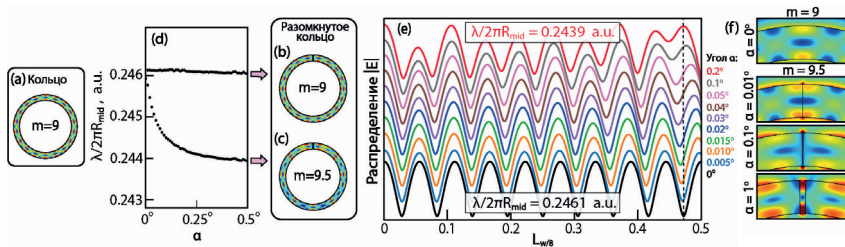
- [1] V.V. Marchenkov, A.V. Lukoyanov, S.T. Baidak, A.N. Perevalova, B.M. Fominykh, S.V. Naumov, E.B. Marchenkova, *Micromachines* **14** 1888 (2023). <https://doi.org/10.3390/mi14101888>.

# Топология и кривизна: фотонные эффекты при размыкании диэлектрического кольца

М.Э. Бочкарев

ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

При изучении механизмов, определяющих параметры фотонных резонансов, фундаментальной интерес представляют эффекты, связанные с кривизной и топологией структур. Например, при изменении отношения ширины к высоте ленты Мёбиуса фаза Берри изменяется от  $\pi$  до  $0$ , а скрученная лента такой же кривизны, но без поворота на  $180^\circ$ , имеет нулевую фазу Берри и те же резонансные длины волн, что и плоское кольцо [1].



**Рис. 1.** Снятие вырождения CW-CCW резонансных мод кольца при создании щели с центральным углом  $\alpha$  (d). Сравнение электрических полей резонансов в плоском кольце (a) и разомкнутом кольцевом резонаторе (b,c). Трансформация распределения амплитуды поля  $|E|$  вдоль выбранной дуги резонатора (e) и распределения поля при увеличении угла  $\alpha$  (f).

Нами проведено теоретическое и экспериментальное исследование топологического перехода от плоского диэлектрического кольца с прямоугольным сечением к плоскому разомкнутому кольцу с сохранением длины средней линии. Перечислим результаты работы [2]:

- (i) При расщеплении кольцевого резонатора наблюдается снятие вырождения CW-CCW мод кольца и образование двух семейств резонансов. Длина волны семейства «обыкновенных» мод не меняется, а длина волны «топологических» мод монотонно уменьшается на  $\lambda/2$  при увеличении центрального угла щели  $\alpha$  от 0 до  $\sim 0.5^\circ$ . При этом аксиальный индекс «топологической» моды  $m$  увеличивается на половину (с 9 до 9.5 на рис. 1с), в противоположность тонкой ленте Мёбиуса, у которой индекс  $m$  уменьшается на половину, например, с 9 до 8.5. В случае разомкнутого кольца набегаящая фаза равна  $\pi$ , как фаза Берри у тонкой ленты Мёбиуса;
- (ii) Для топологического перехода кольцо — разомкнутое кольцо введен параметр порядка, который воспроизводит амплитуду расщепления «обыкновенных» и «топологических» мод;
- (iii) Установлен механизм трансформации мод кольца. Электрическое поле мод кольца ориентируется относительно щели либо нулем  $|E|$ , в результате чего образуются «обыкновенные» моды, либо максимумом  $|E|$ . В этом случае щель «разрезает» полуволну на две полуволны, увеличивая на половину продольный индекс «топологической» моды  $m$ , Рис. 1f;
- (iv) Все расчеты проводились при условии сохранения исходной длины структуры  $2\pi R_{\text{mid}}$ . Таким образом, мы получаем резонатор с постоянной длиной, однако длина продольной резонансной волны непрерывно изменяется в диапазоне от 0 до  $\lambda/2$  в зависимости от  $\alpha$ , Рис. 1e. Такой эффект, предполагающий разнообразные применения на практике, наблюдается впервые;
- (v) Зависимости добротности «обыкновенных» и «топологических» мод от  $\alpha$  имеют прямо противоположный характер из-за разной симметрии мод. Резкое падение добротности «топологических» мод связано с появлением «горячего пятна» в щели и, соответственно, с сильным увеличением радиационных потерь при малых углах  $\alpha$ , Рис. 1f;
- (vi) При дальнейшей трансформации разомкнутого кольца в прямоугольный параллелепипед с сохранением длины структуры «обыкновенные» и «топологические» моды образуют одно эквидистантное семейство мод Фабри–Перо.

Автор выражает благодарность своей научной группе — Н.С. Солодовченко, К.Б. Самусеву и М.Ф. Лимонову за совместную работу. Также, автор выражает благодарность за финансовую поддержку проекту «Клевер» (the ITMO-MIPT-Skoltech Clover Program) и гранту РФФИ 21-79-10214 (<https://rscf.ru/project/21-79-10214>).

## Литература

- [1] Jiawei Wang *et al*, "Experimental observation of Berry phases in optical Mobius-strip microcavities Nature Photonics, 17, 120 (2023).
- [2] M. Bochkarev *et al*, "Split ring versus Mobius strip: topology and curvature effects arXiv submission <http://arxiv.org/abs/2312.04582>.

## Однофотонный источник на основе фотонной наноантенны с квантовой точкой InAs/AlGaAs

А.И. Веретенников

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Для реализации большинства систем квантовой фотоники требуются источники квантового света, способные «по требованию», генерировать излучение с высокой степенью однофотонности. Наиболее перспективными для использования в системах квантовых вычислений и квантовой криптографии являются источники одиночных фотонов (ИОФ) на основе полупроводниковых квантовых точек (КТ) [1]. Наряду с высокой чистотой однофотонного излучения, для успешного использования ИОФ в схемах квантового распределения ключей и квантовой телепортации необходима также высокая скорость генерации одиночных фотонов и высокая эффективность вывода излучения. В связи с активными исследованиями в сферах квантового распределения ключей и квантовой телепортации, оптимизация параметров ИОФ является важной задачей современной фотоники.

Настоящая работа посвящена изучению излучательных свойств ИОФ на основе КТ InAs/AlGaAs, функционирующего в красном спектральном диапазоне. Использование колончатой структуры с плавно изменяющимся диаметром (фотонной наноантенны) было использовано для увеличения эффективности вывода излучения КТ [2]. Для оптимизации геометрических параметров наноструктуры было реализовано численное моделирование ИОФ в среде Comsol Multiphysics. В результате моделирования был получен диапазон радиусов нижнего основания наноантенны 86–98 нм, соответствующий наиболее узкой диаграмме направленности излучения КТ в дальнем поле. Вывод излучения КТ из оптимизированной фотонной наноантенны в 18 раз превысил вывод излучения из планарной структуры.

В настоящей работе также были проведены спектроскопические исследования выращенной колончатой структуры, геометрические параметры которой



соответствуют оптимизированному диапазону параметров. Увеличение степени однофотонности по сравнению с надбарьерным возбуждением [3] было достигнуто с использованием возбуждения люминесценции КТ с участием акустических фононов. Оптимизированный режим оптического возбуждения позволил увеличить степень однофотонности излучения на  $\sim 15\%$  по сравнению с надбарьерным возбуждением [3].

## Литература

- [1] P. Senellart *et al.*, *Nature Nanotechnology*, **12**, 1026–1039 (2017).
- [2] I. Friedler *et al.*, *Optics express*, **17**(4), 2095–2110 (2009).
- [3] M. Rakhlin *et al.*, *JETP Letters*, **109**, 145–149 (2019).

## Параметры динамической поляризации ядер в Si:As при низких температурах и сильных магнитных полях

В.А. Грабарь

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, С.-Петербург, Россия

Динамическая ядерная поляризация возникает в условиях ЭПР при наличии сверхтонкого взаимодействия между спином электрона, локализованного на примеси, и спином ядра. Кроме того, необходимы так называемые флип-флоп переходы с одновременным переворотом спина электрона и спина ядра для их осуществления. Время таких переходов оказывается длиннее на несколько порядков времени спиновой релаксации электронов, однако именно за счёт флип-флоп переходов устанавливается равновесное распределение по проекциям спина ядра во внешнем магнитном поле. Различают два основных механизма динамической релаксации в условиях ЭПР: первый, эффект Оверхаузера, который реализуется при возбуждении разрешённых переходов с изменением проекции спина электрона и с сохранением проекции ядерного спина и, второй, солид эффект, который возникает при возбуждении запрещённых флип-флоп переходов, при которых сохраняется суммарная проекция спина электрона и ядра. Величина динамической ядерной поляризации зависит от условий ЭПР и при не слишком больших внешних полях и гелиевых температурах (когда разница заселенностей спиновых подуровней электрона невелика) степень ориентации ядер невелика, и для ее обнаружения необходимо использовать режим насыщения линий ЭПР. Ситуация принципиально

меняется при использовании сильных магнитных полей и низких температур, когда заселенности электронных состояний с разной проекцией спина отличаются на несколько порядков. В этом случае степень ядерной поляризации может достигать 100% при относительно слабых накачках. Именно такая ситуация была реализована в работе [1] в Si:As и [2] Si:P.

В рамках этой работы была составлена и описана зависимость сигналов линий ЭПР от времени и также проведено количественное сопоставление экспериментальных данных [1] с расчетами динамической поляризации при рассмотрении эффекта Оверхаузера [3] и с произведённым расчетом солид эффекта для получения величины времени флип-флоп переходов и определения механизма флип-флоп переходов в Si:As. В работе [1] оценено время флип-флоп переходов на основе простого предположения об экспоненциальном изменении степени поляризации ядер от времени, однако в [1,3] показано, что зависимости величин сигналов ЭПР и величины динамической поляризации ядер от времени накачки не могут быть описаны одной экспоненциальной функцией и для корректной оценки времен необходимо знание точной зависимости величин сигналов от времени, которые мы получаем из кинетических уравнений в [2,3].

Данная работа была выполнена при поддержке РФФИ (проект № 23-12-00205). Автор выражает благодарность Аверкиеву Н.С. и Лифшиц М.Б.

## **Литература**

- [1] J. Jarvinen, J. Ahokas, *et al.*, Appl. Magn. Resonan. **48** 473–483 (2017)
- [2] W. Knap, D. But, M. Lifshits, G. Martinez, N. Averkiev, Dynamic Nuclear Spin Polarization at Terahertz Frequencies and High Magnetic Fields
- [3] M.B. Lifshits, N.S. Averkiev, Solid State Communications, 371 (2023) 115276

## **Лазерно-индуцированная терагерцовая эмиссия в спинтронных эмиттерах на основе гетероструктуры Co/Pt с модифицированным интерфейсом**

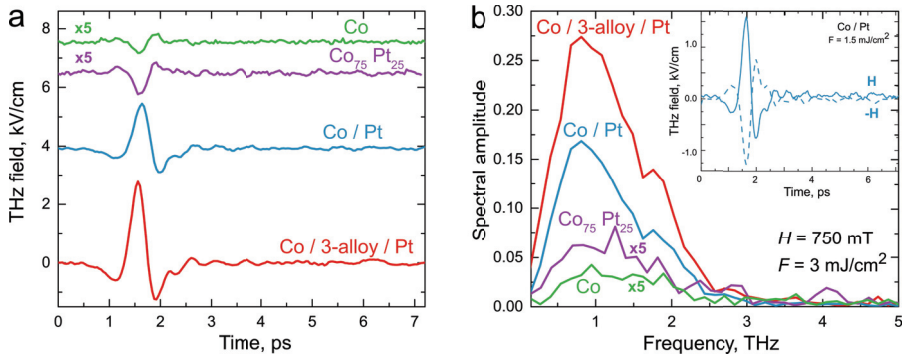
А.В. Кузикова

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Фемтосекундное лазерное возбуждение гетероструктур ферромагнетик немагнитный металл приводит к генерации однопериодных терагерцовых импульсов, несмотря на их нанометровую толщину [1,2]. В настоящее время ведутся

активные исследования оптимизации таких спинтронных эмиттеров с целью увеличения интенсивности и уширения спектра излучения.

Для изучения терагерцовой эмиссии было выбрано четыре образца со следующей структурой: чистый Co, сплав  $\text{Co}_{75}\text{Pt}_{25}$ , структура Co/Pt и структура Co/Pt с градиентным интерфейсом (3 слоя:  $\text{Co}_{25}\text{Pt}_{75}/\text{Co}_{50}\text{Pt}_{50}/\text{Co}_{75}\text{Pt}_{25}$ ). Для возбуждения терагерцовой эмиссии использовался лазерный импульс с длительностью 40 фс, длиной волны 800 нм и частотой повторения 1 кГц. Образец помещался в магнитное поле, приложенное вдоль плоскости образца. Полученные временные формы и спектральные зависимости показаны на рисунке 1(a,b). Кроме этого, было показано, что временные формы явно меняют знак при изменении знака магнитного поля (вставка на рисунке 1b).



**Рис. 1.** (a) Временные формы и (b) спектральные зависимости терагерцового сигнала для четырех образцов.

Как видно из временных форм (рис. 1(a)) знак и значения пикового электрического поля для чистого Co и сплава CoPt отличаются от тех, которые наблюдаются для гетероструктур Co/Pt и Co/3-alloys/Pt. Этот результат позволяет сделать вывод о разных доминирующих механизмах генерации ТГц излучения. В случае монослоев Co и CoPt механизм генерации — сверхбыстрое размагничивание. В случае же гетероструктур вклад от этого механизма становится второстепенным. Вместо этого, быстрое изменение намагниченности приводит к инжектированию спинового тока в Pt с его последующим преобразованием в электрический ток, который и излучает ТГц импульс. Еще одним результатом стало наблюдение существенного усиления ТГц сигнала за счет присутствия градиентного интерфейса в образце Co/3-alloys/Pt. Этот результат показывает, что такой интерфейс оказывает существенное влияние на обратный спиновый эффект Холла. Ранее было обнаружено, что такой ин-

терфейс приводит к увеличению взаимодействия Дзялошинского–Мории [3].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-12-00251, <https://rscf.ru/project/23-12-00251>).

## Литература

- [1] Li G., *et al.*, *Physical Review Materials* **3** 8 (2019).
- [2] Buryakov A.M., *et al.*, *Applied Physics Letters*. **123** 8 (2023).
- [3] Park J. *et al.*, *Acta Materialia*. **241**, 118383 (2022).

## Разработка гибридных материалов на основе GaAs нитевидных нанокристаллов и Ni для поглощающих покрытий

В.А. Кузьмин

СПбГЭТУ «ЛЭТИ», Санкт-Петербург, Россия

В последнее время разработка новых композиционных поглощающих покрытий вызывает повышенный интерес, благодаря постоянному совершенствованию радиолокационных систем и систем распознавания различных объектов, а также применению их в микроэлектронике, голографии и других областях науки. При этом создание подобных покрытий длинноволнового диапазона с малым коэффициентом отражения возможно только с применением композиционного материала [1]. На сегодняшний день одним из основных примеров являются поглощающие покрытия на основе ферритных и ферромагнитных наночастиц (НЧ) металлов, которые вводятся в неметаллический материал: смолы, пластмассы или полимеры [2,3]. Однако в таком случае существует возможность образования агломерации НЧ, что может привести к тому, что свойства материала и покрытия будут анизотропны, поскольку в одной области материал будет обеспечивать поглощение электромагнитного излучения (ЭМИ), а в другой может отражать или пропускать его через себя без рассеяния. В связи с этим особое внимание уделяется методам, которые позволяют предотвратить появление агломераций НЧ. Одним из потенциальных является способ, который основан на электрохимическом осаждении металлов на предварительно созданные вертикально-стоящие массивы полупроводниковых нитевидных нанокристаллов (ННК), обладающих хорошо развитой поверхностью, высоким поглощением света видимого и ближнего ИК-диапазона и низким отражением [4]. Данный метод позволяет осуществлять формирование

сплошного равномерного слоя металла на поверхности ННК, в результате создавая коаксиальные гибридные структуры типа металл/квазиодномерный полупроводник. Подобные гибридные материалы могут демонстрировать более эффективное поглощение ЭМИ и рассматриваться как один из альтернативных поглощающих материалов.

В данной работе представлены результаты по разработке гибридных материалов на основе массивов вертикально-стоящих GaAs ННК и Ni для создания на их основе поглощающих покрытий. Синтез массивов GaAs ННК осуществлялся методом молекулярно-пучковой эпитаксии на Si(111) подложках. GaAs для синтеза массивов ННК был выбран, поскольку обладает высоким коэффициентом поглощения [5]. Электрохимическое осаждение Ni на массивы GaAs ННК проводилось в специально созданной гальванической ячейке под воздействием постоянного электрического поля. В качестве электролита использовался сернокислый раствор, основным компонентом которого являлся  $\text{NiSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ . Продемонстрировано, что при достаточно малых значениях тока и короткое время возможно сформировать сплошной равномерный слой Ni на поверхности GaAs ННК. С помощью разработанной методики массивы GaAs ННК с осажденным слоем Ni были инкапсулированы в матрицу полидиметилсилоксана (ПДМС) и отделены от ростовой подложки. В результате была получена тонкая полимерная пленка с инкапсулированными гибридными структурами на основе массивов GaAs ННК и Ni.

Автор благодарит Монастыренко А.О., Березовскую Т.Н., Мохова Д.В., Буравлева А.Д. за помощь в реализации данной работы.

## Литература

- [1] Л.И. Горай, А.Д. Буравлев, С.А. Поняев, Письма в ЖТФ **41** 16–24 (2015).
- [2] P. Yang, W. Ye, H. Ruan, *et al*, Int. J. Mol. Sci. **24** 8620 (2023).
- [3] W. Li, X. Xu, Y. Yang, *et al*, J. Alloys Compd. **176**, 111241 (2023).
- [4] X. Yan, P. Xu, Y. Li, X. Zhang, X. Ren, Opt. Commun. **527** 128991 (2023).
- [5] H. Guo, L. Wen, X. Li, Z. Zhao, Y. Wang, Nanoscale Res. Lett. **6**, 617 (2011).

# Основные свойства гидрированных детонационных наноалмазов

В.И. Куулар

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Возможность гомогенной функционализации поверхности детонационных наноалмазов (ДНА) химическими группами определенного типа представляет особый интерес, так как позволяет получать частицы с различными физико-химическими свойствами. Наноалмаз с углеводородными поверхностными функциональными группами, или гидрированный наноалмаз, обладает положительным зарядом поверхности, образующимся при контакте поверхности гидрированного алмаза с воздухом за счет протекания электрохимических реакций [1]. Подобное взаимодействие предполагает появление  $OH^-$  ионов, локализованных вблизи поверхности частиц, вследствие чего можно предположить, что такие частицы будут вести себя как основания или аниониты в коллоидной форме.

Целью данного исследования является изучение взаимодействия частиц гидрированного наноалмаза с водными растворами кислот и солей для оценки его анионообменных и основных свойств.

В работе показано наличие карбонат- и бикарбонат-ионов в слое адсорбированной воды на поверхности частиц гидрированного ДНА, показано замещение карбонат- и бикарбонат-ионов анионами кислот и солей при помещении алмазных частиц в соответствующие водные растворы. Наличие на поверхности карбонат- и бикарбонат-ионов указывает на появление у ДНА положительного поверхностного заряда в порошке в соответствии с моделью поверхностного переноса заряда (*surface transfer doping*) [2]. Методами инфракрасной и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопий подтвержден анионный обмен между алмазными частицами и водными растворами кислот и солей. На основании результатов потенциометрического титрования частиц гидрированного ДНА проведен расчет величин анионообменной емкости и удельного поверхностного заряда частиц.

Автор благодарит А.Е. Алексенского, А.С. Чижикову, А.В. Швидченко, Е.Ю. Стовягу, Б.Б. Тудупову (ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия), А.Н. Жукова (СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия) в реализации данной работы.

## Литература

- [1] V. Chakrapani. Electrochemical Transfer Doping: A Novel Phenomenon seen in Diamond, Gallium Nitride, and Carbon nanotubes. *ECS Trans*, 2015, 66, 29.
- [2] V. Chakrapani *et al.* Charge transfer equilibria between diamond and an aqueous oxygen electrochemical redox couple. *Science*, 2007, 318, 1424–1430.

## Гидродинамический эффект “храповика” при оптическом возбуждении электронной жидкости

С.О. Поташин

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Электронная гидродинамика (ГД) — одна из чрезвычайно активно развивающихся областей физики конденсированного состояния. Хотя пионерские работы по ГД транспорту электронов и фононов были сделаны очень давно, повышенный интерес к изучению электронных ГД эффектов возник недавно, благодаря изготовлению сверхчистых баллистических электронных структур. Наиболее активно изучается стационарный поток вязкой электронной жидкости в системах конечного размера. Сложность анализа такого потока состоит в существенной роли граничных условий, определяющих трение жидкости о границы образца, которые существенно зависят от свойств границы и, по сути, не очень хорошо известны. Поэтому представляет интерес поиск объёмных эффектов, позволяющих проследить переход в ГД режим.

Ранее мы показали [1], что такой переход может наблюдаться в объёмных оптических экспериментах по конверсии переменного электрического поля в dc ток в пространственно-модулированных системах — так называемый эффект «храповика» (ratchet effect). Ключевое отличие ГД режима конверсии от более изученного режима дрейф-диффузия (ДД) состоит в существенно различной высокочастотной зависимости генерируемого dc тока: медленная зависимость,  $J_{dc} \propto 1/\omega^2$  в ДД режиме и гораздо более резкая зависимость,  $J_{dc} \propto 1/\omega^6$ , в ГД режиме. Оба режима были идентифицированы в эксперименте в хорошем согласии с теорией [1]. В настоящей работе мы изучаем роль термоэлектрических эффектов, которые были отброшены в [1] в предположении, что фононный разогрев слабый:  $\Gamma = E_F \tau / T \tau_{ph} \gg 1$  ( $\tau_{ph}$  и  $\tau$  времена электрон-фононных и -примесных столкновений). Если же  $\Gamma \ll 1$ , то

разогрев становится существенным и приводят к квадратичной высокочастотной асимптотике,  $J_{dc} \propto 1/\Gamma\omega^2$ , даже в ГД режиме. Кроме того, при малых  $\Gamma$  зависимость отклика от частоты становится знакопеременной и возникают асимметричные резонансы Фано. Проект был выполнен при поддержке фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС». Я также благодарю соавторов, которые указаны в [1].

## Литература

- [1] E. Mönch, S.O. Potashin, K. Lindner, I. Yahniiuk, L. Golub, V. Kachorovskii, V. Bel'kov, R. Huber, K. Watanabe, T. Taniguchi, J. Eroms, D. Weiss, and S. Ganichev, *Ratchet effect in spatially modulated bilayer graphene: Signature of hydrodynamic transport*, Phys. Rev. B 105, 045404 (2022)

## Определение спектральных свойств линейных систем с помощью ортогональных полиномов Якоби

И.О. Райков

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

В физике часто встречаются задачи, сводящиеся к исследованию линейных систем. К таким задачам относятся, в частности, поиск собственных состояний квантовых систем или собственных мод малых колебаний атомов. Стандартный подход к таким задачам заключается в диагонализации соответствующих матриц и получении их собственных значений, однако зачастую такие системы обладают большим числом степеней свободы, что требует значительных вычислительных ресурсов. Однако существует метод, получивший название Kernel Polynomial Method (KPM) и позволяющий определять плотность состояний, функцию Грина и другие наиболее значимые физические характеристики в виде разложения по ортогональным полиномам, не прибегая к поиску отдельных собственных значений и собственных векторов [1]. Такой метод позволяет анализировать системы с миллионами степеней свобод без использования суперкомпьютеров, и приобрёл широкое применение в последнее время, в том числе для анализа многослойных аперiodических двумерных систем [2] и одномерного квантового транспорта [3].

В настоящее время широко используется KPM, основанный на разложении по полиномам Чебышева первого рода  $T_n(x)$ , поскольку они позволяют использовать свойства преобразования Фурье для нахождения наилучшей по-



линомиальной аппроксимации. Однако такая аппроксимация имеет корневую расходимость вблизи краёв исследуемого спектрального диапазона. Для ряда систем такое поведение может вносить существенное искажение исследуемых физических свойств. Например, при исследовании фононных систем длинноволновые акустические фононы имеют степенную плотность колебательных состояний, степень которой зависит от размерности пространства.

В данной работе разработана более общая реализация КРМ, основанная на произвольных ортогональных полиномах Якоби  $P_n(\alpha, \beta)(x)$  и позволяющая находить полиномиальную аппроксимацию с произвольной степенной зависимостью на краях спектрального диапазона. Используя свойства полиномов Якоби [4] и известные результаты о задаче Чебышева [5,6], были определены оптимальные с точки зрения спектрального разрешения коэффициенты затухания (применяющееся для гашения осцилляций Гиббса) для чётного и нечётного порядков аппроксимации. Исследованы асимптотическое поведение коэффициентов затухания и точности аппроксимации, и приведены примеры получающихся ядер для конкретных значений  $\alpha$  и  $\beta$ , а также примеры аппроксимации для конкретных систем. Разработанный метод применен для анализа низкочастотных колебательных возбуждений в аморфном кремнии и других неупорядоченных системах.

Автор благодарит Ярослава Михайловича Бельтюкова, а также РФФИ (грант № 22-72-10083).

## Литература

- [1] Weisse A. *et al.* The Kernel Polynomial Method // *Reviews of Modern Physics*. 2006. № 1 (78). С. 275–306.
- [2] Carr S. *et al.* Twistronics: Manipulating the electronic properties of two-dimensional layered structures through their twist angle, *Physical Review B*. 2017. № 7 (95). С. 075420.
- [3] Bertini B. *et al.* Finite-temperature transport in one-dimensional quantum lattice models, *Reviews of Modern Physics*. 2021. № 2 (93). С. 025003.
- [4] Gasper G. Banach Algebras for Jacobi Series and Positivity of a Kernel. *The Annals of Mathematics*. 1972. № 2 (95). С. 261.
- [5] Szegő G. *Orthogonal polynomials* / G. Szegő, American Mathematical Soc., 1939.
- [6] Иванов В.И. Задача Чебышева об экстремальных значениях моментов неотрицательных алгебраических многочленов. *Труды Института математики и механики УрО РАН*. 2020. № 4 (26). С. 138–154.

# Оптические и спин-орбитальные эффекты в сферических нанокристаллах с оболочкой

К.И. Русских

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Исследование энергетической структуры коллоидных нанокристаллов (НК) на основе InP является актуальным в настоящий момент [1,2]. Интерес представляет изменение оптических свойств и характеристик НК за счёт изменения оболочки, окружающей ядро InP. При этом одна и та же оболочка, например ZnSe, может создавать потенциальный барьер разной высоты [2], что влияет на энергетический спектр и волновую функцию (в.ф.) электрона.

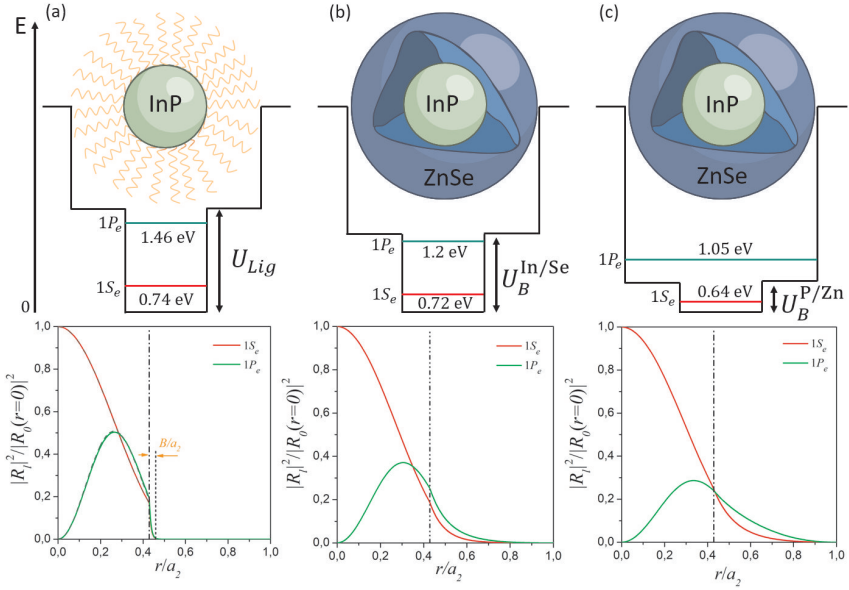
Работа посвящена исследованию энергетических спектров и в.ф. в НК типа ядро/оболочка. Предполагается, что оболочка может состоять как из полупроводникового материала с эффективной массой электрона  $m_B$ , так и из органических молекул (лигандов), которыми пассивируется поверхность НК. В случае лигандов эффективная масса электрона  $m_{Lig}$  может достигать значений больших, чем масса свободного электрона  $m_0$ . Рассмотрен режим сильного размерного квантования с использованием 8-зонной модели Кейна для электрона, которая приводит к зависимости эффективной массы  $m_A(E)$  от энергии электрона внутри НК.

Для описания НК радиуса  $a$ , пассивируемого лигандами, используется обобщённое граничное условие (ОГУ) [3]:

$$R_l^A(r) |_{r=a} = -A \frac{m_{Lig}}{m_A(E)} \frac{dR_l^A}{dr} |_{r=a}, \quad R_l^B(r > a) = 0, \quad (1)$$

где  $A$  - параметр с размерностью длины, независимый от  $a$  и симметрии уровня  $l$ . В области применимости  $A$  равен длине затухания в.ф.  $B = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_{Lig}U_{Lig}}}$  [см. Рис. 1(a)].

Для описания электрона в НК типа ядро/оболочка используются стандартные граничные условия (СГУ) [3] на границе между ядром и оболочкой для конечного потенциального барьера высоты  $U$ , предполагающие равенство радиальных волновых функций и их нормальных компонент скоростей. Внешняя оболочка полагается непроницаемой, т.е. ставятся нулевые граничные условия.



**Рис. 1.** Энергетическая структура и электронная компонента плотности вероятности для НК радиуса  $a_2 = 3.5$  nm для случая (а) ядра InP с радиусом  $a = 1.5$  nm, пассивируемого лигандами с высотой потенциального барьера  $U_{\text{Lig}} = 10$  eV и эффективной массой  $m_{\text{Lig}} = 1.2m_0$ , рассчитанные при помощи СГУ (сплошные линии) и ОГУ (1) (штриховые линии) (б) ядра InP, с оболочкой ZnSe и высотой барьера  $U_B^{\text{In/Se}} = 1.26$  eV (с)  $U_B^{\text{P/Zn}} = 0.77$  eV при  $T = 300$  K с использованием СГУ.

Проведён теоретический расчёт энергий  $E_l$  и в.ф. электронных состояний  $1S_e$  и  $1P_e$  симметрии, характеризующихся значениями орбитального момента  $l = 0, 1$ , соответственно. Расчёт выполнен для сферических НК двух видов: ядро, окружённое лигандами, и ядро/оболочка, в зависимости от высоты барьера  $U$ . Показано, что для случая потенциального барьера  $U_{\text{Lig}}$ , ОГУ хорошо описывает поведение в.ф. для НК, а также является более физичным, ввиду отсутствия затухания огибающей в.ф. на масштабах, сравнимых с межатомным расстоянием  $B/a = 0.037$ . Для случая с высоким потенциальным барьером  $U_B^{\text{In/Se}}$  возможно существование локализованного электронного состояния  $1P_e$  внутри ядра InP, в отличие от той же структуры с меньшим потенциальным барьером  $U_B^{\text{P/Zn}}$ .

Сферическая граница приводит к спин-орбитальному расщеплению уровня

$1P_e$  по полному моменту на  $j = 3/2$  и  $j = 1/2$ . Полученные в.ф. позволяют исследовать тонкую структуру, индуцированную спин-орбитальным взаимодействием, интенсивности внутризонных оптических переходов для НК. Результаты могут быть применены для анализа экспериментальных данных дифференциального, двухфотонного и внутризонного поглощений, электронного спектра. Сделаны выводы о влиянии оболочки в структурах InP/ZnSe. Автор выражает благодарность А.А. Головатенко и А.В. Родиной. Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 23-12-00300.

## Литература

- [1] F. Sousa Velosa *et al.* Adv. Opt. Mater. **10**, 2200328 (2022).
- [2] P. Cavanaugh *et al.* J. Chem. Phys. **159**, 134704 (2023).
- [3] К.И. Русских, А.В. Родина. ФТГ **66**, 1, 110–121 (2024).

## Контролируемое удаление нескольких приповерхностных атомных слоёв в частицах детонационных наноалмазов

А.Д. Трофимук

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

В силу специфичного набора физических и химических свойств частицы детонационных наноалмазов (ДНА) рассматриваются как один из возможных материалов для магнитно-резонансной томографии [1], изготовления полевых эмиттеров [2] и наноразмерных отражателей ультрахолодных нейтронов [3]. Однако развитие ещё одного направления применений ДНА — в качестве функциональной добавки к многокомпонентным композициям — затруднено из-за крайне высокого коэффициента поглощения таких частиц [4]. Из-за высокого коэффициента поглощения гидрозолы, полимерные композиции и прозрачные составы при добавлении частиц ДНА даже в малых количествах начинают существенно темнеть и тускнеть, что может быть непримелимо при изготовлении высокопрочных стёкол, полимерных нитей для 3D-печати и ряда медицинских применений (в частности, при фотодинамической терапии).

На сегодняшний день ясно, что причина высокого показателя поглощения в ДНА кроется в неидеальности структуры нанокристалла, в частности — в отклонении углов и длин связей между атомами углерода относительно идеальной  $sp^3$ -углеродной структуры типа  $Fd\bar{3}m$ . Разрозненные исследования

приходят к различным выводам относительно локализации таких дефектов в частицах ДНА, однако наиболее убедительным кажется исследование [5], в котором авторы с помощью синхротронных методов показали, что наибольшая концентрация такого рода дефектов находится в приповерхностном слое частицы ДНА, причём толщина такого слоя составляет порядка 1 нм.

В данной работе порошок высокочистых частиц ДНА подвергался отжигу без доступа окислителя для осуществления частичного фазового перехода (как показано в [6]). С полученных частиц, представляющих собой смесь  $sp^2$ - и  $sp^3$ -углерода, селективно удаляли  $sp^2$ -углерод. Показано, что такой двухступенчатый подход позволяет сохранить наименее дефектное алмазное ядро и избирательно удалить несколько наиболее дефектных атомных слоёв с поверхности наночастицы.

Продемонстрированные подходы открывают новые пути для получения высокочистых частиц детонационного наноалмаза с низким коэффициентом оптического поглощения. Кроме того, такой подход может быть использован для получения частиц ДНА сверхмалого размера с точностью (оценочно) до 0,5 нм.

Автор благодарит Шестакова М.С., Шаронову Л.В., Кидалова С.В. и Дидейкина А.Т. за всестороннюю помощь в проведении исследования.

Работа выполнена в рамках проекта ФТИ им. А.Ф. Иоффе № FFUG-2022-0012.

## Литература

- [1] Panich AM, *et al.* PVP-coated Gd-grafted nanodiamonds as a novel and potentially safer contrast agent for in vivo MRI. *Magn Reson Med.* 86, 935–942 (2021).
- [2] Reich K.V., *et al.* Determination of an optimal pressure under field emission from diamondlike films. *Tech. Phys.* 53, 261–263 (2008).
- [3] Bosak A. *et al.* Fluorination of Diamond Nanoparticles in Slow Neutron Reflectors Does Not Destroy Their Crystalline Cores and Clustering While Decreasing Neutron Losses. *Materials*, 13, 3337 (2020).
- [4] S.V. Koniakhin *et al.* Evidence of absorption dominating over scattering in light attenuation by nanodiamonds. *Phys. Rev. Res.* 2, 1, 013316 (2020).
- [5] L.Hawelek, *et al.* Transformation of nano-diamonds to carbon nano-onions studied by X-ray diffraction and molecular dynamics. *Diam. Relat. Mater.* 20, 1333–1339 (2011).
- [6] V.L. Kuznetsov, *et al.* Onion-like carbon from ultra-disperse diamond. *Chem. Phys. Lett.* 222, 343–348 (1994).

# Экситон-магнонное взаимодействие в ван-дер-ваальсовом магнитном полупроводнике CrSBr

З.А. Яковлев

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

Недавно семейство исследуемых ван-дер-ваальсовых наноструктур пополнилось новым материалом CrSBr: мономолекулярный слой CrSBr — ферромагнетик типа “легкая плоскость”, а взаимодействие между слоями носит антиферромагнитный характер. CrSBr — прямозонный полупроводник с шириной запрещенной зоны около 1.5 эВ с анизотропной в плоскости слоев дисперсией носителей заряда, а его оптический отклик обусловлен, в основном, экситонами Ванье-Мотта с энергией связи от 100 мэВ и большой силой осциллятора [1,2,3]. В экспериментах [1,4,5] обнаружено взаимодействие между экситонами и магнитной подсистемой этого материала, которое особенно сильно в двухслойной системе. Цель нашей работы — построить микроскопическую теорию этого эффекта.

В рамках исследования рассматривался бислой CrSBr. Исходя из соображений симметрии, построен эффективный гамильтониан магнитной системы в виде билинейной функции векторов намагниченностей слоев  $\mathbf{S}^{(1)}(\mathbf{r})$  и  $\mathbf{S}^{(2)}(\mathbf{r})$ , где  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор в плоскости слоя. Для точечной группы системы  $D_{2h}$  он описывается шестью независимыми параметрами. С помощью преобразования Холштейна-Примакова проведено вторичное квантование и найден энергетический спектр магнонов. В основном состоянии векторы  $\mathbf{S}^{(1)}$  и  $\mathbf{S}^{(2)}$  лежат в плоскости структуры, одинаковы по величине ( $|\mathbf{S}^{(1)}| = |\mathbf{S}^{(2)}| \equiv S$ ) и противоположны по направлению. Дисперсия двумерных магнонов оказывается анизотропной и в пределе малых волновых векторов является параболической.

Анализ показывает, что основной вклад в экситон-магнонное взаимодействие вносит скашивание векторов намагниченности в соседних слоях, при этом на основе экспериментальных данных [1, 4, 5] можно сделать вывод, что гамильтониан экситон-магнонного взаимодействия имеет вид

$$V = 2\Xi S^2 \int d\mathbf{r} \mathcal{X}^\dagger(\mathbf{r}) \mathcal{X}(\mathbf{r}) \cos \frac{\theta(\mathbf{r})}{2}, \quad (1)$$

где  $\mathcal{X}^\dagger(\mathbf{r})$ ,  $\mathcal{X}(\mathbf{r})$  — операторы рождения и уничтожения экситона,  $\theta(\mathbf{r})$  — угол между намагниченностями слоев,  $\Xi$  — константа взаимодействия. В равновесии  $\theta(\mathbf{r}) = \pi$ , возбуждение магнонов приводит к отклонениям  $\theta$  от равновесного значения. Из (1), как и из соображений симметрии, следует, что процессы взаимодействия экситона с магнитной подсистемой являются двухмагнонными.

Пользуясь гамильтонианом (1) в рамках теории возмущений второго порядка были выполнены оценки энергии связи и эффективной массы экситон-магнонного полярона, формирующегося в такой структуре. Развитая теория сопоставлена с имеющимися экспериментальными данными.

Работа поддержана грантом РФФ 23-12-00142.

## Литература

- [1] N.P. Wilson, K. Lee, J. Cenker, K. Xie, A.H. Dismukes, E.J. Telford, J. Fonseca, S. Sivakumar, C. Dean, T. Cao, X. Roy, X. Xu, and X. Zhu, *Nature Materials*, **20**, 1657–1662, (2021).
- [2] J. Klein, B. Pingault, M. Florian, M.-C. Heißenbüttel, A. Steinhoff, Z. Song, K. Torres, F. Dirnberger, J.B. Curtis, M. Weile, A. Penn, T. Deilmann, R. Dana, R. Bushati, J. Quan, J. Luxa, Z. Sofer, A. Alù, V.M. Menon, U. Wurstbauer, M. Rohlfing, P. Narang, M. Lončar, and F.M. Ross, *ACS Nano*, **17**, 5316–5328, (2023).
- [3] F. Dirnberger, J. Quan, R. Bushati, G.M.Diederich, M. Florian, J. Klein, K. Mosina, Z. Sofer, X. Xu, A. Kamra, F.J.García-Vidal, A. Alù, and V.M. Menon, *Nature*, **620**, 533–537, (2023).
- [4] Y.J. Bae, J. Wang, A. Scheie, J. Xu, D.G. Chica, G.M. Diederich, J. Cenker, M.E. Ziebel, Y. Bai, H. Ren, C.R. Dean, M. Delor, X. Xu, X. Roy, A.D. Kent, and X. Zhu, *Nature*, **609**, 282–286, (2022).
- [5] G.M. Diederich, J. Cenker, Y. Ren, J. Fonseca, D.G. Chica, Y.J. Bae, X. Zhu, X. Roy, T. Cao, D. Xiao, and X. Xu, *Nature Nanotechnology*, **18**, 23–28, (2023).

## Взаимовлияние параметров решетки комбинированного буферного слоя $\text{Ca}_{1-y}\text{V}_y\text{F}_2/\text{CaF}_2$ на Si(111)

Е.А. Алексеев

СПбПУ, Санкт-Петербург, Россия

Перспективным направлением современной физики полупроводников является область, связанная с созданием и исследованием структурных и электрофизических свойств топологических изоляторов, имеющих на поверхно-

сти топологически защищенные металлоподобные поверхностные состояния при наличии полупроводниковых свойств в объеме. Одним из представителей данного класса является соединение  $Pb_{1-x}Sn_xTe$  ( $x > 0.35$ ) (или PST). Для практического применения данного соединения важно получение малодефектных пленок с целью уменьшения рассеяния носителей заряда. При выращивании данного соединения методом молекулярно-лучевой эпитаксии возникают проблемы недостаточной гладкости и кристаллического качества слоев. Было показано [1,2], что для получения достаточно гладких пленок PST на Si(111) необходимо использование комбинированного буферного слоя  $BaF_2/CaF_2$ . Однако, данный слой не является оптимальным в силу недостаточного согласования по параметрам решеток и термической нестабильности интерфейсов. С целью дальнейшей оптимизации и обеспечения более плавного перехода по постоянной решетки от  $CaF_2$  к  $BaF_2$  и PST была выращена серия образцов  $Ca_{1-y}Ba_yF_2/CaF_2/Si(111)$  ( $y = 0.5, 0.66$  и  $0.8$ ) и проведен их анализ методами рентгенодифракционного анализа (РДА) и атомно-силовой микроскопии (АСМ). Сравнение морфологии поверхности образцов показало, что при значениях  $y = 0.66$  и  $0.8$  наблюдался послойный механизм роста твердого раствора (ТР), тогда как при  $y = 0.5$  дополнительно проявлялся островковый механизм роста. Также при уменьшении параметра  $y$  возрастала средняя ширина террас, от  $0.1$  до  $0.2$  микрона. Были посчитаны параметры решетки ТР  $Ca_{1-y}Ba_yF_2$ , а также подслоя  $CaF_2$ . Показано, что при увеличении количества бария в ТР растет параметр решетки ТР. Расчет параметров решетки ТР по закону Вегарда показал, что реальное количество кальция, встраиваемое в ТР, в два раза меньше, чем из определяемого по кварцевому толщиномеру соотношения потоков, при этом оно приближается к таковому для объемных кристаллов  $BaF_2$ . Также расчет показал, что слой  $CaF_2$  испытывает напряжение растяжения в плоскости роста (111), и напряжение сжатия в направлении, ортогональном плоскости роста, то есть  $\langle 111 \rangle$ , то есть растет псевдоморфно по отношению к ТР. Следовательно, влияние ТР на подслой  $CaF_2$  не менее значимо, чем влияние подложки Si. Таким образом, изучены поведение параметров решетки и характер релаксации в комбинированном буферном слое  $Ca_{1-y}Ba_yF_2/CaF_2$  на Si(111), и установлен конкурентный характер влияния твердого раствора и подложки на параметр решетки подслоя  $CaF_2$ .

## Литература

- [1] А.К. Кавеев, St. Petersburg. Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, J. Phys. Math., v. 6, 1.1, 2023, p. 158–161.
- [2] А.К. Кавеев, ФТП, т. 56, 7, 2022, с. 642–645



# **Изучение адсорбционных свойств магнитной жидкости, модифицированной малослойным графеном, методом дисперсионной твердофазной экстракции**

Е.А. Богачёва

СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург, Россия

Феррожидкости представляют собой устойчивые коллоидные суспензии магнитных наночастиц в строгом размерном диапазоне (5–15 нм) в жидкостиносителе. Стабильность магнитной оболочки зависит от баланса между притягивающими (ван-дер-ваальсовыми) и отталкивающими (электростатическими) взаимодействиями. Эта стабильность обеспечивается за счет определенного размера частиц, поскольку именно в указанном выше диапазоне частицы обладают суперпарамагнитными свойствами, т.е. не намагничиваются и если убрать магнит, то не притягиваются друг к другу. В правильной ферромагнитной жидкости частицы должны быть стабилизированы, то есть покрыты ПАВ, которое позволит частицам не приближаться на очень близкие расстояния и предотвратить их слипание. Именно такая жидкость является феррофлюидом и не теряет своих свойств со временем, не расслаивается и остается стабильной по всему своему объёму.

Графеновые наноструктуры являются хорошими адсорбентами, поскольку имеют большую удельную поверхность ( $2600 \text{ м}^2/\text{г}$ ), а также высокое содержание кислородсодержащих групп на поверхности (до 30% масс.), однако их применение затруднено, так как сепарирование частиц адсорбента из раствора адсорбата трудоемко, так что даже высокочастотное центрифугирование не позволяет провести полное разделение. Таким образом, целью исследования являлось изучение адсорбционных свойств магнитной жидкости, модифицированной малослойным графеном, полученным в условиях самораспространяющегося высокотемпературного синтеза из целлюлозы, методом дисперсионной твердофазной экстракции [1].

Приготовление магнитной жидкости: в 300 мл воды при 70 налили 4 мл 9% уксусной кислоты — раствор перемешали с помощью мешалки в течение 5 минут при 400 об/мин, затем добавили 10 г хлорного железа и 6 г железного купороса. В полученный раствор добавили 1 г малослойного гра-

фена. При интенсивном перемешивании налили 100 мл нашатырного спирта (ЧДА). Полученный магнетит отделили с помощью магнита, а затем промыли водой 5 раз. Далее было необходимо покрыть частицы стабилизатором — в данном эксперименте в качестве стабилизатора использовалась олеиновая кислота. В отдельной колбе приготовили раствор стабилизатора: 20 мл нашатырного спирта + 1.3 мл олеиновой кислоты с последующим перемешиванием в течение 5 минут. Добавили раствор магнетита в раствор стабилизатора, периодически перемешивая в течение 10 минут. Превратили олеат обратно в олеиновую кислоту, для этого добавили 20 мл 9% уксусной кислоты — уксус нейтрализовал аммиак, среда стала нейтральной и образовалась олеиновая кислота. Затем промыли водой 2 раза и спиртом также 2 раза.

Оценка сорбционных свойств проводилась в зависимости от трех условий: влияние массы адсорбента, т.е. магнетита, а также времени и температуры сорбции. Варьируя условия процесса, получили зависимости адсорбционной емкости от соответствующих параметров ( $T, m, t$ ).

Работа поддержана грантом РНФ 23-79-10254.

## Литература

- [1] Mahrouz A. Farzaneh S. Fabrication of graphene oxide core-shell nanospheres for ferrofluid-based dispersive solid phase extraction as exemplified for Cd (II) as a model analyte // Springer, 2016, 183, p. 1749–1757.

## Влияние геометрических дефектов на добротность связанных состояний в континууме в структуре на основе GST

Н.А. Власов

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

Связанные состояния в континууме (ССК) представляют собой особые решения уравнения Гельмгольца, допускающие существование пространственно локализованных мод, частоты которых лежат в континууме свободных фотонов. Добротность таких мод в структурах, поддерживающих ССК, согласно математической модели является бесконечной, но в реальности наблюдаются так называемые квази-ССК, когда порядок добротности резонанса оказывается достаточно большим, но всё же ограниченным. При изготовлении реальных

структур, поддерживающих ССК, одной из проблем становится настройка оптического отклика после их изготовления. Отдельный интерес в этом ключе представляют собой материалы с фазовой памятью [1]. Такие материалы обладают относительно высокой диэлектрической проницаемостью, которая существенно меняется при переходе от одной фазы материала к другой. Однако при реальном изготовлении структур могут возникать различные факторы, которые влияют на формирование резонанса. Так, например, в статье [2] был рассмотрен двухслойный резонатор, и была показана зависимость добротности квази-ССК от структурного беспорядка, а также локализация поля при внесении беспорядка.

Факторами, влияющими на формирование квази-ССК, являются шероховатости, материальные потери, геометрические дефекты. В данной работе мы исследуем геометрические дефекты, поскольку образцы, которые мы получаем в реальности не являются идеальными, что может влиять на добротность и резонансную частоту. В качестве материала мы выбрали наиболее используемый материал с фазовой памятью — Ge-Sb-Te (GST), способный находиться в аморфной и кристаллической фазе при нормальных условиях. Данный материал нашёл своё применение в перезаписываемых хранилищах данных, управлению свойствами пространственного отклика [3,4]. Также становится важным, что GST подходит для применения в инфракрасном спектре, включая телекоммуникационный диапазон.

Мы проводили численное моделирование метаповерхности из полосок GST, расположенных на стеклянной подложке. Нами были найдены моды квази-ССК в ИК-диапазоне, в том числе в диапазоне телекоммуникационной связи для аморфной фазы GST. После этого, мы внесли геометрические дефекты, заключающиеся в изменении ширины одной из полосок в элементарной ячейке, а также изменении сечения полосок с прямоугольного на трапецевидное, поскольку одной из проблем изготовления структуры является стекание материала. Нами было показано, что добротность квази-ССК падает при изменении ширины одного из структурных элементов. В структуре с изменённым сечением мы нашли моды квази-ССК, однако их резонансные длины волн уже находились в другом диапазоне. Также при переходе к трапецевидному сечению структурного элемента мы наблюдали падение добротности квази-ССК. Таким образом, мы показали, что геометрические дефекты сильно влияют на добротность связанных состояний в континууме в GST-материалах, что стоит учитывать при экспериментальных исследованиях и практическом применении.

## Литература

- [1] A.I. Solomonov *et al.*: Ge-Sb-Te based metasurface with angle-tunable switchable response in the telecom bands. *Phys. Rev. B* 108, 085127 (2023)
- [2] E.E. Maslova *et al.*: Bound states in the continuum in periodic structures with structural disorder. *Nanophotonics* 10, 4313 (2021)
- [3] M. Wuttig *et al.*: Phase-change materials for rewriteable data storage. *Nat. Mater.* 6, 824 (2007)
- [4] M.V. Rybin *et al.*: Optically Reconfigurable Spherical Ge-Sb-Te Nanoparticles with Reversible Switching. *Laser Photonics Rev.* 16, 2100253 (2022)

## ***Ab-initio* исследование зонной структуры сплавов висмут-сурьма, богатых висмутом**

В.А. Герсга

РГПУ им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия

Несмотря на то, что сплавы висмут-сурьма имеют богатую историю исследований, эта система продолжает оставаться источником новых открытий. Так, в кристаллах висмута-сурьмы впервые обнаружено состояние топологического изолятора [1,2]. Исследование кристаллов висмута-сурьмы из первых принципов представляет теоретический и практический интерес, однако данные о таких исследованиях не представлены в полной мере в современной литературе.

*Ab-initio* расчеты проводились с использованием метода теории функционала плотности в рамках GGA для обменно-корреляционного функционала с функционалом PBE, реализованным в коде VASP. Для расчетов использовались ромбоэдрические сверхъячейки размером  $3 \times 3 \times 3$  с различным содержанием сурьмы (0.037, 0.074, 0.11, 0.125, 0.25 и 0.5 ат.% Sb). Энергии обрезания плоской волны и  $k$ -сетка Монкхорста-Пака для каждой ромбоэдрической сверхъячейки были выбраны так, чтобы обеспечить сходимость полной энергии в пределах 1 мэВ. Все расчеты проводились с учетом спин-орбитального взаимодействия.

Согласно полученным результатам расчетов зонного спектра висмута и сплавов висмут-сурьма можно выделить следующие особенности изменения положения экстремумов в зависимости от концентрации сурьмы. Во всем интервале концентраций актуальные электронные экстремумы локализованы в  $L$  точках зоны Бриллюэна, а актуальные дырочные экстремумы изменяют

свое положение от локализации в  $T$  точке к локализации в  $H$  точке соответственно. В диапазоне концентраций от 0 до 0.125 %ат. Sb определяющую роль играют экстремум зоны проводимости в точке  $T$  и экстремумы валентной зоны и зоны проводимости в точке  $L$ . В чистом висмуте наблюдается перекрытие валентной зоны и зоны проводимости в точках  $L$  и  $T$ . Далее при увеличении концентрации сурьмы потолок зоны проводимости в точке  $L_C$  поднимается, а потолок валентной зоны в точке  $T$  и дно зоны проводимости в  $L_V$  поднимаются, что приводит к открытию энергетического зазора при концентрации сурьмы 0.074 ат.%. При дальнейшем увеличении концентрации сурьмы от 0.125 ат.% появляется новый актуальный экстремум в точке  $H$ , которая расположена между  $L$  и  $T$  точками в зоне Бриллюэна. Это приводит к тому, что при концентрации сурьмы от 0.25 ат.% твердый раствор снова становится полуметаллом, так как актуальным становится не прямое энергетическое перекрытие в точках  $L$  и  $H$ . Полученные результаты согласуются с экспериментальными, полученными на основе исследования эффектов Шубникова–де Гааза, де Гааза–ван Альфена и циклотронного резонанса показали [3,4].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №22-22-00850.

## Литература

- [1] J.C.Y. Teo, L. Fu, C.L. Kane, *Physical Review B* **78** 045426 (2008).
- [2] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y.S. Hor, R.J. Cava, M.Z. Hasan, *Nature* **452** 970–974 (2008).
- [3] E.J. Tichovolsky, J.G. Mavroides, *Solid State Communications* **10** 1213–1217 (1972).
- [4] N.B. Brandt, S.M. Chudinov, *Journal of Low Temperature Physics* **8** 339–365 (1972).

## Структурные особенности фторированных графитов на основании их диэлектрических и магнитных свойств

М.А. Гребёнкина

ИНХ СО РАН, НГУ, Новосибирск, Россия

Среди химических модификаций графита интерес представляет фторированный графит, для которого находят применения в таких приложениях,

как газовые сенсоры [1], электрохимия [2] и др. Выделяют предельные фториды графита  $C_2F$  и  $CF$  [3], имеющие определённые структуры, и неопределённые фторграфиты  $CF_x$ , для синтеза которых существует множество методов, позволяющих получать различные степени фторирования [4]. Одними из способов исследования  $CF_x$  являются изучение диэлектрических и магнитных свойств. Разделение вкладов в диэлектрическую проницаемость и магнитную восприимчивость позволяет определить организацию молекул, внедрённых в межслоевое пространство, и распределение атомов фтора вдоль слоёв материала соответственно.

В данной работе были исследованы диэлектрические и магнитные свойства неопределённых фторированных графитов  $CF_x$ ,  $0.04 < x < 0.52$ , с различными внедрёнными молекулами, полученных путём фторирования в парах смеси брома и трифторида брома при комнатной температуре. Измерения диэлектрической проницаемости проводились в частотном диапазоне 1 Гц – 1 МГц при температурах от  $-180^\circ C$  до  $20^\circ C$  методом параллельных пластин. Измерения намагниченности выполнены на СКВИД-магнитометре Quantum Design MPMS в магнитных полях 1 кЭ и 10 кЭ при температурах 1.77–300 К. Полученные результаты показали, что диэлектрическая проницаемость матрицы фторированного графита не зависит от температуры, а её значение увеличивается при уменьшении содержания фтора, и при  $x < 0.3$  ( $CF_x$ ) материалы становятся проводящими. Температурный ход диэлектрической проницаемости определяется вымораживанием движения молекул, образующих внедрённую фазу [5]. Магнитная восприимчивость фторированных графитов образована диамагнетизмом Ланжевена, парамагнетизмом Паули, парамагнетизмом Кюри–Вейсса и орбитальным диамагнетизмом, характерным для графитоподобных структур. Вклад орбитального диамагнетизма уменьшается по мере увеличения содержания фтора и становится незначительным при  $x \geq 0.3$  ( $CF_x$ ), что соотносится с изменением проводящих свойств материалов и связано с изменением размера нефторированных областей. Внедрённая фаза не влияет на орбитальный диамагнетизм. Концентрация парамагнитных центров практически не зависит от степени фторирования и типа внедрённых молекул в рассмотренной серии фторграфитов, однако, для высокофторированных графитов с бромом предполагается увеличение концентрации парамагнитных центров из-за переноса заряда с сопряжённых цепочечных структур на молекулы брома.

Автор выражает благодарность за содействие в подготовке данной работы своим коллегам Д.В. Пинакову, Л.Г. Булушевой и научным руководителям А.В. Окотрубю и А.Н. Лаврову.

Автор благодарит Министерство науки и высшего образования Российской

## Литература

- [1] M. Kolesnik-Gray, V.I. Sysoev, S. Gollwitzer, D.V. Pinakov, G.N. Chekhova, L.G. Bulusheva, A.V. Okotrub, V. Krstic *Adv. Electron. Mater.* **4** 1800073 (2018).
- [2] G.G. Amatucci, N. Pereira *Journal of Fluorine Chemistry* **128** 243–262 (2007).
- [3] L.G. Bulusheva, A.V. Okotrub *New Fluorinated Carbons: Fundamentals and Applications*. Elsevier 177–213 (2017).
- [4] W. Feng, P. Long, Y. Feng, Y. Li *Adv. Sci.* **3** 1500413 (2016).
- [5] M.A. Grebenkina, G.N. Chekhova, D.V. Pinakov, Y.V. Shubin, I.P. Asanov, L.G. Bulusheva, A.V. Okotrub *J. Phys. Chem. C* **127** 6010–6015 (2023).

## Триботехнические свойства наножидкостей (НЖ) на основе индустриального масла, модифицированных малослойным графеном

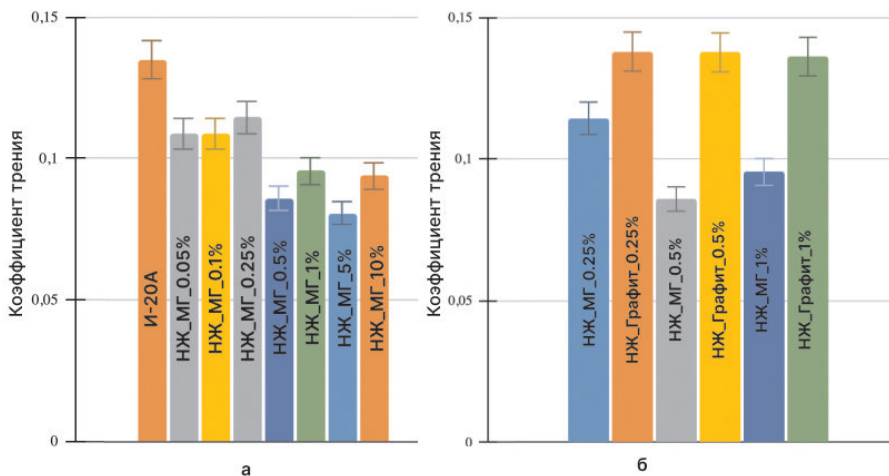
Е.И. Калашникова

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Проблема дефицита энергии несомненна, а значительная часть произведенной энергии расходуется на преодоление силы трения в механических системах [1]. Использование смазочных материалов является не только одним из наиболее эффективных методов контроля трения и износа, но и имеет большое значение для энергосбережения и защиты окружающей среды [2]. Графен предлагается в качестве добавки для уменьшения силы трения в механических системах [3].

В нашей работе для улучшения триботехнических свойств НЖ в качестве модифицирующей добавки использовался малослойный графен (МГ), синтезированный методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза из глюкозы, и графит. Для получения устойчивой суспензии в индустриальном масле марки И-20А МГ подвергали ультразвуковой обработке в течение 10 минут. Концентрация МГ в суспензии составляла 0,05, 0,1, 0,25, 0,5, 1, 5 и 10 масс.%.

Максимальное снижение коэффициента трения по сравнению с исходным маслом составило до 40% при концентрации 0,5 и 5 масс.% (рис. 1а), в то время как для графита только 5% (рис. 1б). Полученная НЖ имеет высокий



**Рис. 1.** Коэффициент трения для НЖ: (а) с разной концентрацией МГ, (б) с разной концентрацией графита в сравнении с НЖ из МГ.

потенциал в качестве эффективного смазочного материала для практического промышленного применения.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 23-79-10254.

## Литература

- [1] K. Holmberg, P. Andersson, Tribology International **47**, 221–234 (2012).
- [2] F. Erdemir, G. Ramirez, Nature **536**, 67–71 (2016).
- [3] D. Berman, A. Erdemir, Materialstoday **17**, 31–42 (2014).

## Анализ влияния поверхностных состояний на зонную структуру тонких пленок титаната бария

М.В. Левичев

СПбГЭТУ, Санкт-Петербург, Россия

В ряде случаев, в тонкопленочных структурах на основе  $\text{BaTiO}_3$  наблюдаются резистивные эффекты, позволяющие реализовать энергонезависимое изменение сопротивления по аналогии с «классическим» мемристором на основе тонких металлооксидных (несегнетоэлектрических) пленок ( $\text{OxRAM}$ ) [1].



Изменение резистивного состояния в тонких сегнетоэлектрических пленках титаната бария обусловлено совокупным вкладом процессов с участием точечных дефектов по анионной подрешетке (кислородных вакансий), поверхностных состояний и сегнетоэлектрической поляризации.

Расчеты из первых принципов являются важным этапом исследований роли поверхностных состояний тонкой пленки сегнетоэлектрика в энергонезависимой перестройке сопротивления. Так называемые «первопринципные методы» (*ab initio*) моделирования предполагают решение квантовомеханических уравнений и могут быть реализованы в различном виде: методом гриновских функций Корринги–Кона–Ростокера [2,3], методом псевдопотенциалов [4,5] или методом теории функционала плотности. Суть последнего метода состоит в переходе от волновой функции к так называемому функционалу плотности и построению из уравнения Шредингера уравнений Кона–Шэма [6,7].

С целью анализа эффектов, обусловленных влиянием поверхностных состояний, в рамках теории функционала плотности были проведены расчеты зонной структуры для пленки титаната бария толщиной 5.2 нм с ВаО-терминацией. Зонная структура для тетрагональной фазы титаната бария моделировалась с применением функционала Пердюю–Беки–Эрнзерхова (PBE) в рамках GGA приближения. Расчет проводился в программном пакете WIEN2k версии 21.1 [8], работающем на 32-ядерном процессоре AMD Ryzen Threadripper 2990WX.

Показано, что поверхность оказывает значительное влияние на формирование зонной структуры, электронных состояний и типа проводимости пленки. Продемонстрировано, что в структуре наблюдается четкое различие химической связи TiO и BaO. Приведен анализ влияния оптимизации и релаксации атомных позиций в ячейке на поляризацию и величины электрофизических параметров пленки BaTiO<sub>3</sub>. Показано, что при релаксации верхние ячейки сильно искажаются и изменяются в размерах, приводя к значительному смещению атомов титана.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 21-79-20073.

## Литература

- [1] D.B. Strukov, G.S. Snider, D.R. Stewart, R.S. Williams, *Nature*, 2008, **453**, 80–83 (2008).
- [2] J. Korryng, *Physica*, **13**, 392–400 (1947).
- [3] W. Kohn, N. Rostoker, *Phys. Rev.*, **94**, 1111–1120 (1954).
- [4] E. Antoncik, *J. Phys. Chem. Solids*, **10**, 314–320 (1959).
- [5] J.C. Phillips, L. Kleinman, *Phys. Rev.*, **116**, 28-7-294 (1959).
- [6] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.*, **136**, B864–B871 (1964).
- [7] W. Kohn, L.J. Sham, *Phys. Rev.*, **140**, A1133–A1138 (1965).

- [8] P. Blaha, K. Schwarz, F. Tran, R. Laskowski, G.K.H. Madsen, J. Chem. Phys., **152**, 074101 (2020).

## Растекание тока в солнечных элементах: трёхпараметрическая трубковая модель

А.Д. Малевская

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, С.-Петербург, Россия

Растекание тока в солнечных элементах является важным аспектом, который требует внимания при разработке и оптимизации высокоэффективных фотоэлектрических преобразователей (ФЭП) излучения большой мощности. Для описания сопротивления растекания применяются различные подходы: численное моделирование с использованием ячеек (звеньев) [1–3], двумерные и трехмерные схемы [4–6], а также модель сосредоточенного эквивалента [7].

Ранее нами была предложена двухпараметрическая трубковая модель [8], основанная на представлениях о линиях или «трубках» тока, траектория которых характеризовалась изломами под прямым углом. За счет этого осуществлялся переход к эквивалентной электрической схеме, в которой сопротивление каждой трубки было представлено двумя слагаемыми: постоянным  $R_V \cdot n$  и зависящим от номера трубки  $R_L \cdot i$  (где  $i$  - номер трубки тока,  $n$  — количество трубок). Преимуществом модели является ее физическая простота и возможность измерения параметров  $R_L$  и  $R_V$  экспериментально.

В данной работе представлено исследование обнаруженного различия экспериментальных вольт-амперных характеристик (ВАХ) ФЭП, конструкция которых отличалась только длиной контактных полосок. Наблюдаемое отличие в ВАХ не согласуется с двухпараметрической трубковой моделью. Решение этой проблемы возможно за счёт расширения модели: введения в неё параметра сопротивления металлических контактов  $R_M$ . При этом, учёт различной длины контактных полосок, осуществляется за счёт разделения контакта на  $K$  частей и применения расчета для каждой части с дополнительным сопротивлением, которое с удалением этой части от токосборной шины увеличивается пропорционально  $R_M$ .

Расширенная модель была применена к двум GaInAs ФЭП с разным шаблоном контактной сетки. Было продемонстрировано, что трёхпараметрическая модель хорошо описывает экспериментальные ВАХ обоих образцов. При

этом, параметры  $R_L$ ,  $R_V$  полагались одинаковыми, а отличия между образцами заключались только в параметре  $R_M$ .

Таким образом, расширенная трубковая модель растекания тока применима к работам по расчёту и оптимизации контактной сетки ФЭП с учётом влияния длины контактных полосок.

Работа выполнена по государственному заданию лаборатории высокоэффективных солнечных фотоэнергосистем, тема: FFUG-2022-0007.

## Литература

- [1] Smirnov G.M., Mahan J.E. Distributed series resistance in photovoltaic devices. Intensity and loading effects // Sol. St. Elect. **23**(10) (1980) p. 1055–1058.
- [2] Fang C., Hauser J. A two dimensional analysis of sheet resistance and contact resistance effects in solar cells // Proc. 13th IEEE Photovolt. Spec. conf. (New York, 1978) p. 1306–1311.
- [3] Арипов Х.К., Румянцев В.Д. Закономерности формообразования вольтамперных характеристик солнечных элементов с распределенными параметрами // ФТП **17** (2) (1983) с. 358–361.
- [4] Steiner M., Philipps S.P., Hermle M., Bett A.W. and Dimroth F. Validated front contact grid simulation for GaAs solarcells under concentrated sunlight // Prog. Photovolt: Res. Appl. **19** (1) (2011) p. 73–83
- [5] Garcia I., Algora C., Rey-Stolle I. and Galiana B. Study of non-uniform light profiles on high concentration III–V solar cells using quasi-3D distributed model // Proc. of the 33rd PVSC (San Diego, USA, May 11–16, 2008) 4922908.
- [6] Galiana B., Algora C., Rey-Stolle I. Explanation for the dark I–V curve of III–V concentrator solar cells, Prog. Photovolt: Res. Appl. v. **16** (2008) p. 331–338.
- [7] De Vos A. The distributed series resistance problem in solar cells // Solar Cells **12** (3) (1984) p. 311–327
- [8] М.А. Мингаиров, В.В. Евстропов, С.А. Мингаиров, Н.Х. Тимошина, М.З. Шварц, Н.А. Каложный, Растекание тока в солнечных элементах: двухпараметрическая трубковая модель **50** (7) (2016) с. 987–992

## Формирование золь детонационных наноалмазов в неводных растворителях на примере диметилсульфоксида

Д.Э. Мартьянов

Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Присущая детонационным наноалмазам (ДНА) уникальная совокупность физико-химических свойств (высокая прочность, рекордная теплопроводность, биосовместимость, химическая инертность кристалла с в то же время реакционноспособной поверхностью) выгодно отличает их от прочих наноструктур и закономерно очерчивает контуры того многообразия областей, в которых они могут применяться. ДНА могут быть использованы в качестве наполнителей в полимерных композитах, для создания новых антифрикционных смазывающих материалов, а также как носители в рамках адресной доставки лекарств и т. д. Однако использование одних только водных растворов ДНА значительно ограничивает области их потенциального применения, этим обстоятельством диктуется необходимость исследований в данном направлении [1].

В данной работе исследовалась возможность получения устойчивых золей окисленных частиц ДНА в неводных растворителях, в частности, в диметилсульфоксиде (ДМСО). Достижение цели требовало увеличения сродства поверхности ДНА к среде растворителя средней полярности, которая осуществлялась путем модификации поверхности частиц ДНА поверхностно-активным веществом бромидом цетримония (*CTAB*) в водной среде.

Успешность проведенной модификации поверхности подтверждается методами инфракрасной спектроскопии, спектрофотометрии, а также электрофоретического рассеяния света. Снижение устойчивости модифицированных частиц ДНА в воде свидетельствует о большей гидрофобности их поверхности. Синхронным использованием методов спектрофотометрии, динамического светорассеяния и электрофоретической подвижности показана большая коллоидная стабильность подвергнутых модификации ДНА в ДМСО во времени в сравнении с исходным образцом.

Полученные результаты дополняют представления о подходах к получению устойчивых коллоидных систем ДНА в неводных средах, а также методах исследования их стабильности и процессов в них протекающих.

Автор выражает благодарность своим учителям Дидейкину А.Т. и Трофимуку А.Д. за постоянный интерес к работе и ценные замечания. Автор благодарит коллективы лаборатории физики кластерных структур ФТИ им. А.Ф. Иоффе и кафедры физической химии СПбГТИ(ТУ), а также инженеринговый центр СПбГТИ(ТУ) за возможность пользования приборной базой и консультации специалистов.

Работа выполнена в рамках проекта ФТИ им. А.Ф. Иоффе № FFUG-2022-0012.

## Литература

- [1] Вуль А.Я., Шендерова О.А. Детонационные наноалмазы. Технология, структура, свойства и применения. СПб: Изд-во ФТИ им. А.Ф. Иоффе, 2016. 384 с.

## Образование мицелл в активной материи на основе скопления роботов

А.А. Молодцова

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

В физике конденсированного состояния активно исследуются свойства скопления частиц, способных преобразовывать запас своей внутренней энергии в направленное движение. К таким средам можно отнести как скопления живых организмов [1], так и коллоидные системы микро- и наночастиц [2]. За счет неравновесного характера в таких системах изменяются особенности протекания фазовых переходов и возникают уникальные явления, например, разделение фаз с различной подвижностью и процессы самоорганизации, которые могут найти своё применение для структурирования объектов на микроуровне [3] и при выполнении скоплением частиц коллективных функций [4].

В настоящей работе экспериментально исследуются скопления из движущихся роботов каплевидной формы. Выбор такой формы частиц обусловлен теоретическим предсказанием образования мицелл из активных частиц асимметричной формы [5].

Нами рассматриваются две реализации скопления из таких роботов. Первая реализация представляет собой киральных роботов, расположенных в круглом барьере на плоскости и двигающихся по замкнутым круговым траекториям, радиус которых много больше размера робота, но меньше диаметра самого барьера. Данное условие позволяет считать, что роботы локально двигаются прямолинейно, а киральность роботов снижает проявление их конденсации на барьере. Вторая реализация включает прямолинейно движущихся роботов, помещенных в параболический потенциал, который предотвращает оседание роботов на границе системы. В эксперименте для изучения образования мицелл, представляющих собой кластеры из восьми роботов, ориентированных заостренными носами к общему центру, варьируются следующие параметры: количество роботов, положение центра масс робота, средняя скорость движения роботов и величина трения между боковыми поверхностями

роботов.

В результате экспериментов сделан вывод, что в системах со смещённым к носу робота центром масс наблюдается мицеллизация, в то время как при положении центра масс ближе к середине робота мицеллизации нет для обеих систем, с киральными и некиральными роботами. Также показано, что чем больше трение между роботами, тем выше эффективность мицеллообразования. Обнаружено, что вероятность образования мицеллы из киральных роботов на плоскости меньше вероятности образования мицеллы из некиральных роботов в потенциале, что может быть связано с нестабильностью кластеров из киральных роботов.

Таким образом, при изменении таких характеристик системы, как трение между роботами, скорость их движения и плотность заполнения системы можно управлять эффективностью образования мицелл. Подобные активно движущиеся частицы с нарушенной симметрией были реализованы на микроуровне [6], что открывает перспективы дальнейших исследований мицеллизации активных асимметричных частиц.

Автор благодарит своих коллег М.К. Бузакова, О.И. Бурмистрова, А.Д. Розенблит, В.А. Смирнова, Д.В. Сенникову, В.А. Порватова, Е.М. Пухтину, А.А. Дмитриева и Н.А. Олехно, вместе с которыми выполнена данная работа. Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 23-73-00060. (<https://rscf.ru/project/23-73-00060>)

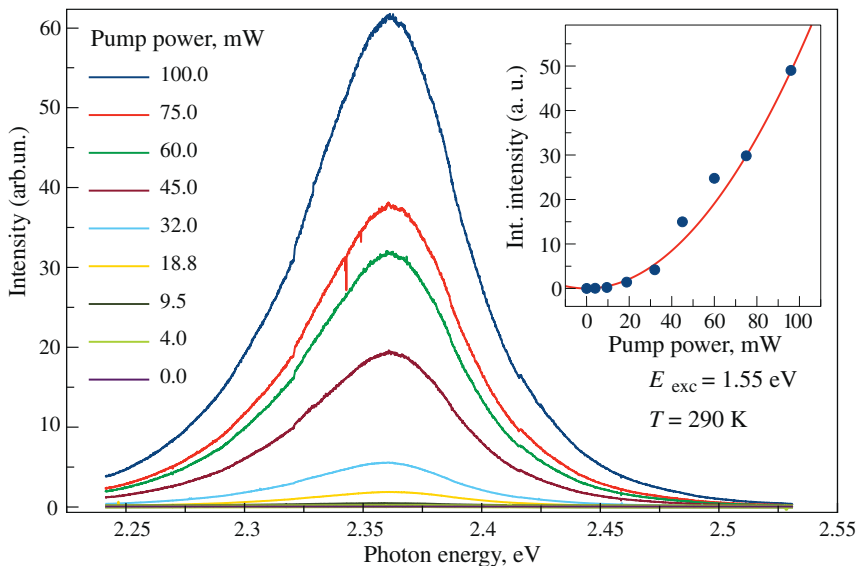
## Литература

- [1] T. Vicsek, A. Zafeiris, *Physics Reports*, **517** 71–1401 (2012).
- [2] K. Villa, M. Pumera, *Chemical Society Reviews*, **48** 4966–4978 (2019).
- [3] M. Trivedi, *et al.*, *Nature Physics*, **18** 1–6 (2022).
- [4] J.F. Boudet, *et al.*, *Science Robotics*, **6** eabd0272 (2021)
- [5] T. Kruglov, A. Borisov, *Particles 2021*, CT07 (2022).
- [6] B. Dai, *et al.*, *Nature Nanotechnology*, **11** 1087–1092 (2016).

## Двухфотонное возбуждение фотолюминесценции нанокристаллов $\text{CsPbBr}_3$ во фторфосфатной матрице

Н.П. Пахольчук  
СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

Благодаря замечательным оптическим свойствам перовскитные материалы на основе  $\text{CsPbX}_3$ , где  $X = \text{I}, \text{Br}$  или  $\text{BrCl}$ , активно исследуются в настоящее



**Рис. 1.** Спектры фотолюминесценции при двухфотонном возбуждении фемтосекундными лазерными импульсами ( $E_{exc} = 1.55 \text{ eV}$ ), в зависимости от мощности накачки. На вставке синими точками приведена зависимость интегральной интенсивности фотолюминесценции от мощности оптической накачки, красной линией показана аппроксимация квадратичной функцией. Измерения проводились при температуре  $T = 290 \text{ K}$ .

время. Нанокристаллы (НК) проявляют яркую фотолюминесценцию (ФЛ) во всем видимом спектральном диапазоне в зависимости от их химического состава и обладают высоким квантовым выходом. Нами были исследованы НК CsPbBr<sub>3</sub>, выращенные путем закалки расплава [1]. Такие НК, в отличие от более исследованных коллоидных перовскитов, не подвержены внешнему физическому и химическому воздействию и сохраняют свои свойства с течением времени. Двухфотонные механизмы возбуждения ФЛ [2] является перспективным с точки зрения изучения оптических нелинейностей. В данной работе мы сообщаем об исследовании ФЛ в НК CsPbBr<sub>3</sub> при двухфотонном возбуждении.

Измерения проводились при возбуждении фемтосекундным лазерным излучением в область прозрачности оптических переходов. На Рис. 1 представлены спектры ФЛ при импульсной лазерной накачке различной мощности при комнатной температуре. Как видно из рисунка энергия оптического перехода

соответствует 2.37 eV, что значительно выше энергии возбуждения 1.55 eV. На вставке к рисунку приведена зависимость интегральной интенсивности ФЛ от мощности накачки. Она имеет квадратичный характер, что подтверждает механизм двухфотонного поглощения. Следует отметить, что двухфотонное возбуждение возможно, если в структуре отсутствует центр инверсии.

Помимо этого, в работе будут представлены другие результаты исследования, в частности, спектр двухфотонного возбуждения ФЛ.

Автор благодарит Санкт-Петербургский государственный университет за финансовую поддержку в рамках грантов № 94030557 и № 106788664.

## **Литература**

- [1] E.V. Kolobkova, M.S. Kuznetsova, N.V. Nikonorov, J. Non-Cryst. Solids. **563**, 120811 (2021).
- [2] K. Wei, Z. Xu, R. Chen, X. Zheng, X. Cheng, and T. Jiang, Opt. Lett. **41**, 3821–3824 (2016).

## **Модифицирование эпоксидных смол малослойным графеном**

Н.Д. Подложнюк

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Применение эпоксидных смол широко распространилось еще в прошлом веке. Они используются в качестве клеев и связующих, при создании углеродных и стеклопластиков, лаков и пластицементов. Для столь широкого круга использования применяют различные способы модификации эпоксидных смол, это может быть как химическая модификация путем добавления различных функциональных групп, так и физическая путем добавления различных наполнителей в объем матрицы.

Одним из перспективных направлений модификации эпоксидных смол является введение различных нанокремниевых материалов. Их добавление в может приводить к увеличению прочности на изгиб и на разрыв [1], увеличению тепло- и электропроводности [2]. Однако использование кремниевых наноматериалов до сих пор ограничивается сложностью и малопродуктивностью методик синтеза [3].

В данной работе для модификации эпоксидной смолы ЭД-20 был использован малослойный графен, полученный методом самораспространяющегося



высокотемпературного синтеза. Данный метод позволяет синтезировать малослойный графен из углеводов без значительных затрат энергии и в больших количествах. Малослойный графен диспергировался в матрице полимера при помощи ультразвуковой ванны при 40 °С в течение 15 минут, также смесь периодически перемешивалась вручную. Затем к полимеру с малослойным графеном добавлялся инициатор (ТЭТА) в соотношении полимер инициатор 10/1, смесь перемешивалась вручную и помещалась в вакуумный шкаф для дегазации. После чего смесь заливалась в формы. По прошествию 24 часов отвержденные образцы помещались в муфельную печь на 1 час при 100 °С для увеличения степени полимеризации.

Прочности на изгиб полученных образцов измерялась трехточечным методом. Износостойкость определялась на машине трения, где верхнее тело вращения представляло собой стальной цилиндр диаметром 10 мм, а нижнее тело вращения представляло собой испытуемый образец диаметром 40 мм. В результате работы путем введения малослойного графена в эпоксидную смолу ЭД-20 удалось увеличить прочность на изгиб эпоксидной смолы на 20% и увеличить ее износостойкость.

Работа поддержана грантом РФФИ 23-79-10254.

## **Литература**

- [1] L.C. Tang, Y.J. Wan, D. Yan, Y.B. Pei, L. Zhao, Y.B. Li, L.B. Wu, J.X. Jiang, G.Q. Lai, Carbon. 60 16–27 (2013)
- [2] A. Allaoui, S. Baia, H.M. Cheng, J.B. Baia, Comp. Scien. and Tech. 62 1993–1998 (2002)
- [3] K.E. Whitener, E. Sheehan, Diam. and Relat. Mat. 46 25–34 (2014)

## **Формирование контактов к полупроводниковым приборам**

А.А. Пуговкин

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, С.-Петербург, Россия

Работа полупроводниковых приборов напрямую зависит от наличия и качества, созданных на них контактов. В зависимости от поставленной цели и предназначения прибора существует множество методов и режимов формирования контактов на полупроводниках, таких как: вакуумнотермическое напыление, магнетронное напыление, электрохимическое осаждение. Поскольку

напыление металлов является дорогостоящим методом формирования контактов, то для увеличения их электрической проводимости целесообразно использовать электрохимическое осаждение.

Для получения качественного покрытия (с низкой шероховатостью и высокой адгезией к полупроводниковой структуре) нужно проводить исследования различных параметров электрохимического осаждения металлов. Процесс электрохимического осаждения может протекать при постоянном, импульсном и реверсивном токе. На итоговый результат влияют следующие факторы: режим осаждения, плотность тока, соотношение времени анодного и катодного процесса (при реверсивном режиме), перемешивание электролита во время осаждения, расстояние между анодом и катодом [1].

Нами исследованы различные параметры процесса электрохимического осаждения серебра из железосинеродистого электролита при прямом и реверсивном токе [2,3]. В качестве образцов использовалась полупроводниковая подложка с напылением золота толщиной 0.2 мкм. Осаждение проводилось либо на сплошную поверхность золота, либо на золото с нанесенной на него маской фоторезиста.

Были исследованы различные параметры осаждения серебра [4]. По полученным данным (толщина слоя, скорость осаждения, шероховатость поверхности), проведено сравнение между режимами осаждения. Было получено, что при использовании реверсивного режима можно добиться значительного уменьшения шероховатости поверхности серебра, а также увеличения планарности на образцах.

Для получения ровных поверхностей, плотность прямого тока должна превосходить плотность обратного в 2–3 раза, а соотношение времени прямого ( $t_D$ ) и обратного тока ( $t_R$ ) должно соответствовать следующему условию:  $\frac{t_D}{t_r} > 10$ .

Таким образом, был разработан режим осаждения серебра, при котором шероховатость и краевой эффект являются минимальными, адгезия шинок устойчивой, а скорость осаждения серебра составила 0.15–0.3 мкм/мин.

В дальнейшем можно продолжить совершенствование использования реверсивного режима вплоть до создания с его помощью блестящих поверхностей методом осаждения.

Работа выполнена по государственному заданию молодежной лаборатории наногетероструктурных излучателей и фотоприемников, тема FFUG-2022-009.

## Литература

- [1] С.С. Кругликов, Н.Е. Некрасова. Гальванотехника и обработка поверхности 1 (2015).

- [2] A.V. Malevskaya, D.A. Malevski, N.D. Il'inskaya, J. Phys.: Conf. Ser. **690** 012039 (2016).  
[3] А.В. Малевская, Н.Д. Ильинская, Д.А. Малевский, П.В. Покровский. ФТП, **56** (3), 376–379 (2022).  
[4] Ю.Д. Гамбург. Электронная обработка материалов **1** (2003).

## **Фотолитография в технологии изготовления полупроводниковых приборов**

А.К. Романчук

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, С.-Петербург, Россия

Одним из этапов создания полупроводниковых приборов является пост-ростовая технология, включающая в себя ряд операций, к которым относятся: создание омических контактов, нанесение диэлектрических покрытий и формирование мезы структуры. Для задания топологии приборов используется метод фотолитографии, заключающийся в изготовлении маски фоторезиста на поверхности твердого тела [1,2].

Тот или иной этап требует разработки разных параметров фоторезистивных масок. В зависимости от целей меняется вид фоторезиста, а также цикл создания рисунка. Вид фоторезиста: негативный или позитивный определяет профиль получаемой маски [3,4]. От вида фоторезиста и даже его марки зависят параметры нанесения, продолжительность и температура сушки, время экспонирования и проявления, длительность задубливания [5,6]. Отклонение от оптимальных параметров ведет к снижению точности топологии маски фоторезиста, к нарушению адгезии и снижению химической стойкости, а, соответственно, к ухудшению параметров получаемого прибора.

Мы проводили исследование негативного фоторезиста марки AZnLOF 2035. Были выявлены соотношения времени сушки при заданной температуре, экспонирования и проявления, при которых происходит улучшение качества фоторезистивного рисунка и создается различный профиль, зависящий от вышеперечисленных параметров. Контроль производился на оптическом микроскопе, а также стилусном профилометре. Также были получены зависимости угла наклона боковой стенки маски от времени экспонирования, сушки и проявления.

Разработанные процессы могут быть использованы при взрывной фотолитографии, а также химическом осаждении металлов.

Работа выполнена по государственному заданию лаборатории высокоэффективных солнечных фотоэнергосистем, тема: FFUG-2022-0007.

## Литература

- [1] Моро У. Микролитография принципы, методы, материалы. Москва "МИР"(1990).
- [2] А.Н. Россоленко, Т.Е. Голикова, В.Н. Зверев Литографии в микроэлектронике. Методическое пособие для студентов ФОПФ МФТИ и описания лабораторных работ в ИФТТ РАН (2017).
- [3] A.V. Malevskaya, D.A. Malevski, N.D. P'inskaya, J. Phys.: Conf. Ser. **690** 012039 (2016)
- [4] R. Andok, A. Bencurova, P. Hrkut *et al.* J. of Electrical Engineering. **64** (6), 371–375 (2013).
- [5] А.А. Жуков, Е.Ю. Ильин, Н.Н. Герасименко. Известия вузов. ЭЛЕКТРОНИКА **20** (4), 440–442 (2015)
- [6] Д.В. Лысич. Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия» **9** (3), 26–36 (2017).

## Параметры энергетического спектра электронов в квантующих магнитных полях в метаморфных гетероструктурах InGaAs/InAlAs

Н.С. Сандаков

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

В рамках настоящей работы были проведены гальваномагнитные исследования метаморфных гетероструктур InGaAs/InAlAs с высоким содержанием In ( $> 85\%$ ) в квантовой яме шириной 14 нм. Измерения продольного  $\rho_{xx}$  и холловского  $\rho_{xy}$  удельных сопротивлений проводились в диапазоне температур  $T = (1.8–35)$  К в магнитном поле  $B$  до 13 Тл при постоянном токе через образец  $I = 1$  мкА. Также исследования проведены при различных углах наклона магнитного поля по отношению к нормали к плоскости двумерного газа при  $T = 1.8$  К.

Эффективная масса электронов определена из осцилляций  $\rho_{xx}$  в диапазоне магнитных полей, где не наблюдается зеемановское расщепление уровней Ландау (УЛ), и амплитуда осцилляций не превышает 10% от  $\rho_0$ . Эффективная масса, полученная по формуле Лифшица–Косевича (ЛК) [1], составила  $m^* = 0.037m_0$ , где  $m_0$  — масса свободного электрона.

Поведение продольного сопротивления в минимумах осцилляций в режиме квантового эффекта Холла (КЭХ) при увеличении  $T$  описывается активационным уравнением Аррениуса [2], что позволяет определить величины

циклотронных и спиновых щелей в спектре УЛ. Обнаружено, что для циклотронных щелей температурная зависимость сопротивления демонстрирует увеличение энергии активации с ростом  $T$ . Так, для спин-расщепленных УЛ (с номером  $N$ ) наблюдается активация электронов не только в соседний вышележащий УЛ со спином "вниз" ( $N + 1 \downarrow$ ) ( $T < 5$  К), но и в следующий за ним со спином "вверх" ( $N + 1 \uparrow$ ) ( $T > 17$  К). Для спин-вырожденных УЛ также наблюдается активация в два вышележащих уровня: с номером  $N + 1$  ( $T < 5$  К) и в следующий за ним  $N + 2$  ( $T > 17$  К). Значения  $g^*$ -фактора, полученные для спиновых щелей  $|g^*| = 10.3 - 16.3$ , много больше, чем таковые, определенные из орбитальных  $|g^*| = 6.6 - 9.5$ .

Измерения в наклонных магнитных полях позволяют оценить анизотропию  $g^*$ -фактора из анализа начала наблюдения спинового расщепления, а также из отношения амплитуд осцилляций согласно формуле ЛК. Определенное из двух вышеописанных методов значение анизотропии совпало и составило  $|g_{\parallel}^* / g_{\perp}^*| = 0.46$  при  $|g_{\perp}^*| = 10.5$ .

Таким образом, из анализа термоактивационного поведения продольного сопротивления в области плато КЭХ получена осциллирующая зависимость значения  $g^*$ -фактора от фактора заполнения, что качественно и количественно согласуется с теоретическими представлениями [3,4], согласно которым  $g^*$ -фактор должен осциллировать вследствие обменного взаимодействия. Полученная анизотропия  $g^*$ -фактора связана с расщеплением состояний легких и тяжелых дырок валентной зоны в результате размерного квантования [5].

Автор выражает благодарность своему научному руководителю С.В. Гудинной, коллективу лаборатории полупроводников и полуметаллов В.Н. Неверову, А.С. Боголюбскому, К.В. Туруткину и М.В. Якунину за помощь в проведении эксперимента и обсуждении полученных результатов; И.С. Васильевскому и А.Н. Виниченко, НИЯУ «МИФИ», за предоставленные образцы. Работа выполнена в рамках Государственного задания по теме «Электрон» Гр. № 122021000039-4.

## Литература

- [1] I.M. Lifshitz, A.M. Kosevich. ЖЭТФ **2**, 636(1956).
- [2] A. Usher, *et al*, Phys Rev B **41**, 1129 (1990).
- [3] T. Ando, Y. Uemura, Phys. Soc. Japan **37**, 1044 (1974).
- [4] С.С. Криштопенко и др. ФТП **49**, 196 (2015).
- [5] Е.Л. Ивченко, А.А. Киселев. ФТП **26**, 1471 (1992)

# Исследование однофотонной фотолюминесценции одинокных InAs/InAlGaAs квантовых точек на 1.55 мкм

А.А. Сахнов

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Реализация алгоритмов квантовой криптографии в линиях оптической связи возможна при кодировании кубитов одиночными фотонами, [1] что делает актуальной задачу разработки эффективных однофотонных источников, излучающих на длине волны  $1.55\mu\text{m}$ , совместимой со стандартным для телекоммуникационной инфраструктуры С-диапазоном  $1.5\text{--}1.6\mu\text{m}$  прозрачности оптоволокна [2]. В последние годы выдающиеся результаты достигнуты в оптимизации структур источников, основанных на внедрённых в нуль-мерный микрорезонатор одиночных InAs/GaAs квантовых точек (КТ), с высокими параметрами яркости и однофотонной чистоты в ближнем Ик-диапазоне [3]. Адаптация подхода на другие материальные платформы технологически трудноразрешима, потому активно развивается технология применения InAs КТ в матрице InAlGaAs, обеспечивающей необходимую энергию квантования в КТ и решёточно-согласованной с подложкой InP [4].

В данной работе приведены результаты исследования оптических свойств одиночных InAs/InAlGaAs квантовых точек, локализованных в фотонных наноантеннах [5], показывающие возможность наблюдения одиночных линий фотолюминесценции (ФЛ) подобных структур при  $T = 8\text{--}55\text{ K}$ , а также демонстрирующих наличие быстрой компоненты ФЛ с высокой степенью однофотонной чистоты.

Исследуемые структуры с КТ InAs в матрице  $\text{In}_{0.522}\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.378}\text{As}$  между широкозонными слоями  $\text{In}_{0.512}\text{Al}_{0.488}\text{As}$ , изготовлены эпитаксиальным методом на подложке InP, где были сформированы массивы наноантенн диаметром  $200\text{--}600\text{ нм}$ . Измерения проводились над образцом в проточном гелиевом криостате при  $T = 8\text{--}60\text{ K}$  в установке конфокальной микроскопии. Спектры ФЛ измерялись на Princeton Inst. SP2500 с ПЗС-линейкой PyLoN-IR при непрерывном надбарьерном возбуждении на  $\lambda = 660\text{ нм}$  и импульсном на  $\lambda = 920\text{ нм}$  и демонстрируют в спектре ФЛ узкую линию в С-диапазоне, различимую до  $T = 55\text{ K}$ , что свидетельствует о наличии в наноантеннах оди-

ночных КТ, стабильно локализующих носители заряда. Наблюдение возможно в определенном диапазоне мощностей из-за немонотонной зависимости интенсивности от мощности возбуждения.

Были проведены измерения кинетики ФЛ и автокорреляционной функции второго порядка при  $T = 8$  К, обеспечивающей максимальную интенсивность излучения, с выделением одиночной линии полосовыми и интерференционными фильтрами. Детектирование осуществлялось на однофотонных детекторах SCONTEL, потоковый сигнал обрабатывался время-цифровым преобразователем Swabian TimeTagger Ultra. Полученные кривые затухания позволяют выделить быструю моноэкспоненциальную составляющую излучения, соответствующую КТ и медленную компоненту фона. Автокорреляционные измерения подтверждают однофотонность быстрой компоненты ФЛ.

## Литература

- [1] A.K. Ekert, 1991. Quantum cryptography based on Bell's theorem. *Physical Review Letters*, 67(6), 661–663 (1991). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.67.661>
- [2] R. Paschotta, article on “Optical Fiber Communications” 2023, <https://doi.org/10.61835/9ec>
- [3] Tomm N., Javadi A., Antoniadis N.O. *et al.* A bright and fast source of coherent single photons. *Nat. Nanotechnol.* 16, 399–403 (2021). <https://doi.org/10.1038/s41565-020-00831-x>
- [4] Wang H. *et al.* Towards optimal single-photon sources from polarized microcavities. *Nat. Photon.* 13, 770–775 (2019).
- [5] Maxim Rakhlin *et al.* Bright Single-Photon Sources for the Telecommunication O-Band Based on an InAs Quantum Dot with (In)GaAs Asymmetric Barriers in a Photonic Nanoantenna 2022 <https://doi.org/10.3390/nano12091562>

## Влияние материальных потерь на добротность связанных состояний в континууме в двуслойной диэлектрической структуре

К.В. Семушев

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

Диэлектрические резонансные структуры активно исследуются в современной метафотонике. Масштабируемость диэлектрических структур и отсутствие потерь, связанных с плазмон-поляритонным резонансом [1], в опти-

ческом диапазоне позволяют реализовывать различные метаструктуры, поддерживающие высокодобротные состояния.

Диапазон возможных применений диэлектрических нанорезонаторов может быть также расширен при рассмотрении связанных состояний в континууме (ССК) [2]. ССК представляют из себя частные решения волновых уравнений с пространственной локализацией поля и обладают бесконечной добротностью. Однако, сами по себе ССК являются математической абстракцией, поэтому принято рассматривать так называемые квази-ССК, которые имеют конечную добротность в связи с присутствием материальных потерь или структурных неоднородностей в резонаторе [3,4].

В данной работе исследуется структура, состоящая из двух слоев периодически расположенных диэлектрических цилиндров. Структура поддерживает ССК типа Фабри–Перо и защищенные симметрией ССК. Исследованы собственные моды в Г-точке при внесении материальных потерь. Так, нами рассмотрены квази-ССК как резонансные состояния в структуре, обладающие конечными значениями коэффициента добротности. Исследована зависимость добротности квази-ССК от угла диэлектрических потерь. Как для квази-ССК типа Фабри–Перо, так и для защищенных симметрией квази-ССК наблюдается стремительное уменьшение добротности при внесении поглощения. Стоит отметить, что изменение резонансных частот является незначительным.

В зависимости от расстояния между слоями можно наблюдать как симметричные, так и асимметричные ССК типа Фабри–Перо. Поскольку ССК типа Фабри–Перо определяются расстоянием между слоями, была рассчитана зависимость добротности от расстояния между слоями. В отсутствие потерь изменение расстояния между слоями приводит к падению добротности как для симметричных, так и для асимметричных ССК типа Фабри–Перо, причем со сравнимой скоростью. При внесении потерь максимум добротности смещается, и максимальная добротность наблюдается при меньшем расстоянии между слоями. Это связано с изменением условий на фазу эффективного отражения слоем цилиндров при внесении поглощения материала.

Конечность резонатора, структурные неоднородности и материальные потери вносят вклад в уменьшение добротности резонаторов. В литературе было показано, что зависимость добротности от параметра структурной неоднородности  $\alpha$  является обратно квадратичной  $Q \propto \alpha^{-2}$  [3,5]. Мы же рассмотрели влияние поглощения и показали, что по отношению к материальным потерям добротность обратно пропорциональна углу потерь  $Q \propto \delta^{-1}$ .

## Литература

[1] H. Yu, Y. Peng, Y. Yang, *et al.*, *npj Comput. Mater.*, 5 1 (2019)



- [2] K. Koshelev, A. Bogdanov, Y. Kivshar, *Science Bulletin*, **64** 836 (2019)
- [3] E.E. Maslova, M.V. Rybin, A.A. Bogdanov, *et al.*, *Nanophotonics*, **10** 4313 (2021)
- [4] M.S. Sidorenko, O.N. Sergaeva, Z.F. Sadrieva, *et al.*, *Phys. Rev. Appl.*, **15** 034041 (2021)
- [5] K. Koshelev, S. Lepeshov, M. Liu, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **121** 193903 (2018)

## Перестраиваемые структуры для управления топологическим зарядом оптического вихря

А.И. Соломонов

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

В конце прошлого века L. Allen и соавторы [1] обнаружили, что фотоны могут обладать орбитальным моментом импульса, помимо спина, таким образом, являясь дополнительной степенью свободы квантового состояния. Одно из самых важных свойств вихревых состояний с различным орбитальным моментом — ортогональность. Это означает, что два состояния с различными значениями  $l$  никогда не могут быть непрерывно преобразованы друг в друга; следовательно, смешанные состояния всегда могут быть разделены. Ортогональность нашла широкое применение в обработке и кодировании информации в свободном пространстве и в оптических коммуникациях как классического, так и квантового характера.

Были продемонстрированы различные подходы к генерации закрученных фотонов. Однако они могут иметь свои ключевые недостатки: фазовые пластинки и метаповерхности требуют высокой точности в изготовлении и многоэтапного процесса в условиях вакуума. Пространственные модуляторы света могут быть достаточно объемными для интеграции в микрофотонные и фотонные интегральные схемы. Более того, в пространственных модуляторах света могут наблюдаться шумы и дрейф значений пикселей со временем, что негативно влияет на стабильность оптического вихря.

Мы предлагаем истинно двухмерные структуры, которые устойчивы к шуму и могут быть изготовлены избегая дорогостоящих этапов производства. Эти структуры основаны на материалах с фазовой памятью и созданы путем локального изменения фазы материала при помощи метода прямой лазерной записи. Материал с фазовой памятью Ge-Sb-Te способен выдерживать многократные циклы записи-стирания, позволяя создавать структуры и быстро изменять их в оптических схемах.

Мы использовали метод голограмм для создания оптических вихрей с топологическим зарядом [2]. Далее, на основе этой голограммы, мы оценили

рассеяние в приближении Борна [3]. Для оценки топологического заряда мы произвели астигматическое преобразование добавляя функцию цилиндрической линзы [4]. После этого мы изготовили голограмму локальным нагревом пленки  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$  методом прямой лазерной записи. Мы наблюдаем хорошее согласие с теоретическими расчетами. Также, мы успешно переписали голограмму на той же подложке GST и продемонстрировали увеличение топологического заряда оптического в той же оптической установке.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 21-79-10214). (<https://rscf.ru/project/21-79-10214/>)

## Литература

- [1] L. Allen, *et al*, Physical Review A **45**, 8185–8189 (1992). (1998).
- [2] J. Arlt, *et al*, Journal of Modern Optics **45**, 1231–1237 (1998).
- [3] M. Rybin, *et al*, Physical Review B **87**, 125131 (2013).
- [4] V. Denisenko, *et al*, Optics Express **17**, 23374 (2009).

## Влияние добавок малослойного графена, полученного в условиях СВС, на характеристики фотополимерных изделий, полученных DLP методом 3D-печати

С.И. Титова

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, СПбГТИ (ТУ), Санкт-Петербург, Россия

DIGITAL LIGHT PROCESSING (DLP) — метод 3D-печати, основанный на послойном отверждении фотополимерной смолы (ФС) под воздействием УФ-света. Этот метод позволяет получать изделия с крайне высокой детализацией, гладкой поверхностью и быстротой печати по сравнению с другими методами аддитивных технологий. Тем не менее изделия из ФС характеризуются низкими значениями прочностных, триботехнических и теплофизических характеристик, что ограничивает их применение. Для улучшения свойств изделий исследователи добавляют в фотополимерные матрицы графеновые наноструктуры, что обусловлено их рекордными характеристиками.

Целью работы является изучение влияния модифицирующих добавок малослойного графена (МГ), полученного в условиях самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС), на прочностные, триботехнические и теплофизические характеристики фотополимерных изделий. В качестве наполнителя использовали МГ, полученный в условиях СВС из крахмала и окислителя нитрата аммония в соотношении 1:1 [1]. Важным преимуществом этого наполнителя является: отсутствие дефектов Стоуна-Уэйлса, практически

неизбежных при синтезе другими методами, поэтому использование этого наполнителя позволяет значительно улучшить комплекс свойств композитов [2]; возможность легко синтезировать наполнитель в большом объеме.

Модифицирование прозрачной фотополимерной смолы (ФС) марки Anycubic проводили путем последовательного добавления равномерных порций МГ в чистую ФС, нагретую до 50°, при постоянном перемешивании верхнеприводной мешалки (500 об/мин). Концентрация добавок составляла от 0,25 до 4 масс.%, что соответствовало от 0,475 до 7,6 об.%. Полученную суспензию выдерживали в ультразвуковом поле (22 кГц) в течение 1 ч при температуре 50° до получения стабильной суспензии, после чего модифицированную ФС охлаждали, помещали в DLP-принтер Anycubic Photon S (Китай) и изготавливали образцы необходимых размеров для измерений по ГОСТ.

Напечатанные образцы подвергали постобработке в УФ-камере в течение 1 ч. Твердость по Бринеллю измеряли на твердомере Метротест ИТБ-3000-АМ (РФ), прочность на изгиб на гидравлическом прессе ПМ-МГ4 (РФ), триботехнические свойства исследовались на универсальной машине трения УМТ-200, теплопроводность по методу лазерной вспышки при 25° на установке DFX-200 (USA).

В результате модифицирования фотополимерной смолы малослойным графеном, 3D-печати DLP методом и постобработки полимерных композитов удалось повысить твердость по Бринеллю и прочность на изгиб в 2 раза, теплопроводность в 6 раз при концентрации МГ 2 масс. %. При дальнейшем увеличении концентрации МГ до 4 масс. % происходит ухудшение перечисленных характеристик. Коэффициент сухого трения в паре стальной стержень-полимерный диск при нагрузке 60 Н практически не зависит от концентрации МГ.

Таким образом, частицы МГ, полученные в условиях СВС-процесса, являются эффективными наполнителями, способными значительно повысить комплекс свойств фотополимерных изделий. Полученные результаты позволяют рассчитывать на расширение спектра применения фотополимерных изделий, например, в приборостроении.

Выражаю благодарность научному руководителю А.А. Возняковскому.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ № 23-79-10254.

## Литература

- [1] A. Voznyakovskii, A. Vozniakovskii, S. Kidalov, *Nanomaterials*. **12**, 4, 657 (2022).
- [2] A. Voznyakovskii, A. Neverovskaya, A. Vozniakovskii, S. Kidalov, *Nanomaterials*. **12**, 5, 883 (2022).

# Получение гидрозоль детонационного наноалмаза с узким распределением по размерам частиц

К.А. Труханова

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Детонационный наноалмаз (ДНА) является перспективным материалом для промышленности и медицины. Особый интерес к ДНА обусловлен совокупностью свойств: биосовместимостью, управляемой химией поверхности, структурой нанокристалла, близкой к объемному кристаллическому алмазу, и характерным размером частиц от 2 до 10 нм [1]. Однако, в процессе синтеза детонационного наноалмаза формируются отдельные частицы и агрегаты с размерами  $\geq 30$  нм. Несмотря на развитые подходы деагломерации и фракционирования частиц ДНА по размерам, даже в высокочистых гидрозольях остаются агломераты [2], что не позволяет использовать ДНА в тех областях, где заданный размер частиц — ключевой параметр технологии.

В данной работе предложена методика получения гидрозольей частиц (средний размер 2.49 нм) с одновременным удалением агрегатов методом центрифугирования из стандартной суспензии ДНА (средний размер частиц 3.03 нм). Помимо простоты реализации и высокого выхода (до 90%) метод обеспечивает более узкое распределение частиц по размерам в сравнении с исходным гидрозолем ДНА.

Получение гидрозольей ДНА малых размеров с узким распределением частиц по размерам позволит эффективно использовать ДНА для сверхтонкой полировки электроники и создания полевых эмиттеров. Кроме того, это расширит понимание особенностей дезагрегирования наноалмазных кластеров.

Автор выражает благодарность Трофимуку А.Д. и Дидейкину А.Т. за чуткое руководство и ценные советы при проведении исследования.

Работа выполнена в рамках проекта ФТИ им. А.Ф. Иоффе № FFUG-2022-0012.

## Литература

- [1] Detonation Nanodiamonds: Science and Applications // A. Vul', O. Shenderova, eds. New York: Jenny Stanford Publishing, (2013). 346 p.
- [2] Aleksenskii A.E. *et al.* Effect of Particle Sizes on the Efficiency of Fluorinated Nanodiamond Neutron Reflectors // *Nanomaterials*. 2021. № 11. 3067.

# Горячие точки и спектры рассеяния диэлектрического димера «кольцо-диск»

А.П. Четверикова

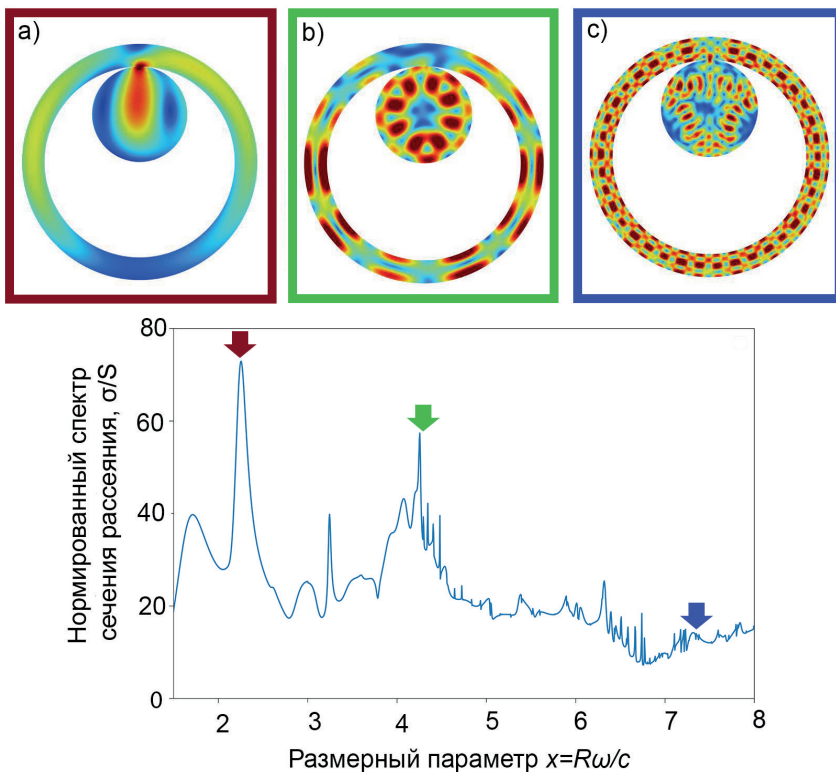
Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

Исследование горячих точек и спектров рассеяния позволяет получать важную информацию об оптических свойствах диэлектрических резонансных структур. Горячие точки — это области сильного электромагнитного поля, которые возникают в межчастичных промежутках микронных размеров при возбуждении структуры электромагнитной волной. В результате может быть успешно реализовано поверхностно-усиленное рамановское рассеяния света (SERS), которое широко применяется в сенсорике и биологической диагностике.

Диэлектрический димер, образованный кольцом с диском внутри, является идеальным объектом для создания и наблюдения горячих точек благодаря наличию микро-полости переменного размера при точечном контакте, либо микронном расстоянии между кольцом и диском. Еще одним легко варьируемым параметром является разница между внутренним радиусом кольца и радиусом диска, что позволяет получать микронные полости различной формы.

В данной работе исследовался димер на основе кольцевого диэлектрического резонатора с внутренним диском той же высоты и диаметром, равным внутреннему радиусу кольца. Были выполнены численные расчеты спектров рассеяния димера и картин распределения амплитуды электрического поля  $|E|$  (Рис. 1).

Ранее было установлено, что низкочастотные спектры рассеяния диэлектрического кольцевого резонатора образованы отдельными галереями, каждая из которых начинается с широкой полосы поперечного резонанса Фабри–Перо и продолжается эквидистантным набором узких азимутальных мод [1]. Галереи различаются по радиальным  $r$  и аксиальным  $z$  индексам фотонных резонансов [2]. Общий характер спектра димера в целом повторяет спектр отдельного кольца. В исследованном спектральном интервале наблюдаются две галереи, первая из которых начинается с широкой полосы в области нормированной частоты  $x \sim 4-5.5$ , а вторая с полосы, имеющей форму контура Фано в области  $x \sim 6-7$ . Различие в радиальных индексах  $r$  четко определя-



**Рис. 1.** (a,b,c) Картины распределения поля и нормализованный спектр сечения рассеяния димера при точечном контакте кольца и диска.

ется по радиальному распределению полей на Рис. 1(b,c). При этом в спектре димера присутствует целый ряд дополнительных узких линий, связанных как с собственными модами диска, так и с резонансами всего димера, как на Рис. 1(b,c).

Благодаря картинам распределения поля [3] мы обнаружили целый ряд горячих точек, среди которых яркостью выделяется точка, соответствующая самой интенсивной полосе рассеяния при  $x \sim 2.24$ , Рис. 1(a). Точка светится в широком спектральном интервале  $x \sim 2.05-3.35$ . Анализ спектров рассеяния для разных положений диска относительно центра кольца позволил установить зависимость между резонансными пиками в спектрах рассеяния и интенсивностью горячих точек. По мере изменения положения кольца и его

смещения к центру, интенсивность поля в зазоре между структурами уменьшается, что видно как по интенсивности пиков на спектре, так и по картинам распределения поля.

Автор выражает благодарность коллегам Н.С. Солодовченко, К.Б. Самусеву и М.Ф. Лимонову, а также Российскому научному фонду, проект № 23-12-00114 (<https://rscf.ru/project/23-12-00114>).

## Литература

- [1] N.S. Solodovechenko *et al.*, Cascades of Fano resonances in light scattering by dielectric particles, *Materials Today*, **60**, 69 (2022).
- [2] A.P. Chetverikova, *et al.*, Radial and axial photonic galleries of dielectric rings, *PNFA*, **57**, 101185 (2023).
- [3] A.P. Chetverikova, *et al.*, Optical «fingerprints» of dielectric resonators, *JOSA B*, **40**, 2146–2152 (2023).

## Алмазные наночастицы как контрастный агент для магнитно-резонансной томографии

А.С. Чижикова

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Улучшение контраста МРТ-изображений является одной из актуальных задач магнитно-резонансной томографии (МРТ). Биосовместимость и химическая инертность алмаза определяет интерес к применению этого вещества для контрастных агентов [1,2,3]. Для создания такого «алмазного контрастного агента» необходимо решить две основные задачи: получить суспензию алмазных наночастиц, стабильную в физиологическом растворе, приемлемом для применения в медицинских целях и существенно изменить времена спин-решеточной ( $T_1$ ) и спин-спиновой ( $T_2$ ) релаксации протонов воды, тем самым увеличивая контраст ЯМР изображения.

В докладе приводятся результаты решения этих задач.

Как оказалось, поливинилпирролидон (ПВП) может быть успешно использован в качестве защитной оболочки, препятствующей возможной коагуляции алмазных наночастиц в крови.

Модификация поверхности алмазной наночастицы ионами парамагнитных металлов позволяет существенно изменить времена релаксации протонов воды.

В работе приводятся результаты исследования процесса модификации алмазных наночастиц ионами гадолиния и марганца, стабильности и эффективности полученных суспензий в качестве контрастных агентов наночастиц в сопоставлении с коммерческим МРТ-контрастным агентом «Дотарем» на основе гадолиния.

Автор благодарит А.М. Panich, М. Salti, А.І. Shames, О. Prager, Е. Swissa (Ben-Gurion University of the Negev, Beer-Sheva, Israel), Ю.В. Кульвелиса (НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ, г. Гатчина, Россия), Е.Б. Юдину, А.Е. Алексенского, А.Я. Вуля (ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия) в реализации данной работы.

Работа выполнена в рамках проекта ФТИ им. А.Ф. Иоффе №FFUG-2022-0012.

## Литература

- [1] C. Henoumont, M. Devreux, S. Laurent, Mn-Based MRI Contrast Agents: An Overview, *Molecules*. 28 (2023) 7275. <https://doi.org/10.3390/molecules28217275>.
- [2] S. Kunuku, B.-R. Lin, C.-H. Chen, C.-H. Chang, T.-Y. Chen, T.-Y. Hsiao, H.-K. Yu, Y.-J. Chang, L.-C. Liao, F.-H. Chen, R. Bogdanowicz, H. Niu, Nanodiamonds Doped with Manganese for Applications in Magnetic Resonance Imaging, *ACS Omega*. 8 (2023) 4398-4409. <https://doi.org/10.1021/acsomega.2c08043>.
- [3] А.М. Panich, М. Salti, А.Е. Aleksenskii, Y.V. Kulvelis, А. Chizhikova, А.Я. Vul', А.І. Shames, Suspensions of manganese-grafted nanodiamonds: Preparation, NMR, and MRI study, *Diam. Relat. Mater.* 131 (2023) 109591. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2022.109591>.

## Разработка технологии селективного травления GST для создания метаповерхностей с высоким оптическим контрастом

И. Шмидт

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время метаповерхности широко используются для управления амплитудой, фазой и направлением света. Однако такие структуры не обеспечивают достаточных степеней свободы, поэтому точная настройка их оптических свойств ограничена. Для решения этой проблемы используются материалы с фазовым переходом, такие как GeSbTe. Это семейство материалов привлекательно для создания перестраиваемых оптических элементов



из-за их энергонезависимого обратимого фазового перехода и выраженного изменения диэлектрической проницаемости. Также ограничивающими факторами для широкого применения метаповерхностей в видимом диапазоне длин волн являются сложность в их изготовлении и необходимость использования дорогостоящего оборудования. В данной работе продемонстрирована новая технология создания метаповерхностей из GST за счет селективного травления.

Для переключения GST из аморфного состояния в кристаллическое был использован метод прямой лазерной записи (DLW) [1,2]. Фемтосекундным лазером были созданы структуры на подложках разных типов: сапфир, ИТО, кремний и стекло. За такой короткий промежуток времени энергия лазерного воздействия не успевает распространиться на большую площадь, и воздействию подвергается площадь поверхности в пределах пятна лазера. С помощью лазерного пучка на поверхности была создана чередующаяся последовательность линий в аморфном и кристаллическом состоянии. В кристаллическое состояние были переведены только те участки, на которых энергия фемтосекундного лазера оказалась достаточной для переключения фазы.

Далее структуры были помещены в 25% раствор гидроксида тетраметил-аммония (ТМАН), чтобы протравить аморфную фазу [3]. Для этого перед травлением они были очищены в ультразвуковой ванне последовательно в деионизированной воде, ацетоне и изопропанолу по 5 минут в каждой жидкости. Затем очищенные подложки помещались в щелочной раствор, и в зависимости от способа нанесения слоя GST и типа подложки время травления различалось от 1 до 30 минут.

Было обнаружено, что структуры на разных типах подложек травились с различной скоростью.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта НИРМиА ФТ МФ Университета ИТМО.

## Литература

- [1] D. Bocek, *et al*, Optics & Laser Technology **141**, 107124 (2021).
- [2] Y. Yu, *et al*, Engineering **4.6**, 779–786 (2018).
- [3] C. Deng, *et al*, Appl. Phys. A **104**, 1091–1097 (2011).

# **Применение функционализированных посредством азотной кислоты углеродных нанотрубок в светоизлучающих электрохимических ячейках на основе перовскита**

Е.В. Бодяго

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

Углеродные нанотрубки (УНТ) широко исследовались с момента их открытия благодаря своим исключительным механическим и электрическим свойствам [1]. Особый интерес представляет высокая электронная подвижность при комнатной температуре в УНТ [2]. За счет своей высокой проводимости УНТ подходят для применения в качестве материала электрода, расширяя применение таких устройств в гибкой, прозрачной и растяжимой электронике.

Конструктивно выделяют одностенные (ОУНТ) и многостенные (МУНТ) углеродные нанотрубки. На электронные свойства УНТ влияют геометрические различия, такие как: дефекты, хиральность, разные диаметры и степень кристалличности трубчатой структуры. ОУНТ обычно имеют меньше дефектов и более высокую степень кристалличности, чем МУНТ, что обеспечивает лучшие электрические и оптические свойства. Дефекты в УНТ образуются в процессе синтеза, ими могут быть аморфный углерод, углеродные наночастицы, остаточный катализатор и другие примеси, которые приводят к ухудшению их свойств, поэтому требуется дополнительная химическая обработка, приводящая к функционализации поверхности УНТ [3]. Функционализированные УНТ могут иметь механические и электрические свойства, которые отличаются от свойств нефункционализированных нанотрубок, что позволяет расширить область их применений.

В данной работе мы демонстрируем применение азотной кислоты для очищения УНТ от дефектов, образовавшихся в процессе синтеза, помимо этого в следствие такой обработки УНТ происходит функционализация их поверхности с образованием карбоксильных и карбонильных групп. Привлекательным является применение функционализированных УНТ в качестве электрода в электрохимических ячейках на основе перовскита, так как

углеродные материалы химически стойкие и такой электрод не демонстрирует никакого химического разложения в результате реакции с галогенами из перовскита. В данной работе мы демонстрируем, что карбоксильные и карбонильные группы образованные в процессе функционализации поверхности МУНТ улучшают адгезионные свойства [4] и снижают инжекционные барьеры, что приводит к лучшим характеристикам светоизлучающих устройств. Однако увеличение времени обработки азотной кислотой УНТ увеличивает образование кислородосодержащих функциональных групп, приводящих к низким электрическим свойствам УНТ, аналогично графену и оксиду графена. Такой подход демонстрирует отличные характеристики LEC с общей прозрачностью до 60%, яркостью 1625 кд/м<sup>2</sup> и токовой эффективности 3,6 кд/А.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 21-79-10214 (<https://rscf.ru/project/21-79-10214/>).

### **Литература**

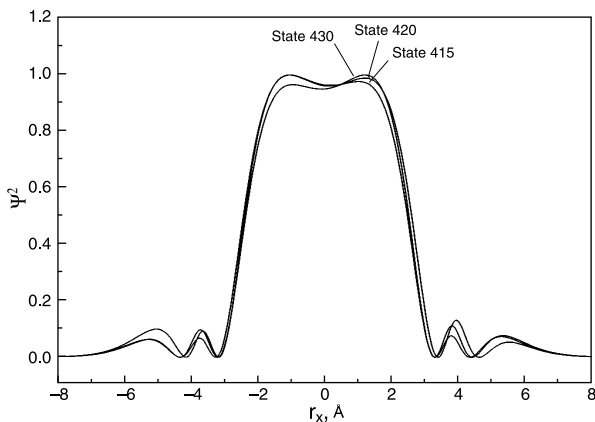
- [1] R. Baughman, *et.al.*, *Science*, **297**, 787–792 (2002).
- [2] M. Fuhrer, *et.al.*, *Nano letters* **2**, 755–759 (2002).
- [3] M. Burghard, *et.al.*, *Small* **1**, 1148–1150 (2005).
- [4] T. Simmons, *et.al.*, *ACS nano* **3**, 865–870 (2009).

# Система метастабильных объемно-локализованных электронных состояний в положительно заряженных полупроводниковых одностенных углеродных нанотрубках

С.А. Вотяков

Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук

Суператомные молекулярные орбитали (SAMO) или объемно-локализованные электронные состояния, отличающиеся от хорошо изученных поверхностно-локализованных состояний, были обнаружены при возбуждении молекул C60 и C70 фемтосекундными и пикосекундными импульсами лазера низкой интенсивности [1,2], а также теоретически показаны с помощью теории функционала электронной плотности (DFT) [3]. Теоретически была предсказана аномальность времени жизни таких состояний в фуллерене [4].



**Рис. 1.** Одномерное поперечное сечение нормированных квадратов волновых функций конечной заряженной на +5 ОУН типа (10,0). Энергии SAMO-состояний 430, 420, 415 соответственно равны 4,86 eV, 4,30 eV и 3,71 eV. Центр трубки находится в 0, радиус трубки 4 Å.

В данной работе с помощью численного квантового моделирования (DFT)

теоретически изучены объемные состояния в полупроводниковых одностенных углеродных нанотрубках (ОУН), которые при зарядке стабильны. Показано, что в центре трубки появляется яма, глубина которой увеличивается при увеличении положительного заряда. Это связано с тем, что общий потенциал включает в себя кулоновский потенциал, который можно варьировать посредством зарядки структуры [5].

В связи с этим, на ряду с хорошо изученными поверхностно-локализованными состояниями, появляются состояния, локализованные в объеме цилиндра. С использованием компонент электрического дипольного момента перехода было предварительно оценено время жизни объемных состояний в сравнении с временем жизни обычных поверхностных состояний. Время жизни SAMO оказалось как минимум на порядок больше ( $10^{-6}$  с) времени жизни поверхностных состояний.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда, проект № 21-72-10164.

## Литература

- [1] J. Zhao, M. Feng, J. Yang, H. Petek, ACS Nano **3** 853–864 (2009).
- [2] J.O. Johansson, G.G. Henderson, F. Remacle, E.E.B. Campbell Phys. Rev. Lett. **108** 173401 (2012).
- [3] H. Li, B. Mignolet, Z. Wang, K.J. Betsch, K.D. Carnes, I. Ben-Itzhak, C.L. Cocke, F. Remacle, M.F. Kling, JPC Letters **7**, 4677–4682 (2016).
- [4] R.V. Arutyunyan, A.D. Vasiliev, Y.N. Obukhov, A.V. Osadchy Journal of Nanomaterials **2019**, 1–4 (2019).
- [5] A.V. Osadchy, V.V. Savin, L.A. Savina, V.A. Chaika, J. Optoelectron. Adv. M. **23** 327–330 (2021).

## Структурные и люминесцентные свойства кубической керамики $ZrO_2$ - $HfO_2$ - $Y_2O_3$ - $Eu_2O_3$ , выращенной методом сосаждения

П.А. Дементьев, Е.В. Дементьева, А.А. Шакирова, К.Н. Орехова, М.В. Загорянская

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

В последнее время важными проблемами дозиметрии становятся задачи, связанные с утилизацией и иммобилизацией ядерных отходов, анализом по-

следствий масштабных радиационных аварий и экологических катастроф. Широкое распространение для указанных задач получили термолюминесцентные дозиметры. Одной из важных проблем в настоящее время является разработка радиационно-стойких термолюминесцентных дозиметров, позволяющих измерять высокие дозы ионизирующего излучения.  $ZrO_2-Y_2O_3-Eu_2O_3$  широко исследуется в качестве материала для термолюминесцентной дозиметрии, однако данный материал прозрачен для нейтронов. В свою очередь гафний хорошо поглощает нейтроны и его добавление позволяет расширить применимость данного материала в дозиметрии. Соответственно, одним из возможных материалов для создания радиационно- и химически стойких дозиметров является керамика  $ZrO_2-HfO_2-Y_2O_3-Eu_2O_3$ .

В данной работе исследованы керамики  $ZrO_2-HfO_2-Y_2O_3-Eu_2O_3$  с различным соотношением  $N_{Hf}/(N_{Zr}+N_{Hf})$  и изучено влияние содержания гафния на их структуру, оптические и люминесцентные свойства. Было определено, что полученные керамики состоят, в основном из зерен размером 4–6 мкм, с областями включений более мелких — 100–300 нм — зерен. Было показано также, что дополнительный отжиг керамики в атмосфере Ar приводит к изменению катодолюминесценции как раз в области мелких зерен.

Продемонстрировано влияние состава на оптическую ширину запрещенной зоны. Показано, что переход зона–зона — не прямой и оптическая ширина запрещенной зоны зависит от соотношения  $x=N_{Hf}/(N_{Zr}+N_{Hf})$  следующим образом:  $E_g=4.9+0.12x+0.25x^2$ . Полученные спектры КЛ показали, что увеличение содержания гафния не влияет на положение и количество наблюдаемых полос в спектре люминесценции, а также на особенности их возбуждения. В проведенной работе было показано, что среди синтезированных образцов образцы с содержанием гафния  $x = 0, 5$  и  $0,77$  обладают термолюминесцентными свойствами, подходящими для термодозиметрии. Термолюминесцентные кривые данных образцов при температуре выше 300 К имеют один пик и характерное время высвечивания ловушек составляет 180 часов. Наибольшим квантовым выходом при возбуждении высоких переходов обладают образцы с  $x = 0, 2 \div 0, 8$ .

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-23-00465, <https://rscf.ru/project/23-23-00465>).

# Исключительные точки в собственных оптических модах димеров частиц из диэлектрических и полупроводниковых материалов

А.А. Дмитриев

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

Эрмитовость гамильтониана гарантирует его диагонализуемость и существование ортогонального набора собственных векторов. В общем же случае, когда гамильтониан неэрмитов, его собственные векторы не ортогональны, а в некоторых точках в пространстве параметров системы они оказываются параллельными. В этих точках, которые называют *исключительными точками*, происходит одновременное вырождение собственных значений и собственных векторов, а гамильтониан не может быть диагонализирован — вместо этого он приводится к виду жордановой клетки [1].

Из-за радиационного затухания, собственные частоты, соответствующие мультипольным гармоникам в диэлектрических наночастицах, являются комплексными. В случае, когда такие частицы объединены в димер, обмен энергией электромагнитного поля между ними происходит также через окружающее пространство — из-за этого собственные моды описываются уравнением типа уравнения Шрёдингера  $\hat{H}|\psi\rangle = \omega|\psi\rangle$ , в котором гамильтониан является как раз неэрмитовым:

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} \omega_1 - i\gamma_1 & g(\omega) \\ g(\omega) & \omega_2 - i\gamma_2 \end{bmatrix},$$

где  $(\omega_{1,2} - i\gamma_{1,2})$  — комплексные собственные частоты каждой из частиц в димере, а  $g(\omega)$  — коэффициент взаимодействия между частицами, являющийся комплексной величиной [2].

В данной работе рассматриваются исключительные точки, образованные взаимодействием дипольных и квадрупольных резонансов в димерах диэлектрических наночастиц различной формы. В димере сфер радиуса  $R$  из стекла с показателем преломления  $n = 1.55$ , центры которых находятся друг от друга на расстоянии  $8.76R$ , продемонстрировано возникновение исключительной точки несмотря на отсутствие контраста между сферами — то есть, при  $\omega_1 = \omega_2$  и  $\gamma_1 = \gamma_2$ . Доказано, что данные исключительные точки возникают только когда есть зависимость коэффициента взаимодействия  $g(\omega)$  от частоты.

ты — в результате чего уравнение на собственные частоты становится трансцендентным [3]. Наличие подобных исключительных точек подтверждено численным моделированием в димерах сфер из стекла, конечных цилиндров из кремния с соотношением высота–диаметр 1:1, продольно-ориентированных нановискеров из кремния с длиной, равной пяти радиусам, и нанокубов из кремния.

Также для димеров бесконечных цилиндров, сфер, и димера бесконечных заполненного и полого цилиндров, были найдены условия, при которых они описываются гамильтонианом, обладающим свойством  $P$ -псевдоэрмитовости  $\hat{H}^\dagger = P H P^{-1}$ , где  $P$  — оператор чётности, матричные элементы которого равны  $P_{ij} = 1 - \delta_{ij}$ . Для каждого димера найдена область параметров, при котором спектр гамильтониана становится чисто вещественным [4].

Помимо этого, при помощи численного моделирования, в димере бесконечных цилиндров найдена исключительная точка, возникающая в результате взаимодействия квадрупольных мод цилиндров.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю М.В. Рыбину. Работа поддержана грантом РФФИ № 21-9-10190.

(<https://rscf.ru/project/21-79-10190>)

## Литература

- [1] Ş.K. Özdemir, S. Rotter, F. Nori, L. Yang, *Nature Materials*, **18**, 783–798 (2019)
- [2] A.A. Dmitriev, M.V. Rybin, *Physical Review A*, **99**, 063837 (2019)
- [3] A.A. Dmitriev, M.V. Rybin, *Physical Review A*, **108**, 013518 (2023)
- [4] Дмитриев А.А., Барышникова К.В., Рыбин М.В., *Письма в ЖЭТФ*, **117** (11), 808–813 (2023)

## Формирование 3D–2D гетероструктур с монослойными квантовыми ямами GaN/AlN методом двухстадийного плазменного и химического травления

Д.М. Колесникова, Д.С. Березина, Ю.А. Салий, Ю.М. Задиранов,  
И.П. Смирнова, С.И. Трошков, А.Н. Семенов, Д.В. Нечаев,  
Е.А. Европейцев, М.М. Кулагина, В.Н. Жмерик  
ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия



Упорядоченные массивы 3D наноструктур с одиночными квантовыми ямами в системе материалов (Al,Ga)N активно исследуются для создания на их основе эмиттеров одиночных фотонов в ультрафиолетовом-С диапазоне. На основе таких эмиттеров с диаметром активной (светоизлучающей) области  $< 100$  нм возможно создание квантовых регистров для квантовых компьютеров. Также они перспективны для развития новых методов квантовой криптографии, обеспечивающих больший уровень безопасности в сравнении с классическими методами криптографии. Уникальной чертой приборов на основе соединений (Al,Ga)N является возможность их работы при высоких температурах — вплоть до комнатной. В большинстве работ для формирования 3D наноструктур используются нанолитографические методы создания масок, включая электронно-лучевую литографию и наноиmprинтинг. Эти методы хотя и обеспечивают необходимое пространственно-селективное травление исходных планарных структур, но имеют ряд недостатков по сравнению с оптической литографией. В первую очередь они связаны с малыми площадями обрабатываемых структур для электронной литографии и ограниченным ресурсом использования матриц наноиmprинтинга.

В данной работе исследовалось получение упорядоченных массивов наностержней AlN диаметром до 100 нм с излучающими одиночными 2D-квантовыми ямами (КЯ) GaN/AlN, выращенными с помощью плазменно-активированной молекулярно-пучковой эпитаксии. Для этого разработана технология двухстадийного top-down плазменного и последующего химического (жидкостное) травления слоев AlN на подложках с-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> с исходной маской, полученной с помощью стандартной оптической литографии.

При проведении первичного плазменного травления исходных планарных слоев AlN толщиной 2 мкм в чистой хлорной плазме были получены микростержни AlN с высотой 1 мкм и диаметром около 2 мкм. Угол наклона боковых стенок этих стержней составил менее 20 градусов, в то время как при травлении в треххлористом боре этот угол наклона превышал 30 градусов. Последующее жидкостное травление AlN микростержней проводилось в 10-процентном растворе KOH в диапазоне температур от 60 до 90 °С, что обеспечило варьирование скорости травления AlN(1–100) от 20 до 60 нм/мин соответственно. Важно, что при этом полностью отсутствовало травление полярных плоскостей AlN(0001). Таким образом удалось достичь минимального диаметра наностержней 100 нм при их неизменной высоте 1 мкм. В докладе обсуждаются основные физико-химические процессы взаимодействия плазменных и химических хлор-содержащих реактантов с различными кристаллографическими поверхностями AlN, обеспечивающих анизотропное и селективное травление этого материала.

В докладе приводятся результаты измерений спектров микрофотолюминесценции наностержней AlN с минимальным диаметром 100 нм и содержащих монослойные квантовые ямы GaN/AlN с номинальной толщиной 0.37 нм. С помощью этих измерений оценивается поверхностная плотность излучательных центров в этих наностержнях равная  $\sim 10^{-11}$  см<sup>-2</sup>. Более того, измерения временных и температурных зависимостей спектров микрофотолюминесценции позволяют связать наблюдаемое излучение в диапазоне 234–236 нм с одиночными экситонами, локализованными на потенциальных неоднородностях в монослойных квантовых ямах GaN/AlN.

## **Сенсор на основе суперрезонансных мод повышенной чувствительности к изменениям системы**

А.А. Кутузова

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

В последнее время связанные состояния в континууме (ССК) [1] привлекли большое внимание в диэлектрической фотонике как альтернативный способ достижения очень высокой добротности генерации излучения. Однако идеальные ССК невозможны и бесполезны, поскольку они не взаимодействуют с модами свободного пространства. В технологически реализуемых резонаторах можно наблюдать квази-ССК или суперрезонансные моды [2], имеющие аналогичный механизм возникновения и высокую добротность.

В тоже время важно иметь возможность управлять добротностью, что позволит разумно проектировать реальные оптические устройства. Большинство используемых метаповерхностей, поддерживающих защищенные симметрией ССК, демонстрируют предсказуемый и хорошо известный обратно-квадратичный закон зависимости добротности от параметра асимметрии  $Q \sim \alpha^{-2}$  [3]. Однако для различных приложений требуются определенные, наиболее удобные зависимости добротности от параметра асимметрии. Создание оптических сенсоров и детекторов [4–7], где важно увеличивать чувствительность приборов при приближении к резонансу, требует регулирования степени роста добротности при понижении симметрии структуры для увеличения точности детектирования молекул. Крайне важно повысить чувствительность, сохраняя при этом высокие значения добротности и способность датчика отслеживать малейшие изменения показателя преломления окружающей среды.

Мы применяем новую теорию [8] для разумного проектирования систе-

мы датчиков показателя преломления с контролируемой чувствительностью на основе метаповерхности, поддерживающей защищенные симметрией ССК. Мы предлагаем использовать продуманные структуры полностью диэлектрических кремниевых дисков с отверстиями, заполненными чувствительным материалом, который является либо аналитом, либо вспомогательным веществом, восприимчивым к изменениям системы, таким как: температура и показатель преломления. Нарушение симметрии обеспечивает достижение сверхчувствительного восприятия и исследования молекул в терагерцовом диапазоне.

Мы определили, какие мультиполи должны взаимодействовать, чтобы добиться наиболее сильной зависимости добротности. Воспользовавшись изученными конфигурациями метаповерхностей, мы обеспечим закон зависимости добротности от параметра асимметрии  $Q \sim \alpha^{-x}$ , где значение  $x$  меньше 2, и сможем управлять добротностью предлагаемого датчика. Мы демонстрируем компьютерное моделирование спектров пропускания и отражения метаповерхностей выбранных конфигураций при изменении диэлектрической проницаемости аналита, которые подтверждают более быструю зависимость добротности от параметра асимметрии. Мы считаем, что наш сверхчувствительный датчик с высокой производительностью и чувствительностью представляет собой отличную платформу для температурных сенсоров, биосенсоров и сенсоров водорода.

Я благодарна М.В. Рыбину за консультации, помощь и поддержку при выполнении исследований. Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 20-79-10316. (<https://rscf.ru/project/20-79-10316>)

## Литература

- [1] C.W. Hsu, B. Zhen, A.D. Stone, J.D. Joannopoulos, M. Soljačić, *Nature Rev. Mater.* **1** 16048 (2016).
- [2] S. Han, L. Cong, Y.K. Srivastava, B. Qiang, M.V. Rybin, A. Kumar, R. Jain, W.X. Lim, V.G. Achanta, S.S. Prabhu, Q.J. Wang, Y.S. Kivshar, R. Singh, *Adv. Mater.* **31** 1901921 (2019).
- [3] Koshelev, Kirill and Lepeshov, Sergey and Liu, Mingkai and Bogdanov, Andrey and Kivshar, Yuri, *Phys. Rev. Lett.* **121** 193903 (2018).
- [4] Saadatmand, Seyedeh Bita and Ahmadi, Vahid and Hamidi, Seyedeh Mehri, *Scientific Reports* **13** 1 20625 (2023)
- [5] Tan, Thomas CaiWei and Srivastava, Yogesh Kumar and Ako, Rajour Tanyi and Wang, Wenhao and Bhaskaran, Madhu and Sriram, Sharath and Al-Naib, Ibraheem and Plum, Eric and Singh, Ranjan, *Adv. Mat.* **33** 27 2100836 (2021).
- [6] A. Tittl, A. Leitis, M. Liu, F. Yesilkoy, D.-Y. Choi, D.N. Neshev, Y.S. Kivshar, H. Altug, *Science* **360** 1105–1109 (2018).

- [7] F. Yesilkoy, E.R. Arvelo, Y. Jahani, M. Liu, A. Tittl, V. Cevher, Y. Kivshar, H. Altug, *Nature Photon.* **13** 30 (2019).
- [8] Kutuzova, Aleksandra A. and Rybin, Mikhail V., *Phys. Rev. B.* **107** 19 195108 (2023)

## **Гибридная платформа GST-перовскит для динамического управления интенсивностью фотолюминесценции**

О.М. Кущенко

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

В последние годы галогенидные перовскиты привлекают внимание исследователей из-за их перспективности в области оптоэлектроники и фотовольтаики. Этот материал обладает уникальными характеристиками, такими как высокий квантовый выход фотолюминесценции, дешевизна, простота синтеза и осаждения, а также возможность регулирования длины волны люминесценции [1]. Эти особенности открывают перспективы использования галогенидных перовскитов в солнечных элементах, фотодетекторах, светоизлучающих устройствах и лазерах [2]. Один из ключевых параметров, влияющих на работоспособность этих устройств, — внешний квантовый выход фотолюминесценции перовскита. До сих пор контроль над этим параметром удавалось достичь с помощью инженерии дефектов, регулирования морфологии или пассивации [3]. Данные методы позволяют настраивать квантовый выход на этапе синтеза, однако полностью управляемое переключение данного параметра в галогенидных перовскитах достигнуто не было. В данной работе впервые продемонстрирована возможность многократного локального переключения внешнего квантового выхода фотолюминесценции галогенидного перовскита. Для достижения данной цели был использован материал с фазовым переходом  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ , также известный как GST.

Для начала пленка аморфного GST толщиной 100 нм была нанесена на сапфировую подложку методом электродиспергирования [4]. Затем пленка была частично переведена в кристаллическую фазу методом прямой лазерной записи. В ходе данного метода лазерное излучение фокусируется на образце и локально нагревает его, достигая перевода GST в кристаллическую фазу согласно заданному паттерну. На следующем этапе на подложку была нанесена пленка галогенидного перовскита ( $\text{CsPbBr}_2\text{Cl}$ ,  $\text{CsPbBr}_3$  или  $\text{CsPbBr}_2\text{I}$ )

методом центрифугирования, и были изучены фотолюминесцентные свойства полученной структуры: измерены спектры фотолюминесценции перовскита на кристаллической и аморфной фазах GST, а также соотношение этих величин для каждого перовскита. Для  $\text{CsPbBr}_2\text{Cl}$  отношение составило 23%, для  $\text{CsPbBr}_3$  — 31%, для  $\text{CsPbBr}_2\text{I}$ —24%. Так как наибольшее значение соответствует бромовому перовскиту, а также этот перовскит является наиболее стабильным среди прочих, он был выбран для проведения дальнейших экспериментов.

Далее была исследована возможность переключения GST под слоем перовскита. Для этого эксперимента перовскит был нанесен на аморфную пленку GST и спектр фотолюминесценции был измерен, затем GST был переведен в кристаллическую фазу. Соотношение между пиковой интенсивностью спектра люминесценции перовскита на кристаллической фазе к аморфной составил 20%. Далее кристаллический GST был переведен обратно в аморфную фазу и снова в кристаллическую. В этом случае соотношение составило 37%, что подтверждает возможность динамического управления внешним квантовым выходом фотолюминесценции [5].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 21-79-10214). (<https://rscf.ru/project/21-79-10214>)

## Литература

- [1] N. Park, *et al*, Nature Reviews Materials **5**, 333–350 (2020).
- [2] A. Kojima, *et al*, Journal of the american chemical society **131**, 6050–6051 (2009).
- [3] H. Jin, *et al*, Materials Horizons **7**, 397–410 (2020).
- [4] D. Yavsin, *et al*, Semiconductors **48**, 1567–1570 (2014).
- [5] O. Kushchenko, *et al*, Laser & Photonics Reviews **17**, 2200836 (2023).

## Моделирование спектров отражения эпитаксиальных гетероструктур с распределенными брэгговскими отражателями для задач квантовой фотоники

О.Е. Лакунцева

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Задача создания эффективных излучателей одиночных фотонов необходима для реализации ряда технологий квантовых вычислений и квантовой криптографии. Один из основных подходов, позволяющих реализацию излучате-

лей одиночных фотонов с предельно высокой степенью неразличимости, связан с изготовлением столбчатых микрорезонаторов с распределенными брэгговскими отражателями (РБО). Наилучшие результаты на сегодняшний день продемонстрированы для эпитаксиальных гетероструктур с РБО и квантовыми точками (КТ) в системе материалов (In,Al,Ga)As [1]. Важнейшим этапом в технологической цепочке создания микрорезонаторных структур является рост гетероструктур с заданными параметрами толщин и состава методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ). При этом для экспресс-оценки расхождения параметров толщин и составов гетероструктур с РБО от заданных значений с целью осуществления обратной связи с технологическим процессом МПЭ, возможно применять метод моделирования спектров отражения (СО). В данной работе представлена разработка программы и результаты моделирования СО гетероструктур с РБО  $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}/\text{GaAs}$ , выращенных методом МПЭ на подложках GaAs(001).

В литературе описаны два различных метода моделирования СО многослойных гетероструктур: через матрицы переноса и рекуррентное соотношение Парратта [2]. Для реализации программы выбран последний метод за счет удобства написания программного кода в среде MATLAB. Точность моделирования СО гетероструктур с РБО во многом определяется исходными данными по значениям показателей преломления, и, прежде всего, для твердых растворов AlGaAs, для которых в литературе имеется значительный разброс вследствие ошибки в (1–3)% в определении содержания Al в твердом растворе по причине близости периодов решеток бинарных соединений GaAs и AlAs. Еще меньше данных по значениям показателей преломления твердых растворов AlGaAs при криогенных температурах, поэтому в данной работе моделировались СО, измеренные при температуре  $T = 300$  К. В разработанной программе данные по дисперсии показателей преломления взяты с сайта компании Sopra [3], при этом сделана поправка по абсолютным значениям для твердых растворов  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  ( $x \sim 0.9$ ) в соответствии с работой [4], где была уточнена температурная зависимость показателей преломления для GaAs и  $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ .

В работе будут представлены результаты моделирования СО рабочих и тестовых (с меньшим количеством пар) гетероструктур, содержащих нижнее и верхнее зеркало РБО GaAs/ $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ , разделенных между собой слоем резонатора (GaAs) толщиной  $\lambda/n$  с плоскостью КТ InAs в его середине. В таких гетероструктурах в СО наблюдается “провал”, соответствующий моды оптического микрорезонатора, что позволяет значительно увеличить точность моделирования. В работе также будет обсуждаться величина ошибки в определении толщин слоёв РБО, связанная с неопределенностью значений

показателей преломления для твердых растворов AlGaAs. На основе измерений СО в различных точках пластины будут сделаны выводы о диаграмме направленности используемых источников молекулярных пучков Ga и Al.

## Литература

- [1] N. Tomm, *et al.* Nat. Nanotech. **16**, 399–403 (2021).
- [2] J.E. Davis //space.mit.edu/ davis/memos/multilayer.pdf. (2014).
- [3] Optical Data from Sopra SA //www.sspectra.com/sopra.html
- [4] M.A. Bobrov, *et al.* JETP Letters **116**, 613–618 (2022).

## Усиление спонтанного излучения перовскитов с помощью материалов с фазовой памятью

Д.А. Литвинов

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

В последние десятилетия нанофотоника привлекла огромное внимание благодаря своей способности контролировать потоки света на субволновом масштабе для множества приложений. Поэтому основным трендом развития современной науки и технологий стали миниатюризация и многофункциональность создаваемых устройств. Активная фотоника занимает особое место с использованием новых материалов — галогенидных перовскитов [1]. Благодаря различным преимуществам, таким как дешевое изготовление, настраиваемость, относительно высокий показатель преломления и простота интеграции с другими платформами, перовскиты привлекают огромное внимание как фотонные источники. Одной из наиболее важных характеристик этих источников является локальная плотность состояний (LDOS). В общем, LDOS количественно оценивает фактор Перселла [2] усиления спонтанного излучения в фотонной среде, например, около метаматериалов, металлических поверхностей и т.д. Модуляция эффекта Перселла является ключевой задачей для многих приложений [3–4]. Для настройки свойств излучаемого света можно использовать материалы с фазовым переходом (PCM) [5], которые были интенсивно развиты в последние десятилетия. Основной особенностью этих материалов является возможность обратимого перехода между фазами, что позволяет изменять их оптические свойства и, следовательно, свойства всей структуры. Исследование системы “PCM-перовскит” представляет собой крайне важную задачу, поскольку это может привести к новым

фундаментальным знаниям в области активной и перестраиваемой фотоники с возможной практической реализацией.

В данной работе исследуется слоистая структура, включающая стеклянную подложку, материал с фазовым переходом (PCM), перовскит и воздух. В рамках нашего исследования мы изменяем толщину PCM от 10 до 100 нм и толщину перовскита от 30 до 70 нм, что соответствует экспериментально достижимым значениям. LDOS в произвольной точке может быть рассчитана как след мнимой части диадной функции Грина. Для вывода диадной функции Грина слоистой системы мы объединяем подходы углового представления спектра и матрицы переноса. Фактор Перселла представляет собой отношение LDOS рассматриваемой системы к LDOS излучателя в однородной среде. Таким образом, были построены карты зависимости фактора Перселла для различных толщин PCM и перовскита, а также спектры фотолюминесценции различных перовскитов для аморфной и кристаллической фазы GST и SbSe. В случае GST кристаллическая фаза обеспечивает более высокую скорость излучения по сравнению с аморфной фазой на всех длинах волн в видимом диапазоне. Однако общая модуляция отношения интенсивности люминесценции составляет не более 15%. При использовании SbSe в качестве слоя PCM наблюдаются различные зависимости. Усиление люминесценции сильно зависит от длины волны. В отличие от системы с GST, система с SbSe-слоем демонстрирует более сильную модуляцию вплоть до 50%. На короткой длине волны 470 нм достигается усиление Перселла до 1,5, в то время как на 700 нм усиление превышает 2.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 21-79-10214). (<https://rscf.ru/project/21-79-10214>)

## Литература

- [1] S. Makarov, *et.al.*, *Advanced Optical Materials* **7**, 1800784 (2019).
- [2] E. Purcell, *et.al.* *Physical Review* **69**, 37–8 (1946).
- [3] P. Pitchappa, *Advanced Materials* **31**, 1808157 (2019).
- [4] H. Zhang, *Science Bulletin* **64**, 782–9 (2019).
- [5] M. Wuttig, *Nature Materials* **6**, 824–832 (2007).

## Связанные состояния в континууме: устойчивость к структурному беспорядку

Е.Э. Маслова

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия



В последнее время активно изучаются связанные состояния в континууме (ССК), являющиеся локализованными состояниями [1,3]. Связанные состояния в континууме представляют собой резонансы с бесконечной радиационной добротностью, и хотя бесконечная добротность ССК является математической абстракцией, высокодобротные моды (квази-ССК), образованные по механизму ССК, могут возбуждаться в резонаторе. Квази-ССК можно увидеть в фотонных кристаллах, метаповерхностях [5,6], волноводах [4], связанных резонаторах [5,6] и других фотонных структурах [2].

Поскольку в действительности идеальных структур быть не может, важным вопросом является влияние дефектов, в том числе структурного беспорядка, на добротность. В данной работе мы рассматриваем различные типы диэлектрических резонаторов и исследуем влияние беспорядка на их добротность. В первой части работы мы рассматриваем двухслойный резонатор, образованный диэлектрическими цилиндрами. Такая структура поддерживает защищенные симметрией ССК и ССК типа Фабри–Перо. Беспорядок вносился путем случайного изменения координат вдоль периода (вдоль оси  $x$ ) и перпендикулярно периоду (вдоль оси  $y$ ), а также вдоль обеих осей сразу. Смещение цилиндров задается величиной  $\Delta t = R \cdot \sigma$ , где  $\sigma$  — степень беспорядка, а  $R$  — случайная величина из диапазона  $[-1; 1]$ . Результаты показывают, что защищенные симметрией связанные состояния в континууме более устойчивы к флуктуациям вдоль оси  $y$ , тогда как ССК типа Фабри–Перо более устойчив к флуктуациям по периоду. При этом в обоих случаях наблюдается квадратичная зависимость уменьшения добротности от степени беспорядка. Во второй части работы мы рассматриваем одномерную периодическую структуру, состоящую из диэлектрических брусков. Здесь мы исследуем зависимость добротности от структурного беспорядка в симметричных и асимметричных структурах. Симметричная структура состоит из одинаковых блоков, тогда как в асимметричном случае имеются два типа блоков с разными размерными параметрами. В данном случае мы случайным образом смещали правую границу каждого бруска, увеличивая амплитуду беспорядка. Результаты показывают, что в асимметричной системе добротность более устойчива к внесению структурного беспорядка. Как и в первой части, в данном случае добротность уменьшается по квадратичному закону. Стоит отметить, что во всех системах с увеличением степени беспорядка наблюдается локализация электромагнитного поля, что приводит к уменьшению эффективной длины резонатора.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 20-79-10316. (<https://rscf.ru/project/20-79-10316>)

## Литература

- [1] C.W. Hsu *et al.*, *Nat. Rev. Mater.* **1**, 16048 (2016).
- [2] E.E. Maslova *et al.*, *Nanophotonics* **10**(17), 4313–4321 (2021).
- [3] K. Koshelev *et al.*, *Sci. Bull.* **64**, 836–842 (2018).
- [4] Z. Yu *et al.*, *Optica* **6**, 1342 (2019).
- [5] Z. Sadrieva *et al.*, *Phys. Rev. A* **99**, 053804 (2019).
- [6] M. Sidorenko *et al.*, *Phys. Rev. Appl.* **15**, 034041 (2021).

## Модовый состав излучения квантово-каскадных лазеров среднего ИК диапазона

В.Ю. МЫЛЬНИКОВ

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время квантово-каскадные лазеры (ККЛ) являются наиболее перспективными источниками когерентного излучения в среднем инфракрасном диапазоне. Они применяются для оптической связи в свободном пространстве, лазерной спектроскопии и визуализации, для обнаружения и определения дальности (LIDAR) и экологического мониторинга [1]. Однако, развитие многих практических приложений ограничено существующими проблемами в экспериментальном и теоретическом описании некоторых фундаментальных свойств ККЛ. Одна из таких важных проблем связана с определением структуры поперечных мод лазерного излучения и расчетом пространственной эволюции распределения интенсивности в ближнем и дальнем поле ККЛ с ростом тока накачки. В данной работе мы определяем модовый состав излучения ККЛ при помощи численных методов, анализируя экспериментальное распределение интенсивности ближнего поля ККЛ. Исследуемые лазерные чипы имеют ширину полоска 20 мкм, длину резонатора 3 мм и выходную мощность в несколько Ватт при импульсной накачке (150 нс/12 кГц) [2]. Для измерения распределения интенсивности ККЛ в дальнем поле мы использовали камеру Dataray IR-BB. Ближнее поле измерялось с помощью стандартной увеличительной телескопической установки (подробности эксперимента см. в [3]). Мы предполагали, что интенсивность лазерного излучения может быть представлена в виде некогерентной суперпозиции интенсивностей ТМ-мод тонкого симметричного планарного волновода. Также, накладывались нулевые граничные условия из-за наличия металлизированных контактов и рассматривались первые три моды. Модовая структура излучения определялась путем

аппроксимации экспериментальных сечений интенсивности в ближнем поле теоретической кривой, задаваемой суммой интенсивностей независимых мод. Было показано, что вдоль «быстрой» оси (т.е. в направлении роста) лазер излучает в основной моде для всех исследованных токов накачки. Однако, вдоль «медленной» оси (т.е. в плоскости структуры) ситуация изменяется, поскольку доминируют моды 1-го и 2-го порядка. Конкуренция мод, наблюдаемая в эксперименте, связана с балансом потерь и усиления, который смещается в высокие моды с ростом тока накачки. Мы полагаем, что низкий вклад четных мод при малой накачке объясняется накоплением тепла в центре волновода, которое увеличивает эффективный порог для 0-й и 2-й мод и оставляет вблизи порога генерации только 1-ую моду. При более высокой накачке основным источником конкуренции мод, по-видимому, являются потери на металлизированных сторонах волновода, которые подавляют 1-ую моду.

Данная работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 21-72-30020).

## Литература

- [1] O. Spitz and F. Grillot, *Journal of Physics: Photonics*, **4**(2), 022001 (2022).
- [2] E.D. Cherotchenko *et al.*, *Nanomaterials* **12**, 3971 (2022).
- [3] V.V. Dudelev *et al.*, *Technical Physics Letters*, vol. **46**, pp. 1152–1155 (2020).

## Строения и свойства углеродных нанотрубок, заполненных фосфором и серой

А.В. Окотруб, А.А. Ворфоломеева, Л.Г. Булушева

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СОРАН, Новосибирск, Россия

Однослойные углеродные нанотрубки (ОУНТ) представляют собой квази-одномерные структуры, внутренние полости которых могут быть заполнены неорганическими соединениями. Заполнение ОУНТ и извлечение инкапсулированных частиц из их полости являются перспективными методами настройки функциональных свойств материалов на основе ОУНТ. В настоящей работе мы синтезировали и исследовали ОУНТ компании ОКСИАЛ модифицированные серой и фосфором. Синтез проводился ампульным методом, что позволило получить одномерные полимерные формы серы и фосфора. Нами было обнаружено, что умеренный нагрев заполненных нанотрубок можно использовать для декапсулирования гостевых соединений. Гибридные структуры имеют отличную от исходных соединений электронную структуру и могут быть

использованы в качестве электрохимических материалов, для изготовления сенсоров и в других приложениях. Всестороннее исследование материалов с помощью просвечивающей электронной микроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и квантово-химического моделирования привело к пониманию факторов, влияющих на сенсорный отклик заполненных серой и фосфором ОУНТ. Показано, что S@ОУНТ обладают выдающейся чувствительностью изменения проводимости к содержанию в газовой фазе диоксида азота на уровне единиц ppb.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 22-13-00219).

## **Усиление фотолюминесценции коллоидных квантовых точек в плазмонной метаповерхности со связанными состояниями в непрерывном спектре**

А.А. Середин

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

На данный момент синтез квантовых точек представляет собой перспективную и относительно экономически выгодную технологию. Недавние достижения в синтезе коллоидных квантовых точек открывают новые горизонты для разработки и совершенствования активной оптоэлектроники в инфракрасном диапазоне [1]. Длина волны излучения фотонов, генерируемых этими квантовыми точками, зависит от методов синтеза и охватывает ближний и средний инфракрасные диапазоны. Поэтому исследования взаимодействия между излучением от коллоидных квантовых точек и метаповерхностями имеют большое значение для разработки новых устройств.

Одним из потенциальных кандидатов могут являться наноструктуры, которые поддерживают плазмонные резонансы [2]. Однако стандартной проблемой таких резонансов являются низкие значения добротности, обусловленные внутренними потерями. Тем не менее, при использовании периодических плазмонных систем можно значительно увеличить значение добротности существующих мод. Более того, метаповерхности обладают связанными состояниями в континууме (ССК) [3], которые характеризуются бесконечно высоким значением радиационной добротности. В данной работе представлены результаты эффективной настройки плазмонной метаповерхности с ССК, что позволило усилить фотолюминесценцию коллоидных квантовых точек HgTe

в инфракрасном диапазоне.

Плазменная метаповерхность обладает важной особенностью — технологической простотой, достигнутой с помощью одношагового метода лазерной печати [4]. Для ее создания используется золотая пленка толщиной около 50–60 нм, которая подвергается фемтосекундному импульсному лазерному облучению, что приводит к локальному нагреванию и деформации. В результате этого процесса образуется плазменная метаповерхность с периодическими конеческими нановыпуклостями. Форма и размеры этих нановыпуклостей могут быть контролируемы путем настройки энергии импульса лазера. Изменение формы нановыпуклостей позволяет регулировать длину волны в ближнем и среднем инфракрасном диапазоне.

Важно отметить, что для эффективного усиления фотолюминесценции квантовых точек используется слой  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , который разделяет слой  $\text{HgTe}$  квантовых точек от плазменной метаповерхности. Толщина слоя  $\text{Al}_2\text{O}_3$  также имеет критическое значение для оптимального режима связи. Данное исследование также рассматривает данный вопрос. При оптимальных условиях наблюдается увеличение фотолюминесценции в 12 раз. Пиковый сигнал наблюдается под углом около  $17^\circ$ , а излучение в направлении, перпендикулярном метаповерхности, полностью подавляется, что подтверждает квази-ССК режим плазменной моды.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №21-79-10190. (<https://rscf.ru/project/21-79-10190>)

## Литература

- [1] Keuleyan S., Lhuillier E., Guyot-Sionnest P. Synthesis of colloidal  $\text{HgTe}$  quantum dots for narrow mid-IR emission and detection // *Journal of the American Chemical Society*. 2011. Т. 133. №. 41. С. 16422–16424.
- [2] Park J.E., Kim J., Nam J.M. Emerging plasmonic nanostructures for controlling and enhancing photoluminescence // *Chemical science*. 2017. Т. 8. № 7. С. 4696–4704
- [3] Azzam S.I., Kildishev A.V. Photonic bound states in the continuum: from basics to applications *Advanced Optical Materials*. 2021. Т. 9. No 1. С. 2001469.
- [4] Stankevicius E. *et al.* Direct Laser Writing for the Formation of Large-Scale Gold Microbumps Arrays Generating Hybrid Lattice Plasmon Polaritons in Vis-NIR Range // *Advanced Optical Materials*. 2021. Т. 9. No 12 С. 2100027

# **УГЛЕРОДНЫЕ И ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВЫ НАНОСТРУКТУРЫ**

Тезисы докладов Молодежной конференции  
по физике полупроводников  
«Зимняя школа 2024»

Санкт-Петербург (г. Зеленогорск)  
29 февраля – 4 марта 2024 года

---

Подписано в печать 20.02.2024. Формат 60×84/16. Печать цифровая.

Усл. печ. л. 8,0. Тираж 150. Заказ 0829.

---

Отпечатано с готового оригинал-макета, предоставленного редакторами,  
в Издательско-полиграфическом центре Политехнического университета.  
195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.

Тел.: (812) 552-77-17; 550-40-14.