

В этом выпуске:

## ГРАФЕН

### *Морзе для металлов с графеном и силицином*

Стремительное развитие квантовых методов компьютерного моделирования, основанных, в первую очередь, на теории функционала плотности (DFT), постепенно отодвигает классические потенциалы межатомного взаимодействия на второй план. Однако на современном этапе развития вычислительной техники пока еще существуют задачи, для которых использование традиционных подходов не только оправданно, но и является единственно возможным решением. Например, к таким задачам можно отнести длительное молекулярно-динамическое моделирование или наблюдение за эволюцией органических систем, состоящих из очень большого числа частиц. При упоминании классических парных потенциалов в первую очередь вспоминаются модели Леннард-Джонса и Морзе.

В работе [1] авторы представили набор параметров потенциала Морзе для описания взаимодействия атомов металлов (лития, никеля и серебра) с двумерными материалами: графена и силицена. Параметры подбирались, исходя из наилучшего соответствия рассчитанных геометрических, энергетических и частотных характеристик выбранного набора тестовых систем соответствующим значениям, полученным на уровне теории DFT/PBE/6-311G(d,p)/LANL2DZ (базис 6-311G(d,p) использовался для атомов C, Si и Li, а базис LANL2DZ – для атомов Ni и Ag) с учетом дисперсионных поправок Гримме (DFT-D3). В качестве тестовых молекул авторы выбрали декорированные металлами углеродные и кремниевые клетки, представляющие фуллерены C<sub>60</sub> и Si<sub>60</sub>, соответственно (см. рис.). При этом атомы металла помещались ровно над центром углеродных или кремниевых шестичленных колец. Кроме того, при подборе параметров потенциала они рассмотрели структуры C<sub>59</sub> и Si<sub>59</sub> – клетки, содержащие вакансию. По утверждению авторов, полученный с помощью анализа систем на основе фуллеренов потенциал обладает трансферабельностью, другими словами, неплохо описывает даже небольшие структуры, обладающие меньшей кривизной, в частности углеродную чашу C<sub>20</sub>, декорированную атомами металлов. Таким образом, они пришли к выводу, что представленная модель в полной мере применима к теоретическому описанию взаимодействия металлических адатомов с идеальным или деформированным листом графена/силицена, хотя и отметили особо, что для анализа более сложных процессов, таких как образование металл-кремниевых кластеров,

И далее ...

## НАНОМАТЕРИАЛЫ

- 2 Нанокompозит растет и упрочняется, используя CO<sub>2</sub> из окружающего воздуха и солнечный свет

## СНОВА К ОСНОВАМ

- 4 Рассеяние – не проблема, а возможность точных измерений

## МУЛЬТИФЕРРОИКИ

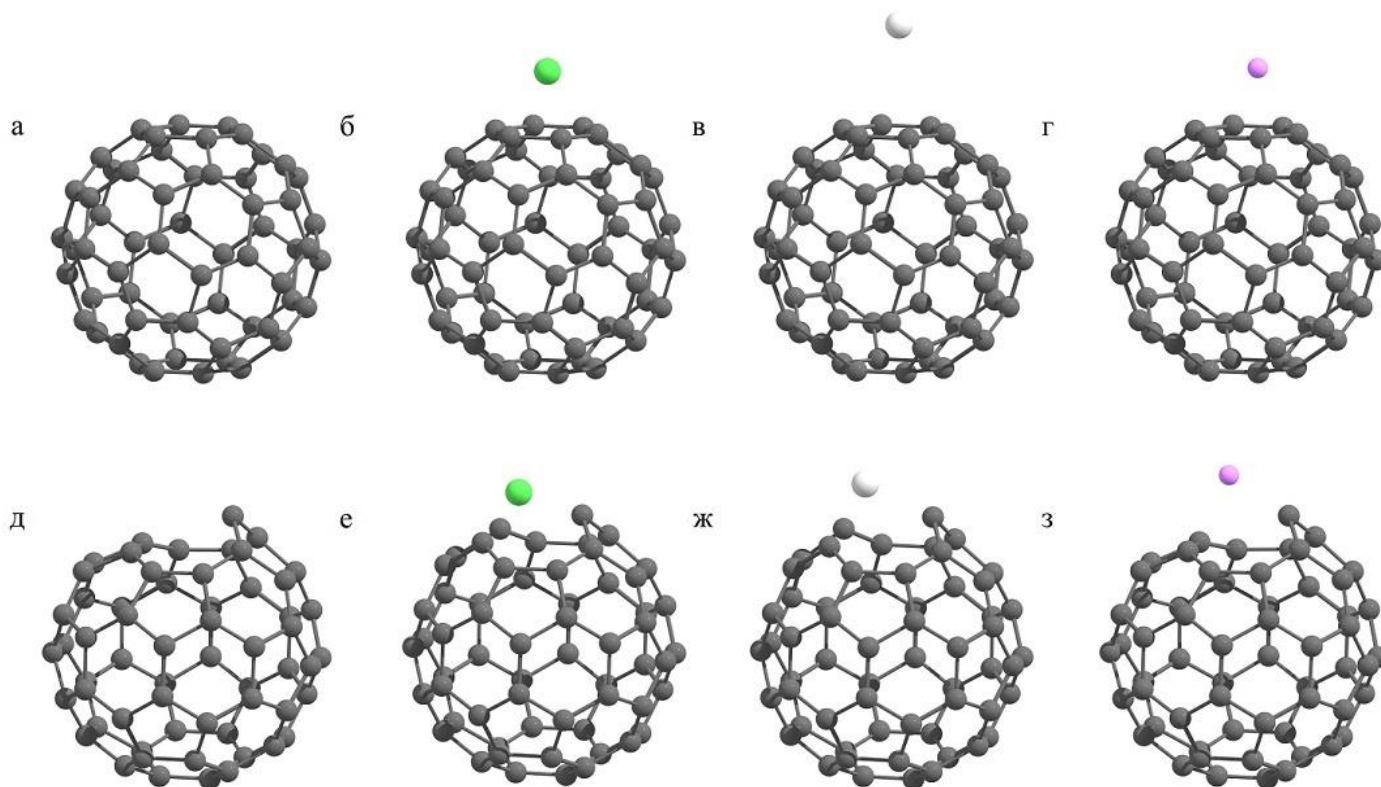
- 5 Электрическое управление скирмионной фазой

## ТОРЖЕСТВО

- 6 Академик Борис Патон отмечает 100-летний юбилей

## КОНФЕРЕНЦИИ

- 7 VII Euro-Asian Symposium “Trends in Magnetism” (EASTMAG-2019), September 8–13, 2019, Ekaterinburg, Russia



Атомные структуры “чистого” фуллерена  $C_{60}$  (а) и фуллерена  $C_{60}$ , декорированного атомами никеля (б), серебра (в) и лития (г). Атомные структуры содержащего вакансию фуллерена  $C_{59}$  (д) и замещенных металлофуллеренов  $C_{59}Ni$  (е),  $C_{59}Ag$  (ж) и  $C_{59}Li$  (з).

содержащих низкокоординированные углеродные цепочки, или металлических комплексов, скорее всего, потребуется уже другой набор параметров.

*М.Маслов*

*I. A.Y. Galashev et al., Phys. Lett. A 383, 252 (2019).*

## НАНОМАТЕРИАЛЫ

***Наноккомпозит растет и упрочняется, используя  $CO_2$  из окружающего воздуха и солнечный свет***

Исследователи из Massachusetts Inst. of Technology (США) создали материал, который растет, упрочняется и даже восстанавливается после повреждений, используя  $CO_2$  из окружающего воздуха и солнечный свет [1].

Разработки материалов, способных к самовосстановлению, ведутся давно, и некоторые успехи уже достигнуты. Однако во всех предложенных подходах требуются внешние стимулы – нагрев, УФ-облучение, химическое воздействие. Авторы [1] воспользовались подсказкой природы и для превращения углекислого газа в органические вещества использовали хлоропласты – центры фотосинтеза в растениях.

Моносахарид глюкоза, основной продукт фотосинтеза, образуется при восстановлении  $CO_2$  за счёт энергии, аккумулированной в ходе световой стадии. Исследователи получили хлоропласты из свежих листьев шпината и внедрили их в свой новый материал. Другими важными компонентами исходной реакционной смеси являются мономер аминопропилметакриламид (APMA), фермент глюкозооксидаза ( $GO_x$ ) и буферный раствор. Под действием фермента  $GO_x$  глюкоза, получаемая из хлоропластов, превращается в глюконолактон (GL), который реагирует с мономерами и образует гелеподобную полимерную матрицу GPMAA (рис. 1).

До тех пор, пока хлоропласты производят глюкозу из атмосферного  $CO_2$ , гелевая матрица растет и упрочняется. Через 6 ч от начала облучения солнечным светом материал, похожий на гидрогель, начал образовываться вокруг хлоропластов (рис. 2). Через 18 ч, когда процесс завершился, толщина пленки увеличилась до 20 мкм. Материал стал более прочным. Если через 6 ч модуль сдвига составлял 0,4 кПа, то через 18 ч он увеличился до 3 кПа.

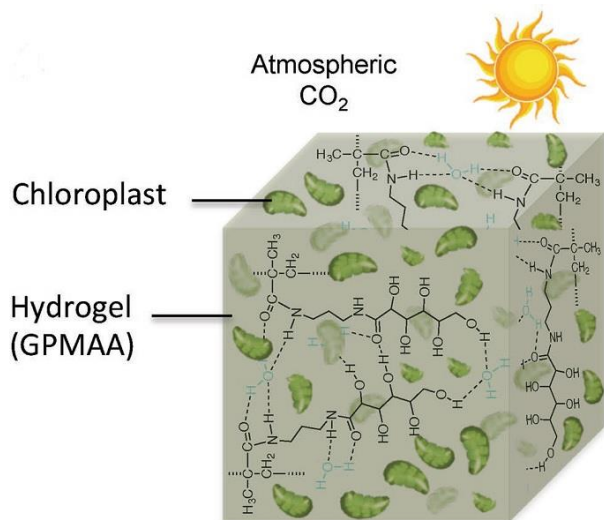


Рис. 1. Синтезированный гидрогель (GPMAA) с внедренными хлоропластами.

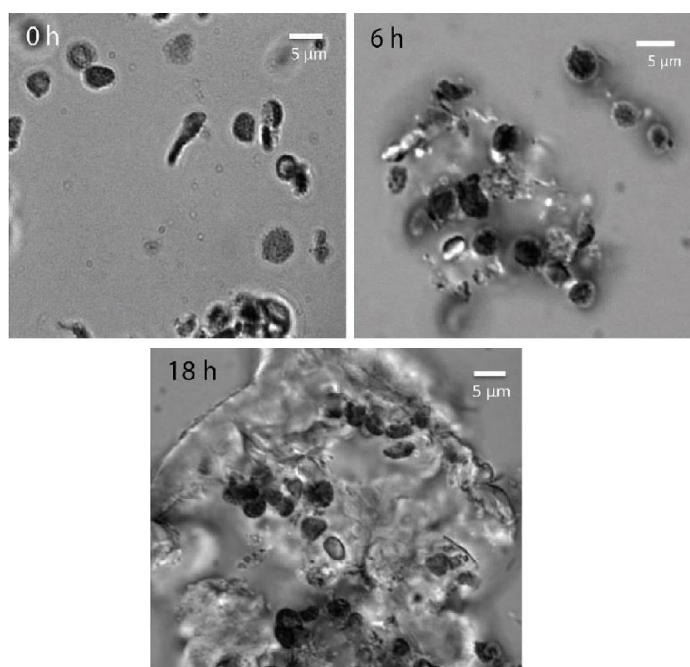


Рис. 2. Гидрогель растёт вокруг хлоропластов в среде, содержащей фермент  $GO_x$  и мономер APMA (0,1 масс/об %). Условия роста –  $CO_2$  из воздуха и солнечное освещение в течение 18 ч после одного часа темновой стадии. Шкала 5 мкм.

Исследователи нашли возможность ускорить рост материала и сделать его более прочным. Они добавили оксид графена – всего 0,01 масс.%. Этого оказалось достаточно для иммобилизации (прикрепления) фермента глюкозооксидазы ( $GO_x$ ) на поверхности пластинок оксида графена (рис. 3). Гидрогель сформировался за 6 ч – в 3 раза быстрее. Более того, модуль сдвига материала за эти 6 ч вырос до 3,7 кПа, т.е. до большей величины, чем у гидрогеля без графена за 18 ч (3 кПа). По мнению авторов, графен ускоряет сшивание полимера и упрочняет материал благодаря образованию допол-

нительных связей между функциональными группами оксида графена и цепочками GPMAA.

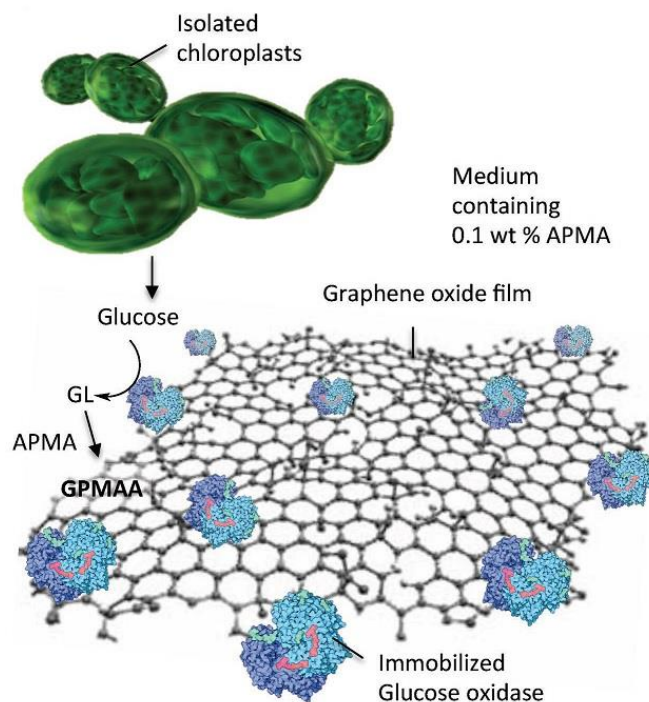


Рис. 3. Схематическая иллюстрация формирования гидрогеля на пленке оксида графена. Среда, в которую помещены хлоропласты, содержит 0,1 % APMA и глюкозооксидазу  $GO_x$ . Глюкоза, выделяемая из хлоропластов, с помощью фермента  $GO_x$ , иммобилизованного на пленке оксида графена, превращается в глюконолактон (GL), который реагирует с мономерами и образует гелеподобную полимерную матрицу GPMAA.

К сожалению, активность хлоропластов вне клеток растений довольно быстро снижается. В своих предыдущих исследованиях ученые предположили, что внедрение в хлоропласты наноматериалов, способных подавлять активные формы кислорода (АФК), может повысить эффективность фотосинтеза. Они синтезировали наночастицы оксида церия, которые, как известно, имеют высокую антиоксидантную активность, нашли способы их доставки в хлоропласты и экспериментально подтвердили свои предположения (*подробнее см. ПерсТ [2]*). В новой работе исследователи также внедрили в хлоропласты наночастицы оксида церия, считая, что снижение уровня АФК может повысить стабильность синтеза глюкозы. Действительно, время жизни изолированных хлоропластов в результате удаления из них активных форм кислорода увеличилось, что привело к большему накоплению глюкозы в среде. Таким образом, в усовершенствованном варианте нового материала хлоропласты стабилизированы



внедренными наночастицами оксида церия. Авторы считают, что время жизни хлоропластов зависит от растения, из которого они получены, и может быть в диапазоне от нескольких часов до нескольких месяцев.

Интересно, что гидрогель способен устранять полученные повреждения (например, разрывы) под действием солнечного света (или комнатного освещения) (рис. 4). Это совершенно новый механизм. Самовосстановление происходит благодаря выделению из хлоропластов глюкозы, которая и “сшивает” разрыв.

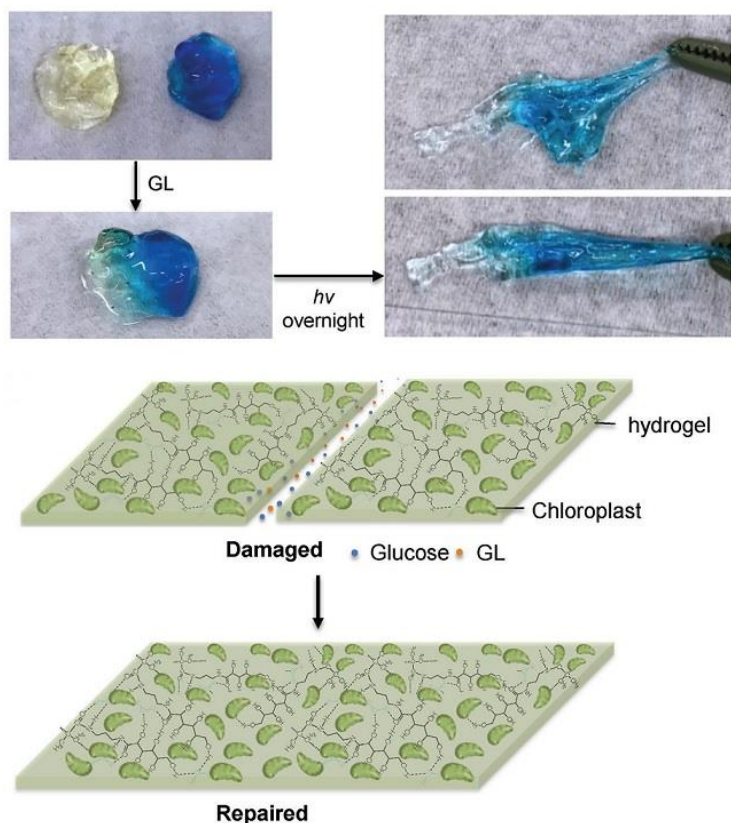


Рис. 4. Самовосстановление гидрогеля после светового воздействия в течение ночи. Схема иллюстрирует механизм восстановления. Молекулы глюкозы, поставляемые хлоропластами, сшивают разрыв.

Конечно, синтезированный материал пока недостаточно прочный. Но его применение в качестве покрытий, способных устранять свои повреждения (трещины) вполне реально. В дальнейшем, как надеются исследователи, этот новый класс материалов будет использоваться как в биомедицине, так и при создании новых конструкционных материалов.

О. Алексеева

1. S.-Y. Kwak et al., *Adv. Mater.* **30**, 1804037 (2018).
2. [ПерсТ 21, вып. 11/12, с.4 \(2014\).](#)

## СНОВА К ОСНОВАМ

### Рассеяние – не проблема, а возможность точных измерений

Традиционно в курсах оптики говорят о том, что нельзя определить положение объекта с точностью лучшей, чем длина волны излучения, которым освещают объект. Но для любого подобного правила исследователи всегда ищут исключения и возможности обойти запреты, и успешно их находят. Одна из таких “хитростей” представлена в недавней работе [1]. Ученые из Max Planck Inst. for the Science of Light (Германия) использовали картину рассеяния света на наночастице для определения ее положения с точностью до нескольких ангстрем.

Исследовалась кремниевая наночастица в оболочке оксида кремния (диаметр ядра 156 нм, оболочка 6 нм). Параметры частицы подбирали таким образом, чтобы рассеяние могло происходить как по электро-дипольному, так и по магнито-дипольному механизму, при этом сечения рассеяния имели максимумы в видимой области. Сечения рассеяния для таких частиц рассчитываются по теории Ми.

Частицу, находившуюся на пьезоподложке, освещали сфокусированным лазерным излучением. Излучение, рассеянное в прямом направлении, собиралось иммерсионным объективом. Картину обратного рассеяния регистрировали с помощью ПЗС-камеры. Свет был поляризован азимутально или радиально (рис 1.).

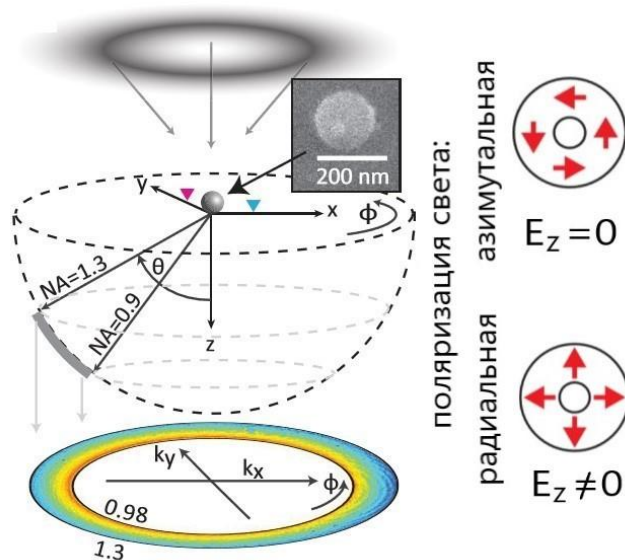


Рис. 1. Геометрия эксперимента: Кремниевая наночастица на подложке, на которую фокусируется лазерный луч. Схематическая конфигурация электрического поля для разных поляризаций света.

ПерсТ, 2018, том 25, выпуск 21/22

Длина волны была подобрана так, чтобы разность фаз комплексных коэффициентов рассеяния для электро-дипольного и магнито-дипольного механизма составляла  $\Delta\varphi = \pm\pi/2$ . Такая разность фаз позволяет получить максимальную интенсивность рассеяния, поскольку электрический и магнитный диполи, образованные частицей, в этом случае излучают синхронно.

В результате экспериментов было показано, что в случае положения частицы точно по центру фокального пятна картина обратного рассеяния является симметричной, а при небольшом сдвиге частицы наблюдалась несимметричная картина (рис. 2).

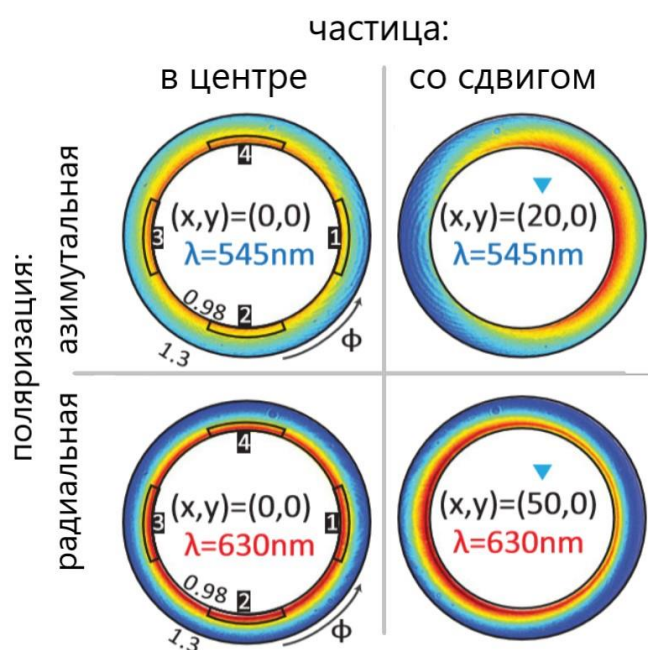


Рис. 2. Картина обратного рассеяния света. При сдвиге частицы от центра фокального пятна картина рассеяния становится несимметричной. Цветом показана интенсивность рассеянного света, минимум – синий, максимум – красный.

При наблюдениях на других длинах волн, при которых разность фаз  $\Delta\varphi$  отлична от  $\pi/2$ , асимметрия картины рассеяния не является четко выраженной. Эксперименты показали, что асимметрия однозначно определяется положением частицы. Если взять разностную картину между симметричным и асимметричным случаями, аппроксимировать полученные разности распределением Гаусса и применить известные критерии для разрешимости гауссовых пиков, то можно определить минимальное смещение частицы и погрешность методики. В данном эксперименте они оказались равными  $3 \text{ \AA}$  и  $0,6 \text{ \AA}$ .

Возможность определения положения наночастиц с хорошей точностью очень важна для практических приложений, как в электронике, так и в медицине. Кроме того, существует возможность объединения в одном эксперименте технологий манипуляции частицами (оптический пинцет) и их контроля.

3. Пятакова

1. A.Bag, et. al., *Phys. Rev. Lett.* **121**, 193902 (2018).

## МУЛЬТИФЕРРОИКИ

### Электрическое управление скирмионной фазой

Про магнитные скирмионы – вихревые топологические солитоны – в ПерсТ мы писали неоднократно, начиная с момента их обнаружения (см. например [1]): про то как, их наблюдать, и как управлять ими с помощью магнитного поля, спинового тока и механического воздействия. Не прекращаются также попытки научиться управлять скирмионами с помощью электрического поля: такой способ не требует большой мощности или высокой плотности токов, а с помощью системы электродов поле может быть локализовано в заданном месте. В связи с этим, внимание исследователей привлекает мультиферроик  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  с электрической поляризацией магнитного происхождения, в котором наблюдается скирмионная фаза. Ранее появлялись сообщения, в которых говорилось о косвенных признаках влияния электрического поля на решетку из скирмионов: по изменению электрической [2] и магнитной восприимчивостей [3] при переходе в скирмионную фазу. В недавней работе исследователей из Швейцарии и США [4] приведено прямое экспериментальное подтверждение зарождения и подавления решетки скирмионов с помощью электрического поля (рис. 1).

Наличие гексагональной решетки скирмионов в  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  определяли методом малоуглового рассеяния нейтронов по шести характерным дифракционным пикам (рис. 1b,c). На диаграмме в координатах магнитное поле – температура выбирали точки вблизи границы между конической спиральной спиновой структурой и скирмионной фазой (рис. 1e). Приложение к образцу электрического поля порядка  $10 \text{ кВ/см}$  индуцировало в нем скирмионную фазу.

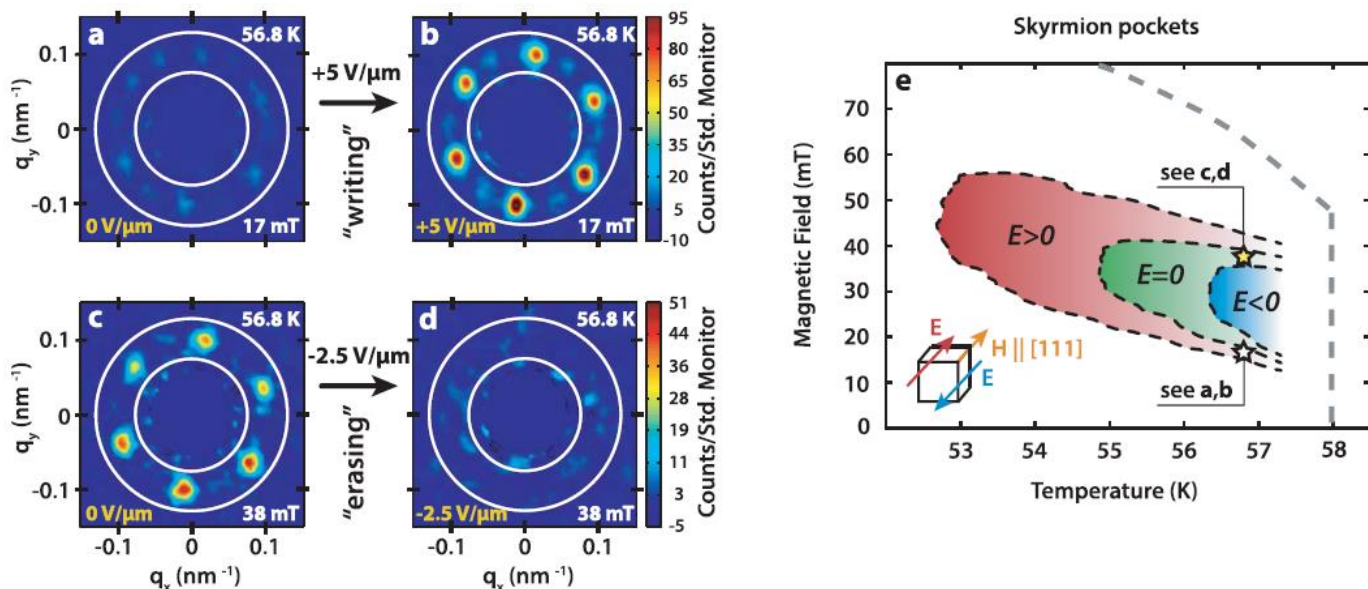


Рис. 1. Управление скирмионной фазой с помощью электрического поля в мультиферроике  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  [4].

Дифракционные картины, полученные методом малоуглового рассеяния нейтронов (a – d): переход от a к b – под действием положительного электрического поля, приложенного вдоль z-оси [111], существенно усиливает интенсивность шести пиков, соответствующих гексагональной решетке скирмионов; переход от c к d показывает подавление скирмионной решетки под действием электрического поля противоположной полярности.

e – Фазовая диаграмма в координатах магнитное поле – температура. Цветные области соответствуют скирмионной фазе, их размер зависит от электрического поля. Белой и желтой звездочками показаны точки фазовых диаграмм, в которых проводили наблюдения на рисунках a,b и c,d, соответственно.

Напротив, образец в скирмионной фазе при приложении поля противоположной полярности переходил в коническую фазу. Данное явление представляет несомненный интерес для спинтроники: при микронной толщине образца управляющее напряжение составляет вполне приемлимые для электроники величины в единицы вольт, но возможность практического использования данного материала ограничена низкой температурой магнитного упорядочения – всего 58 К.

А. Пятаков

1. [ПерсТ 17, вып.13/14, с. 4 \(2010\).](#)
2. *E.Ruff, et al., Sci. Rep. 5, 15025 (2015).*
3. *Y.Okamura, et al., Nat. Commun. 7, 12669 (2016).*
4. *A.J.Kruchkov, et al., Sci. Rep. 8, 10466 (2018).*

## ТОРЖЕСТВО

### Академик Борис Патон отмечает 100-летний юбилей

27 ноября 2018 г. всемирно известный ученый Борис Евгеньевич Патон отметил 100-летний юбилей на рабочем месте. Вместе с ним вековой юбилей



празднует и Национальная академия наук Украины (НАНУ), которую он возглавляет уже в течение 55 лет.

Борис Евгеньевич Патон - советский, украинский ученый в области металлургии, технологии металлов, электросварки и материаловедения, организатор науки, государственный и общественный деятель. С именем Патона связаны развитие электрошлаковой сварки, создание непревзойденных образцов сварочной техники и новой индустриальной отрасли - специальной электрометаллургии. Благодаря ему стали возможны прорывные технологии в современной хирургии - электросварка живых тканей.

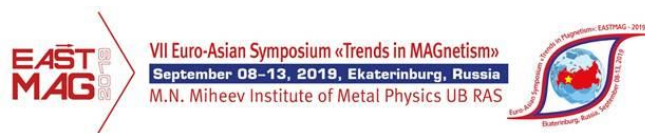


Он первый гражданин Украины, которому было присвоено звание Героя Украины, дважды Герой Социалистического Труда, лауреат Ленинской премии, лауреат Государственной премии СССР и Государственной премии Украины, лауреат золотых медалей имени М. Ломоносова, С. Королева и В. Вернадского, член многих иностранных академий наук. В 1993 - 2017 годах - президент Международной ассоциации академий наук (МААН).

*Поздравляем Бориса Евгеньевича с ЮБИЛЕЕМ!*

*Желаем здоровья, благополучия, творческих успехов, новых свершений и открытий!*

## КОНФЕРЕНЦИИ



***VII Euro-Asian Symposium “Trends in Magnetism” (EASTMAG-2019),  
September 8–13, 2019, Ekaterinburg, Russia***

*The scientific program:*

Spintronics and magnetic nanostructures  
Spin dynamics and magnetic resonances  
Low dimensional magnetism  
Domain walls, vortices and skyrmions  
Magnetotransport, magneto-optics and magneto-photonics  
Magnetoelastic, magnetocaloric and shape memory effects  
Frustrated and disordered magnetism  
Magnetism of strongly correlated electron systems  
Magnetism and superconductivity  
Soft and hard magnetic materials  
Magnetic semiconductors, multiferroics, topological insulators  
Magnetic soft matter  
Magnetism in biology and medicine  
Magnetic non-destructive testing

*Important Dates*

Deadline for registration is **March 30, 2019.**

Deadline for submission of **Abstracts is April 30, 2019.**

More details can be found at the Symposium website.

E-mail: [eastmag2019@imp.uran.ru](mailto:eastmag2019@imp.uran.ru)

Web: <http://eastmag2019.imp.uran.ru>

Phone: (343) 374-02-30

Fax: (343) 374-52-44

Экспресс-бюллетень ПерсТ издается совместной информационной группой  
ИФТТ РАН и НИЦ «Курчатовский институт»

Главный редактор: И.Чугуева, e-mail: [ichugueva@yandex.ru](mailto:ichugueva@yandex.ru)

Научные редакторы К.Кугель, Ю.Метлин

В подготовке выпуска принимали участие О.Алексеева, М.Маслов, А.Пятаков, З.Пятакова

Выпускающий редактор: И.Фурлетова

Адрес редакции: 119296 Москва, Ленинский проспект, 64<sup>а</sup>