

МИХАИЛ МАСЛОВ: «ГРАФЕНУ ЕСТЬ АЛЬТЕРНАТИВЫ»

9 октября 2024

Разработка новых материалов является одним из фронтальных направлений современной науки, а важнейшим этапом на пути к получению новых материалов является компьютерное моделирование молекул и наноструктур с новыми свойствами. Одним из ученых работающих в этой области науки является доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики конденсированных сред Института нанотехнологий в электронике, спинтронике и фотонике МИФИ, главный научный сотрудник лаборатории 2D-наноматериалов в электронике, фотонике и спинтронике Михаил Маслов. С профессором Масловым мы беседуем о методах и результатах его исследований.

Интервью продолжает нашу традиционную рубрику «[Голос науки](#)».



Михаил Маслов

Михаил Михайлович, как бы Вы в целом охарактеризовали область Ваших научных исследований?

Если говорить в общем, я занимаюсь компьютерным моделированием в сфере физики конденсированных сред и материаловедения. На сегодняшний день мы ведем исследования по нескольким направлениям – прежде всего по двумерным материалам графеноподобного типа и по высокоэнергетическим материалам.

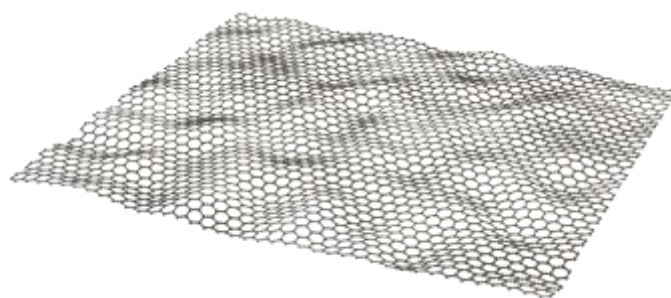
Что касается первого направления – мы сейчас активно развиваем лабораторию по теоретическому исследованию данных материалов, где мы изучаем их электронные и энергетические характеристики, структуру, механические свойства и многое другое. Могу похвастаться, что по данной тематике мой аспирант Павел Кулямин вошел в число 500 лучших аспирантов Российской Федерации и выиграл президентскую стипендию.

Двумерные материалы изучаются прежде всего в интересах микроэлектроники?

В том числе - микро- и наноэлектроники. Приведу пример. Хорошо всем известен графен, но также всем известно, что он является бесщелевым полупроводником, то есть у него отсутствует необходимая для используемых в электронике полупроводников энергетическая щель. И встает вопрос, как эту щель в графене открыть. Для решения этой проблемы на сегодняшний день существует несколько подходов, например, функциональное допирование, когда на графен помещаются атомы или функциональные группы, или использование методов стрейнтроники, когда щель открывается под действием механических напряжений: растяжения или сжатия образца. Ну а мы сейчас хотим посмотреть и понять, возможно ли открыть щель путем подбора соответствующих подложек под графен. То есть мы, грубо говоря, кладем графен на подложку и смотрим, как меняется его электронная зонная структура, и открывается ли там щель.

Когда графен только появился, он вызвал в прессе большой ажиотаж, но похоже, что использовать его оказалось не так легко, как казалось вначале?

Действительно, напрямую его использовать, конечно же, тяжело, в том числе из-за того, что, как я уже говорил, у него отсутствует полупроводниковая щель. Плюс ко всему, если брать реальные образцы графена, он не является абсолютно плоским, как его часто можно увидеть на картинках, он на самом деле волнистый, что может приводить к снижению подвижности носителей. Но ему есть альтернативы – это другие двумерные кристаллы: силицен, борофен, фосфорен, такого же типа графеноподобные материалы. Можно делать так называемые бислои из графена, получать биграфен и более сложные системы типа диаманоподобных структур, когда два слоя графена соединены прочными ковалентными связями и допированы водородом. Такая вот диаманоподобная форма вполне может в некоторых приложениях стать альтернативой графену.



На самом деле графен не плоский, а волнистый

Теоретически конечным результатом этих исследований должно быть появление нового транзистора?

Теоретически это, конечно, возможно. Нашей идеальной целью, конечно же, является новая элементная база для наноэлектроники.

Но пока ваши исследования идут даже не в колбе, а только в компьютере, пока вы имеете дело с виртуальными молекулами?

Действительно, в настоящее время наши исследования ограничиваются теоретическим анализом и компьютерным моделированием. На данном этапе это поисковые работы. Фактически это прогнозирование новых соединений с наперед заданными свойствами или непосредственный расчет этих свойств. То есть мы хотим получить какие-то конкретные нужные для того или иного применения характеристики материала, и подбираем для этого структуру и элементный состав.

Второе направление вашей работы - высокоэнергетические материалы, в чем суть этих исследований?

Объясню на примере. Ярким примером высокоэнергетического материала можно считать азотное топливо. Всем известно, что азот в нормальных условиях это негорючий газ, по сути мы им дышим. Но, при высоких давлениях и низких температурах, можем получить конденсированную фазу азота - твёрдое вещество. И этот материал станет основой для нового вида топлива, поскольку при его распаде будет выделяться большая энергия. Высокоэнергетические соединения такого рода могут занять особую промежуточную нишу между атомными и химическими источниками энергии.

В исследованиях такого рода обладает ли Россия и, в частности, МИФИ каким-то приоритетом?

Мне кажется, что да, безусловно, поскольку в МИФИ эти работы ведутся уже долгое время. Я помню, что, еще будучи аспирантом, я был вовлечен в работы по тематике высокоэнергетических соединений. И поэтому, конечно, у нас большой задел, огромные наработки. И я думаю, что стать мировым лидером в этой области вполне реально.

Моделирование такого рода систем требует глубокого знания свойств молекул веществ, которые вы используете. И играют ли роль для понимания этих свойств те исследования, которые идут в МИФИ, может быть, в других подразделениях, на других кафедрах? То есть, есть ли тут какая-то синергия внутри МИФИ?

Безусловно есть. Мы тесно работаем с экспериментальными группами. В первую очередь, конечно, с нашим Наноцентром, Центром радиофотоники и СВЧ-технологий. Кроме того, у нас сложились хорошие рабочие контакты с молодежной лабораторией «Сверхпроводящие энергетические системы» под руководством [Сергея Покровского](#) по вопросам повышения эффективности энергетических систем и накопителям энергии. Мы часто обращаемся к экспериментаторам, чтобы проверить наши рабочие гипотезы.



Есть ли в Ваших исследованиях какая-то сторона, которая особенно интересна Росатому и атомной энергетике?

На мой взгляд, конечно, есть, учитывая, что Росатом в настоящее время занимается также альтернативными источниками энергии, в частности водородной энергетикой. Высокоэнергетические материалы, которые мы исследуем, могут стать основой для новых видов топлива. Сейчас идет борьба за новые энергетические ресурсы, и эти новые виды топлива вполне могли бы быть такими ресурсами.

Какие бы Вы могли назвать наиболее ценные научные результаты последних годов?

Прежде всего, мы не только занимаемся непосредственно молекулами и кристаллическими структурами как объектами исследований, но еще и готовим методики для расчетов, которые довольно активно используются не только нашим коллективом, но и во всем мире. Среди главных результатов я бы назвал разработку неортогональной модели сильной связи, которая является трансферабельной, то есть хорошо описывающей как малые системы, микроскопические структуры, так и мезоскопические системы и кристаллы. Данная модель позволяет, например, проводить длительные молекулярно-динамические расчеты, то есть следить за эволюцией систем в течение длительного времени, порядка нано- и микросекунд и дольше. Для сравнения: молекулярная динамика, основанная на первопринципных вычислениях, например, теории функционала плотности, позволяет отслеживать эволюцию систем в течение всего лишь нескольких пикосекунд.

Далее, среди наших наиболее интересных результатов я бы назвал обнаружение «металличности» в кремнии. Мы впервые установили, что в системах, называемых кремниевыми полипризмами, которые представляют собой нанотрубочки с экстремально малым поперечным сечением в форме правильного многоугольника, отсутствует полупроводниковая щель. Хорошо известно, что кристаллический кремний является полупроводником, но вот именно такая топология полипризматов раскрывает его металлическую природу.

И в качестве еще одного интересного и очень красивого результата я бы назвал наш теоретический прогноз. Мы обнаружили, что азот может образовывать немолекулярные формы, названные нами астраленами. Это довольно интересный материал, аллотропная модификация азота, которая представляет собой ковалентный кристалл. Атомы азота в нем соединены друг с другом ковалентными связями. Астралены – красивые кристаллы, обладающие иногда причудливыми формами. К слову, они также являются полупроводниками.

Поговорим немного о технической стороне вашей исследования. Вы моделируете на компьютерах. Требуется ли это больших вычислительных мощностей? Относятся ли ваши исследования к суперкомпьютерным исследованиям? Хватает ли этих мощностей в МИФИ? И еще один интересный вопрос. Какие программные пакеты для этого используются? И являются ли эти пакеты отечественными?

Что касается мощностей, то здесь всегда чем больше, тем лучше. Естественно, какие-то небольшие тестовые вычисления можем делать и на персональных машинах, но серьезные, многомесячные расчеты, конечно же, делаются на суперкомпьютерах, в том числе на тех, что есть у нас в МИФИ. Мощностей в принципе хватает, но всегда хотелось бы больше. Что касается программных пакетов. Во-первых, мы, конечно, используем свои, тот же самый комплекс NTBM, основанный на модели сильной связи. Это свободно распространяемый программный продукт, любой желающий может его свободно попробовать на сайте ntbm.info, там его можно скачать и им пользоваться. Ну и что касается общепризнанных программных комплексов, то основными можно считать Quantum Espresso и GAMESS. Первый из них позволяет моделировать кристаллические системы, второй – молекулярные и кластерные структуры.

Последний вопрос: понятны ли вам перспективы, куда дальше будут двигаться ваши исследования?

Разумеется. Работы очень много – это касается и низкоразмерных систем, и систем высокоэнергетических, и новых кристаллических материалов. Сейчас активно набирает обороты исследование структурных, электронных и энергетических характеристик [перовскитов](#), в том числе 2D-перовскитных систем и гетероструктур на их основе. Здесь горизонты для научного творчества просто безграничны.

Беседовал Константин Фрумкин, пресс-служба МИФИ

Источник: официальный сайт НИЯУ МИФИ 9 октября 2024 года
<https://mephi.ru/press/news/23526>