



Kraków, 8 marca 2017

## **Nanoinżynieria fononowa: Nowo odkryte drgania nanowysp efektywniej rozpraszają ciepło**

*Dwukrzemek europu już od pewnego czasu przyciąga uwagę naukowców. Uznawany za obiecujący dla elektroniki i spintroniki, materiał ten został ostatnio poddany przez zespół fizyków z Polski, Niemiec i Francji kompleksowym badaniom wibracji jego sieci krystalicznych. Wyniki przyniosły niespodziankę: osadzone na podłożu z krzemu, niektóre struktury dwukrzemku europu okazują się drgać w sposób wyraźnie poszerzający możliwości projektowania nanomateriałów.*

Drgania atomów w sieciach krystalicznych materiałów nie są chaotyczne, lecz mniej lub bardziej uporządkowane. Wzbudzenia sieci, nazywane fononami, zależą od wielu czynników, takich jak symetria kryształu czy masy atomów. Inaczej oscylują atomy w głębi litego kryształu, inaczej na jego powierzchni, jeszcze inaczej, gdy materiał tworzy na podłożu np. nanowyspy, czyli niewielkie klastry atomowe. Międzynarodowy zespół fizyków, złożony z naukowców Instytutu Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk (IFJ PAN) w Krakowie, Politechniki w Karlsruhe (PK) oraz Europejskiego Centrum Promieniowania Synchrotronowego (The European Synchrotron, ESRF) w Grenoble, po raz pierwszy kompleksowo przebadali, jak zmieniają się wibracje sieci krystalicznej dwukrzemku europu ( $\text{EuSi}_2$ ) w zależności od ukształtowania jego struktur osadzonych na podłożu z krzemu. Badania przyniosły niezwykły rezultat: w próbce, w której nanowyspy dwukrzemku europu się stykały, zaobserwowano drgania nowego typu.

„Zwykle przez nanoinżynierię rozumie się modyfikowanie materiału w skali nanometrów, czyli miliardowych części metra. Badania nad dwukrzemkiem europu, w których uczestniczyliśmy, pozwalają nam zaproponować coś więcej: nanoinżynierię fononową, czyli taką, w której starannie projektuje się nie tyle samą strukturę materiału, ile drgania atomów w jego sieci krystalicznej”, mówi dr hab. Przemysław Piekarczyk (IFJ PAN).

W kryształce  $\text{EuSi}_2$  każdy atom europu w głębi sieci jest otoczony przez 12 atomów krzemu. Układ ma symetrię nazywaną tetragonalną: odległość między atomami w jednym kierunku jest tu inna niż w dwóch pozostałych kierunkach. Dwukrzemek europu to metaliczny związek, który łatwo wiąże się z krzemem, charakteryzuje się też rekordowo niską tzw. barierą Schottky'ego (czyli barierą energii potencjalnej napotykaną przez elektrony przy przechodzeniu z metalu do krzemu). Materiały tego typu już dziś są interesujące z uwagi na potencjalne zastosowania w układach nanoelektronicznych, np. w technologii MOSFET używanej przy produkcji współczesnych procesorów. Jednak w niskich temperaturach dwukrzemek europu wykazuje także ciekawe własności magnetyczne, co czyni go atrakcyjnym dla następczyni elektroniki: spintroniki.

Związki ziem rzadkich z krzemem nie były dotychczas kompleksowo badane pod kątem drgań sieci, a te odgrywają przecież fundamentalną rolę m.in. w transporcie ciepła. Tymczasem w układach nanoelektronicznych, gdzie ciepło wydziela się w dużych ilościach, właściwości cieplne materiału stają się nie mniej ważne od jego cech elektrycznych czy magnetycznych.

Grupa dr. Svetoslava Stankova (PK) opracowała procedurę epitaksjalnego wytwarzania nanostruktur dwukrzemku europu, polegającą na osadzaniu w warunkach ultrawysokiej próżni niewielkich ilości atomów europu na podgrzewanym podłożu z krystalicznego krzemu. Dobierając temperaturę podłoża i liczbę atomów europu można w ten sposób otrzymywać struktury  $\text{EuSi}_2$  o określonej morfologii.

„W eksperymencie skoncentrowaliśmy uwagę na czterech przypadkach: jednorodnej powłoce, którą można było traktować jak lity kryształ, powłoce mocno pofałdowanej oraz na dwóch strukturach zbudowanych z nanowysp”, mówi dr Stankov i wyjaśnia: „Nanowyspa jest efektem samoorganizacji atomów osadzających się na podłożu: to wyraźnie wyodrębnione skupisko atomów, osiągające rozmiary rzędu kilkudziesięciu nanometrów przy wysokości kilkunastu nanometrów. Najciekawsze okazały się próbki, w których nanowyspy dwukrzemku europu były od siebie całkowicie odizolowane oraz takie, gdzie nanowyspy mogły się ze sobą stykać”.

Próbki wytwarzano w komorze ultrawysokiej próżni na linii pomiarowej rezonansu jądrowego w synchrotronie ESRF, gdzie od razu analizowano ich właściwości za pomocą nieelastycznego rozpraszania jądrowego (Nuclear Inelastic Scattering, NIS).

„NIS to najnowocześniejsza metoda bezpośredniego pomiaru energii drgań atomowych w nanostrukturach, z bardzo wysoką zdolnością rozdzielczą. Sieć krystaliczną oświetla się tu fotonami o dużych energiach, tak dobranych, by wskutek ich absorpcji przez jądra atomowe wzbudzić grupy atomów do drgań określonego rodzaju i wyznaczyć ich spektrum energetyczne”, dodaje dr Stankov.

W IFJ PAN przeprowadzono badania teoretyczne. Realizowano je metodami *ab initio*, opartymi na podstawowych prawach mechaniki kwantowej i fizyki statystycznej, używając oprogramowania PHONON napisanego przez prof. dr. hab. Krzysztofa Parlińskiego (IFJ PAN). Grupa krakowska zajmowała się nie tylko modelowaniem drgań sieci krystalicznej struktur dwukrzemku europu, ale także ustalaniem warunków przeprowadzania eksperymentów w synchrotronie ESRF.

„W Grenoble rejestrowano tylko energie drgań atomów europu. Krzywe otrzymane z pomiarów bardzo dobrze zgadzały z naszymi obliczeniami dla litego kryształu oraz dla powierzchni. Mogliśmy te dane uzupełnić o nasze przewidywania dotyczące ruchów atomów krzemu, co pomogło lepiej zinterpretować wyniki”, wyjaśnia prof. Parliński.

Szczególnie interesujące wyniki otrzymano dla próbek z nanowyspami. W przypadku podłoża pokrytego rozseparowanymi nanowyspami zaobserwowano znaczny wzrost amplitud drgań atomów europu – o 70% względem drgań w kryształach. Tak duży skok przekłada się na wyraźnie większe możliwości w zakresie transportu ciepła. Najciekawszy efekt pojawił się jednak w próbce z nanowyspami przylegającymi do siebie. Na styku między nanowyspami dostrzeżono dodatkowe drgania, o charakterystycznej energii. Chociaż przewidywane wcześniej teoretycznie, zostały po raz pierwszy potwierdzone eksperymentalnie. Ich istnienie to kolejna „furtka”, przez którą materiał może odprowadzać ciepło do otoczenia. Za pomocą stykających się nanowysp realnie staje się więc znaczne zwiększenie efektywności transportu ciepła w nanostrukturach.

„W trakcie analiz materiałowych naukowcy zwykle przyglądają się właściwościom próbki o ustalonej morfologii. My opisaliśmy całe spektrum możliwych struktur dwukrzemku europu. Zaawansowany model teoretyczny i precyzyjne pomiary pozwoliły po raz pierwszy dokładnie prześledzić, jak drgania sieci krystalicznej materiału zmieniają się w zależności od sposobu zabudowania podłoża”, podkreśla dr Piekarczyk.

Prace badawcze nad dwukrzemkiem europu, po stronie polskiej finansowane z grantu HARMONIA Narodowego Centrum Nauki, a po niemieckiej przez Helmholtz Association (PK, projekt VH-NG-625), mają charakter podstawowy. Zdobyta wiedza, zwłaszcza w zakresie drgań sieci krystalicznych pojawiających się na styku sąsiednich nanowypsi i związanych z tym zjawiskiem wyraźnych zmian w transporcie ciepła, jest uniwersalna. Po odpowiedniej adaptacji będzie można ją wykorzystać do projektowania właściwości cieplnych innych materiałów niż dwukrzemki europu.

Instytut Fizyki Jądrowej PAN (IFJ PAN) w Krakowie zajmuje się strukturą materii i własnościami oddziaływań fundamentalnych od skali kosmicznej po wnętrza cząstek elementarnych. Wyniki badań – obejmujących fizykę i astrofizykę cząstek, fizykę jądrową i oddziaływań silnych, fazy skondensowanej materii, fizykę medyczną, inżynierię nanomateriałów, geofizykę, biologię radiacyjną i środowiskową, radiochemię, dozymetrię oraz fizykę i ochronę środowiska – są każdego roku przedstawiane w ponad 500 artykułach publikowanych w recenzowanych czasopismach naukowych. Częścią Instytutu jest nowoczesne Centrum Cyklotronowe Bronowice, unikalny w skali europejskiej ośrodek obok badań naukowych zajmujący się terapią protonową nowotworów. IFJ PAN jest członkiem Krakowskiego Konsorcjum Naukowego „Materia-Energia-Przyszłość” o statusie Krajowego Naukowego Ośrodka Wiodącego (KNOW) na lata 2012-2017. Instytut zatrudnia ponad pół tysiąca pracowników. W klasyfikacji MNiSW Instytut został zaliczony do kategorii naukowej A+ w grupie nauk ścisłych i inżynierskich.

#### **KONTAKT:**

dr hab. **Przemysław Piekarz**  
kierownik Zakładu Komputerowych Badań Materiałów  
Instytut Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk  
tel. +48 12 6628281  
email: [przemyslaw.piekarz@ifj.edu.pl](mailto:przemyslaw.piekarz@ifj.edu.pl)

#### **PRACE NAUKOWE:**

1. „Anomalous Lattice Dynamics of EuSi<sub>2</sub> Nanoislands: Role of Interfaces Unveiled”  
A. Seiler, P. Piekarz, S. Ibrahimkuty, D. G. Merkel, O. Waller, R. Pradip, A. I. Chumakov, R. Rüffer, T. Baumbach, K. Parlinski, M. Fiederle, S. Stankov  
Phys. Rev. Lett. 117, 276101  
DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.276101>

#### **POWIĄZANE STRONY WWW:**

<http://nanodynamics-group.com/>  
Strona grupy NANODYNAMICS, Karlsruhe Institute of Technology.

<http://www.esrf.eu/>  
Strona Europejskiego Centrum Promieniowania Synchrotronowego (ESRF) w Grenoble.

<http://www.ifj.edu.pl/>  
Strona Instytutu Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk.

<http://press.ifj.edu.pl/>  
Serwis prasowy Instytutu Fizyki Jądrowej PAN.

#### **MATERIAŁY GRAFICZNE:**

**IFJ170308b\_fot01s.jpg** **HR:** [http://press.ifj.edu.pl/news/2017/03/08/IFJ170308b\\_fot01.jpg](http://press.ifj.edu.pl/news/2017/03/08/IFJ170308b_fot01.jpg)  
Zdjęcia mikroskopowe powierzchni pokrytej wyraźnie rozseparowanymi nanowypsiami dwukrzemku europu (po lewej) oraz nanowypsiami stykającymi się ze sobą (po prawej). (Źródło: IFJ PAN)

**IFJ170308b\_fot02s.jpg** **HR:** [http://press.ifj.edu.pl/news/2017/03/08/IFJ170308b\\_fot02.jpg](http://press.ifj.edu.pl/news/2017/03/08/IFJ170308b_fot02.jpg)  
Struktura stykających się nanowypsi dwukrzemku europu na podłożu z krzemu. Krzem oznaczono kolorem czarnym, lity kryształ dwukrzemku europu – kolorem żółtym. Warstwa brązowa to powierzchnia nanowypsi, niebieska – interfejs z podłożem, a zielona obejmuje styk między nanowypsiami. Dodatkowe drgania zaobserwowano w obrębie atomów przedstawionych w kolorze zielonym. (Źródło: IFJ PAN)