

Локальная симметрия низкоразмерных систем

Н. А. Поклонский

Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь

В лекции рассматриваются некоторые аспекты локальной симметрии низкоразмерных систем на основе углерода. Объекты исследования — углеродные кластеры, воронкообразные макромолекулы, радикалы (точечные дефекты с нескомпенсированными спиновыми магнитными моментами электронов в кристаллической решетке алмаза), трубки и нити с нанометровым диаметром и микрометровой длиной, углеродные поверхности, дефекты графеновой плоскости. Предмет исследования — физико-технологические принципы придания электрического и магнитного дипольных моментов низкоразмерным системам путем их функционализации. Цель — разработать однофотонные источники излучения для квантовых информационных технологий. Методы исследования — квантово-химические расчеты, компьютерное моделирование, блочно-регулярный метод.

Обсуждаются следующие вопросы:

1) Условия существования и магнитные свойства электрически нейтральной и заряженной молекулы из десяти атомов углерода в форме пятиугольника с пятью лучами — прекурсора при образовании низкоразмерных систем (из углеродной плазмы [1]);

2) Свойства воронкообразной макромолекулы $PbPc$ (химическая формула — $PbC_{32}N_8H_{16}$) с подвижным центром (вдоль оси симметрии молекулы). В основном состоянии молекулы атом свинца смещен примерно на 0.1 нм перпендикулярно к плоскости xy фталоцианинового кольца и имеет заряд $+0.6e$ (где $e \approx 160$ зКл — элементарный заряд), молекула имеет приближенную симметрию C_s и электрический дипольный момент с компонентами $D_y = 4.43$ Д (где 1 Д ≈ 3.34 зКл·нм) в плоскости xy фталоцианинового кольца и $D_z = 0.37$ Д перпендикулярно к плоскости кольца (вдоль оси z). Энергия, необходимая для «выворачивания» макромолекулы (т.е. для перехода атома Pb сквозь кольцо $C_{32}N_8H_{16}$), составляет примерно 2 эВ. (О конформациях этой макромолекулы см., например, [2–5]);

3) Координация одиночного атома азота, замещающего атом углерода в кристаллической алмазной матрице (азот в C -форме, иначе $P1$ -центр). Расчет методом молекулярных орбиталей пути реакции для переходов $P1$ -центра между основным и метастабильным стационарными состояниями [6] (см. также работу [7] о структурной инверсии молекулы аммиака). Показано, что в условиях регистрации электронного спинового резонанса эти переходы (ин-

дуцированные неравновесными фононами матрицы) могут приводить к реализации инверсной заселенности зеемановских уровней энергии P1-центра. В свете работ [8–10] рассматриваются схемы реализации фононного лазера на таких двухуровневых системах;

4) Квантово-химические расчеты перестройки C–C-связей в однослойной углеродной нанотрубке при ее аксиальном упругом растяжении. Деформационные фазовые переходы «узкозонный полупроводник–металл» для нанотрубок типа *armchair* [11] и «узкозонный полупроводник–широкозонный полупроводник» для нанотрубок типа *zig-zag* [12];

5) Карбододекаэдр C₂₀ в углеродной нанотрубке [13]. Магнитоуправляемый наноключ (нанореле) из двух углеродных нанотрубок, наполненных магнитоактивными эндофуллеренами [14];

6) Алмазные нити (иначе шнуры) [15] и *p-i-n*-диоды на основе легированной бором и фосфором кристаллической пленки алмаза [16] — однофотонные источники в оптической области спектра при комнатной температуре?;

7) Моделирование локально симметричных углеродных поверхностей с дефектом структуры (например, графена с компактной выпуклостью, состоящей из нескольких пяти-, шести- и семиугольников) методом блочно-регулярных структур [17,18]. Метод основан на экспериментально известных стабильных локальных атомных конфигурациях (или блоках). Для чисто углеродных систем имеются симметричные блоки (структуры): центрированный тетраэдр в алмазе (5-блок), центрированный треугольник в графене (углеродном монослое с гексагональной структурой, 4-блок), центрированный отрезок в карбине. Атом в нанокластере взаимодействует только с ближайшими соседями, но это взаимодействие зависит и от более удаленных соседей, которые могут деформировать блок. Факторизация решетки графена по повороту из группы симметрии этой решетки дает коническую поверхность — воронку. Существует только 8 типов таких воронок, определенных поворотами вокруг точек трех типов (см. таблицу в [19]). Расширение группы симметрии («вклеиванием» фрагментов графена) приводит к более общим углеродным поверхностям. Их классификация определяется классами сопряженных элементов поворотов в группе симметрии графена [20].

Для познания низкоразмерных углеродных систем необходимо развивать локальную теорию состояний и процессов не только в уединенных молекулярных фрагментах, но и в их агломератах. Необходимость новых подходов к исследованию структуры углеродных материалов хорошо известна (см., например, [21]). Однако в применении к низкоразмерным углеродным системам квантово-химический расчет из первых принципов (непосредственный расчет деформации углеродного каркаса) требует слишком больших объемов вычис-

лений [22]. Поэтому при выполнении исследований проводятся приближенные расчеты на основе блочно-регулярных систем точек, позволяющие применять топологические идеи к дискретным подмножествам атомов углерода, которые имеют «врожденную» тенденцию к формированию ажурных (каркасных) агрегатов [23]. На этом может строиться упрощенный способ оценки энергии таких блочно-регулярных атомных конфигураций не только из углерода, но и из других атомов с ковалентными химическими связями.

Литература

- [1] Н. А. Поклонский, Е. Ф. Кисляков, О. Н. Бубель и др. *Вестник Фонда фундаментальных исследований*, вып. 3, 18 (2005).
- [2] Н. А. Поклонский, Е. Ф. Кисляков, Д. И. Сагайдак и др. *Письма в ЖТФ* **27**, 17 (2001).
- [3] N. Papageorgiou, Y. Ferro, E. Salomon, *et al.* *Phys. Rev. B* **68**, 235105 (2003).
- [4] N. Papageorgiou, E. Salomon, T. Angot, *et al.* *Progr. Surf. Sci.* **77**, 139 (2004).
- [5] M. Shibuta, K. Yamamoto, K. Miyakubo, *et al.* *Phys. Rev. Bx* **80**, 113310 (2009).
- [6] N. A. Poklonski, E. F. Kislyakov, O. N. Bubl', *et al.* in *Physics, Chemistry and Application of Nanostructures. Reviews and Short Notes to Nanomeeting-2011: Proc. of the Int. Conf.*, Minsk, 24–27 May 2011, Eds. V. E. Borisenko *et al.* (World Scientific, Singapore, 2011) P. 110.
- [7] C. Léonard, S. Carter, N. C. Handy, *Chem. Phys. Lett.* **370**, 360 (2003).
- [8] K. Vahala, M. Herrmann, S. Knunz, *et al.* *Nature Physics* **5**, 682 (2009).
- [9] I. S. Grudinin, H. Lee, O. Painter, *et al.* *Phys. Rev. Lett.* **104**, 083901 (2010).
- [10] A. D. O'Connell, M. Hofheinz, M. Ansmann, *et al.* *Nature* **464**, 697 (2010).
- [11] N. A. Poklonski, E. F. Kislyakov, Nguyen Ngoc Hieu, *et al.* *Chem. Phys. Lett.* **464**, 187 (2008).
- [12] N. A. Poklonski, E. F. Kislyakov, O. N. Bubl', *et al.* in *Proc. of the 3rd Int. Workshop on nanotechnology and application (IWNA 2011)*, Vung Tau, Vietnam 10–12 November 2011 (Vietnam National Univ., 2011) P. 241.
- [13] N. A. Poklonski, S. A. Vyrko, E. F. Kislyakov, *et al.* *Nanoscale Res. Lett.* **6**, 216 (2011).
- [14] N. A. Poklonski, E. F. Kislyakov, S. A. Vyrko, *et al.* *SPIE Newsroom*, 19 Nov. 2010, 3 p. [doi:10.1117/2.1201010.003091].
- [15] T. M. Babinec, B. J. M. Hausmann, M. Khan, *et al.* *Nature Nanotechnology* **5**, 195 (2010).
- [16] A. Lohrmann, S. Pezzagna, I. Dobrinets, *et al.* *Appl. Phys. Lett.* **99**, 251106 (2011).
- [17] N. A. Poklonski, S. A. Vyrko, A. T. Vlassov, in *Contributed Papers of VI Int. Conf. Plasma physics and plasma technology (PPPT-6)*, Minsk, Sept. 28–Oct. 2, 2009: In 2 vols., B. I. Stepanov Institute of Physics, NASB (Polyfact, Minsk, 2009) Vol. II, P. 740.
- [18] А. Т. Власов, Н. А. Поклонский, С. А. Вyrko в *Актуальные проблемы физики твердого тела (ФТТ-2011): сб. докл. Междунар. науч. конф.*, Минск, 18–21 октября 2011 г.: в 3 т., редкол.: Н. М. Олехнович (пред.) и др. (Вараксин А. Н., Минск, 2011) Том 2, С. 303.

- [19] Н. А. Поклонский, в *Международ. зимняя школа по физике полупроводников 2010: Науч. прогр. и тез. докл.*, С.-Петербург–Зеленогорск, 25 февраля–1 марта 2010 г. (ФТИ им. А.И. Иоффе РАН, СПб., 2010) С. 48.
- [20] Н. А. Поклонский, А. Т. Власов, С. А. Вырко, *Конечные группы симметрии. Основы и приложения* (Беларус. Энцыкл. імя П. Броўкі, Минск, 2011) 464 с.
- [21] Л. А. Асланов, в *Структурные исследования кристаллов: К семидесятипятилетию акад. Б.К. Вайнштейна: Сб. статей* (Наука, Физматлит, М., 1996) С. 327.
- [22] D. W. Rogers, *Computational chemistry using the PC* (Wiley-VCH, Darmstadt, 2003).
- [23] В. В. Бражкин, *УФН* **197**, 393 (2009).