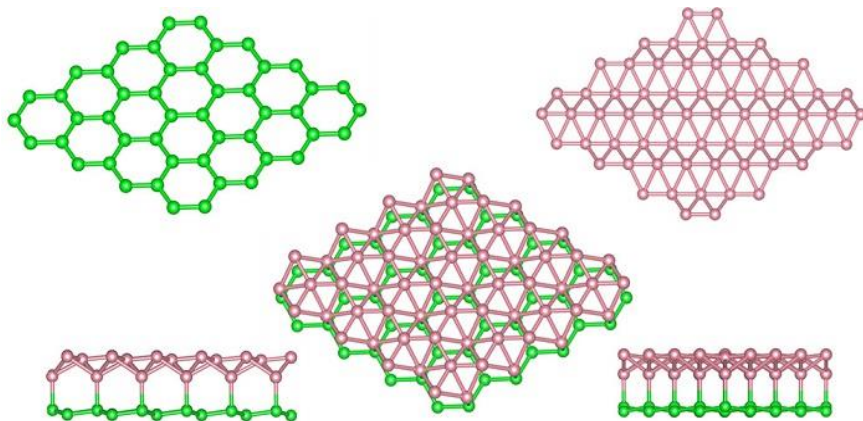


В этом выпуске:

## ГРАФЕН

### *Ковалентный сэндвич из графена и борофена*

В работе [1] исследователи из МИФИ и Ульяновского ГУ рассмотрели уникальный квазидвумерный кристалл, построенный из слоев графена и борофена, связанных между собой прочными ковалентными связями (см. рис.). С помощью расчетов, выполненных с использованием теории функционала плотности (DFT), они определили структурные, электронные и механические характеристики этого наноматериала. Вычисления исследователи выполняли в программе VASP в рамках обобщенного градиентного приближения с функционалом PBE. Слабое ван-дер-ваальсово взаимодействие также принималось во внимание посредством учета дисперсионных поправок Гримме DFT-D2. Колебательные спектры авторы получили, используя теорию возмущений (DFPT). В результате исследователи установили, что, несмотря на существенное несоответствие постоянных решеток изолированных слоев графена и борофена, а также несовпадение симметрии этих квазидвумерных кристаллов, их ковалентное связывание вполне возможно. Элементарная ячейка результирующего кристалла содержит два атома углерода и три атома бора (см. рис.).



Атомная структура композита, построенного из ковалентно связанных друг с другом листов графена и борофена. Атомы углерода обозначены зеленым цветом, атомы бора – розовым.

Анализ фононного спектра подтверждает динамическую устойчивость такого композита. При этом его характеристики отличаются от свойств составляющих его материалов: графена и борофена. Однако энергия когезии системы графен/борофен (6.37 эВ/атом), полученная авторами, все же ближе к величине, характерной для борофена (6.10÷6.45 эВ/атом), а не для графена (7.83 эВ/атом).

И далее ...

## ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

- 2 Зацепиться за фуллерен
- 3 Фуллерены доставят лекарство прямо к коронавирусу

## НАНОМАТЕРИАЛЫ

- 4 Уроки природы. Жуки-усачи помогли создать фотонные пленки для эффективного пассивного охлаждения

## ДЛЯ ПРАЗДНОГО УМА

- 6 Санкт-Петербургская лотерея в сопромате

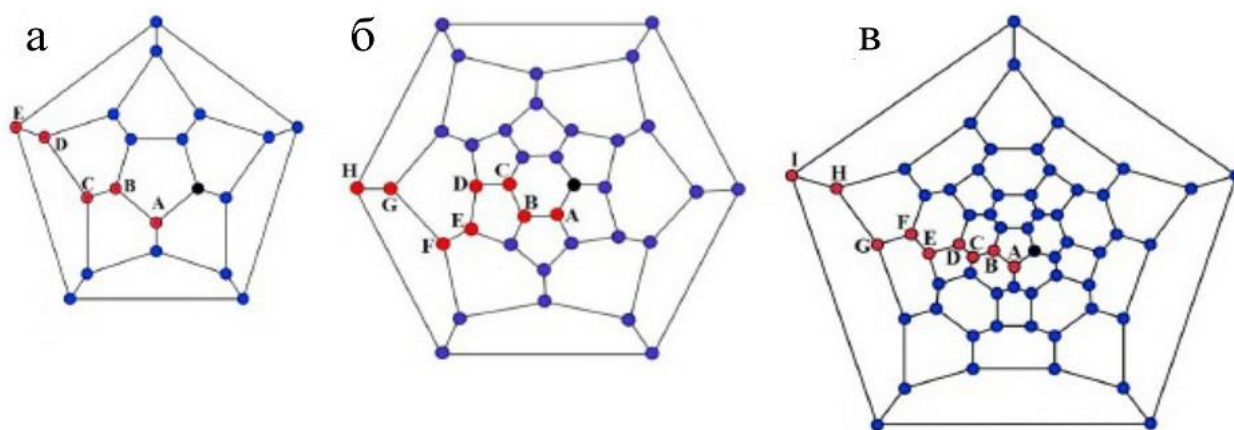
## КОНФЕРЕНЦИИ

- 7 International Conference on “2020 Physics and Mechanics of New Material and Their Applications” (PHENMA-2020), March 26-29, 2021, Kitakyushu, Japan

Расчет электронной зонной структуры и плотности электронных состояний показал, что этот квазидвумерный кристалл можно отнести к классу металлов, поскольку уровень Ферми располагается в зоне проводимости. Такое положение уровня Ферми вызвано переносом заряда от борофена к графену. Тем не менее, учитывая “гофрированную” структуру материала борофен/графен, авторы предполагают возможное изменение его электронных характеристик при приложении механических деформаций, например, при растяжении или сжатии. Эта особенность ковалентного композита может быть полезна для его использования в приборах стрейнтроники или наноэлектроники. В целом механические или упругие свойства такого материала не менее интересны, чем электронные. Оказывается, что 2D модуль Юнга композита значительно превышает величины, характерные для изолированных графена и борофена. Приведенный в работе [1] модуль Юнга системы борофен/графен составляет 440 Н/м, что больше величин 342 и 398 Н/м для графена и борофена, соответственно. В конечном итоге авторы высказывают предположение, что совокупность характерных для ковалентного “сэндвича” из борофена и графена уникальных свойств делает его перспективным квазидвумерным материалом для приборов и устройств следующего поколения.

*М. Маслов*

*1. A.Kochaev et al., J. Phys. Chem. Lett. 11, 5668 (2020).*



Диаграммы Шлегеля фуллеренов  $C_{20}-I_h$  (а),  $C_{36}-D_{6h}$  (б) и  $C_{60}-I_h$  (в). Черные и красные узлы соответствуют положениям атомов-допантов и функциональных групп. Буквы А, В, С, D и др. соответствуют различным относительным положениям черных и красных узлов.

Расчеты авторы выполняли на уровне теории ВЗLYP/6-311G(d) в программе GAMESS. Роль допантов или легирующих примесей досталась

## ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

### Зацепиться за фуллерен

Классические углеродные фуллерены считаются материалом, способным выступить в качестве важных элементов детекторов различных химических соединений. В основе таких устройств обнаружения лежит механизм адсорбции фуллереном радикалов и функциональных групп. Последние, цепляясь за фуллереновую клетку, изменяют его электронные характеристики, и это изменение сравнительно легко можно зарегистрировать. Кроме того, на повышение эффективности подобных приборов зачастую положительно влияет допирование, то есть замена одного или нескольких атомов углерода в фуллерене на атомы другого сорта. В работе [1] группа исследователей из России, Египта и Турции с помощью теории функционала плотности проанализировали влияние размеров и кривизны поверхности фуллеренов на эффективное взаимодействие как между различными допантами, внедренными в каркас фуллерена, так и функциональными группами на его поверхности. В центре внимания исследователей оказались “малоразмерные” фуллерены  $C_{20}$  и  $C_{36}$ , а также молекулы побольше:  $C_{60}$ ,  $C_{70}$  и  $C_{84}$  (см. рис.).

атомам бора, азота, кремния и фосфора, а выбор радикалов пал на атомы водорода, фтора, хлора и гидроксильную группу. Авторы оцени-

ли величины энергий адсорбции и допирования, а также энергии взаимодействия друг с другом двух допантов в каркасе или радикалов на его поверхности. Они установили, что энергии взаимодействия лежат в широком диапазоне (от 0.1 до 2 эВ) и немонотонно зависят от эффективных размеров фуллерена и расстояния между допантами или функциональными группами. Такое взаимодействие не может быть описано в рамках простого кулоновского отталкивания или представлено в виде суммы энергий связи допантов и энергии напряжения каркаса фуллерена. Тем не менее, удалось установить некоторые характерные особенности относительного расположения допантов в наиболее низкоэнергетических изомерах. Так, *para*-расположение двух функциональных групп на поверхности высших фуллеренов является наиболее выгодным. Для элементарных же фуллеренов уже *орто*-расположение может оказаться более предпочтительным. Взаимодействие допантов, встроенных в фуллереновые каркасы, представляется куда более сложным. Как правило для  $C_{60}$  и более крупных систем реализуется *орто*- или *para*-расположение, однако исключения также возможны. В конечном итоге авторы пришли к выводу, что взаимодействие между допантами в каркасе или между функциональными группами на поверхности фуллерена во многом зависит от размера и, как следствие, от кривизны его поверхности. И если крупные фуллерены в основном демонстрируют свойства, характерные для  $C_{60}$ , то для малых фуллеренов критичным является эффект кривизны. По мнению ученых, эти данные необходимо учитывать при создании детекторов и сенсоров на базе фуллеренов.

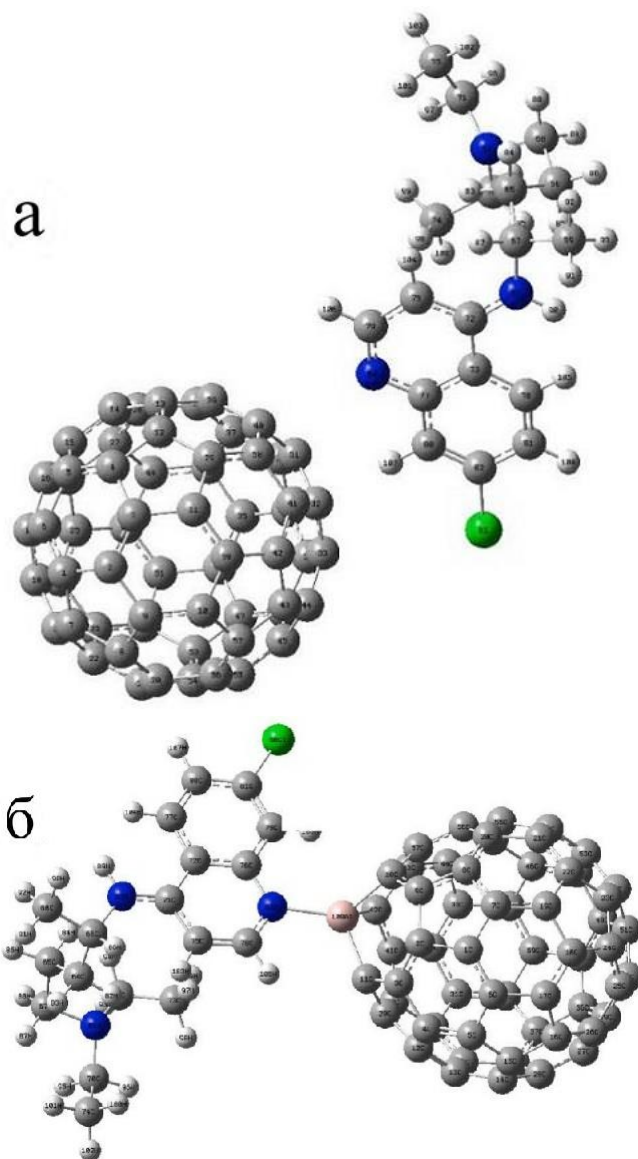
М. Маслов

I. M.A.Salem et al., *Physica E* **124**, 114319 (2020).

### **Фуллерены доставят лекарство прямо к коронавирусу**

Ученые из Iranian Center for Quantum Technologies в Тегеране [1] представили результаты теоретического анализа взаимодействия фуллереновой клетки  $C_{60}$  с хлорохином. Хлорохин – это известный препарат, который хорошо зарекомендовал себя в борьбе с малярией. Однако, по мнению ряда исследователей, он также является эффективным лекарством и против инфекции COVID-19. Поскольку фуллерены часто рассматривают как элементы си-  
*ПерсТ, 2020, том 27, выпуск 13/16*

стем доставки лекарственных средств, авторы работы [1] предложили лекарственную платформу, основанную на замещенных (содержащих атомы бора, алюминия или кремния) производных  $C_{60}$  и молекуле хлорохина, адсорбированной на их поверхности (см. рис.).



Молекулярный комплекс на основе фуллерена и хлорохина: а - незамещенный  $C_{60}$  и б - допированный фуллерен  $AlC_{59}$

С помощью компьютерного моделирования в рамках теории функционала плотности они постарались описать энергетические и электронные характеристики такого комплекса и оценить его перспективы в борьбе с коронавирусом. Авторы использовали для расчетов программу Gaussian09 и традиционный уровень теории B3LYP/6-31G(d). На первом этапе исследователи вычислили энергии связи и оценили устойчивость молекулярных комплексов с различным относительным расположением лекарства на поверхности незамещенного фуллера

рена. Оказалось, что наиболее стабильным как в газовой фазе, так и в водном растворе является комплекс, в котором атом азота в шестичленном кольце хлорохина ориентирован по направлению к поверхности фуллерена (рис. а). В дальнейшем именно такая молекулярная конфигурация была выбрана для допированных фуллеренов. Было установлено, что присутствие атома алюминия в наибольшей степени стабилизирует комплекс, а наименьшей устойчивостью обладает система, содержащая бор. Кроме того, допирование меняет слабое межмолекулярное взаимодействие  $C_{60}$  и хлорохина на сильное ковалентное связывание (рис. б). Сравнение энергий сольватации комплексов  $C_{60}$ /хлорохин и допированный  $C_{60}$ /хлорохин показывает, что допирование существенно увеличивает растворимость. При этом  $SiC_{59}$ /хлорохин и  $AlC_{59}$ /хлорохин обладают самыми высокими энергиями сольватации по сравнению с другими рассмотренными комплексами. На следующем этапе авторы с целью детального анализа электронных свойств лекарственной платформы рассчитали совокупность ее квантово-механических дескрипторов, в том числе HOMO-LUMO щель, химическую жесткость, индекс электрофильности, а также дипольные моменты. По сравнению с изолированными фуллереном и хлорохином формирование комплекса характеризуется увеличением индекса электрофильности, в также возникновением заметного дипольного момента. Последнее наблюдение является важным свойством с точки зрения процессов доставки лекарств в биологические системы. Так, рассчитанные дипольные моменты комплексов с замещенным фуллереном оказались больше, чем комплексов с "чистым"  $C_{60}$ . При этом система  $SiC_{59}$ /хлорохин обладает самым высоким дипольным моментом и поляризуемостью по сравнению с другими соединениями. Ученые дополнительно отмечают, что частотный анализ указывает на отсутствие мнимых колебательных мод, что свидетельствует о структурной устойчивости этих соединений. В конечном итоге, на основании полученных данных авторы пришли к выводу, что комплексы легированный фуллерен  $C_{60}$ /хлорохин, а именно  $AlC_{59}$ /хлорохин и  $SiC_{59}$ /хлорохин перспективны для доставки лекарства благодаря не только высокой реакционной способности, но и совокупности электронных и магнитных характеристик.

Жаль, что авторы не сравнили полученные данные с возможными фармацевтическими аналогами, однозначно предоставив роль курьера лишь фуллерену. С другой стороны, вполне возможно, что именно предложенный авторами молекулярный комплекс в будущем проявит себя в борьбе с COVID-19. Подождем экспериментальной проверки результатов.

М. Маслов

I. S.B.Novir et al., *Chem. Phys. Lett.* 757, 137869 (2020).

## НАНОМАТЕРИАЛЫ

### *Уроки природы. Жуки-усачи помогли создать фотонные пленки для эффективного пассивного охлаждения*

Обычные системы охлаждения такие, как рефрижераторы, кондиционеры, потребляют много энергии и выделяют дополнительное тепло во время работы. Альтернативой в ряде случаев являются пассивные системы охлаждения. В последние годы особое внимание привлекают фотонные структуры, которые снижают нагрев, отражая солнечное излучение, и повышают отвод тепла из объекта, который надо охладить. Предложены различные гибридные многослойные материалы, однако их изготовление является достаточно сложным, дорогим, а нужные свойства в полной мере не достигаются. Китайские исследователи совместно с коллегами из США и Швеции недавно представили новый гибкий, механически прочный "охлаждающий" материал, который к тому же может быть изготовлен в больших масштабах [1]. На создание эффективных фотонных пленок их вдохновило изучение жука-усача *Neocerambyx Gigas*, обитающего в жарком климате вблизи действующих вулканов в Таиланде и Индонезии (рис. 1).



Рис. 1. Жук *Neocerambyx Gigas*

Температура там часто превышает  $40^{\circ}C$ , а на поверхности земли достигает  $70^{\circ}C$ . Как же выживают эти жуки? Оказалось, что на их передних крыльях есть пушок, тончайшие волоски,

*Перст, 2020, том 27, выпуск 13/16*

структура которых обеспечивает нужную терморегуляцию.

Эти волоски имеют трехгранную форму от корня до кончика (треугольник в сечении). Две грани гладкие, а третья грань гофрированная, со складками шириной  $\sim 1000$  нм и высотой  $\sim 180$  нм (рис. 2). Авторы [1] изучили их оптические свойства и показали, что именно такая двухуровневая структура обеспечивает 65% отражения в видимой и ближней ИК (vis-NIR) областях спектра.

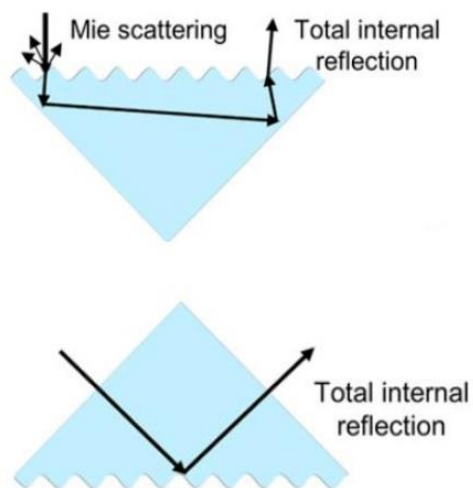
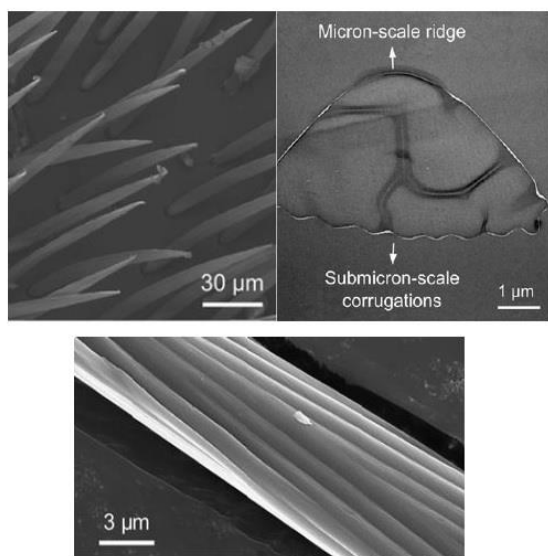
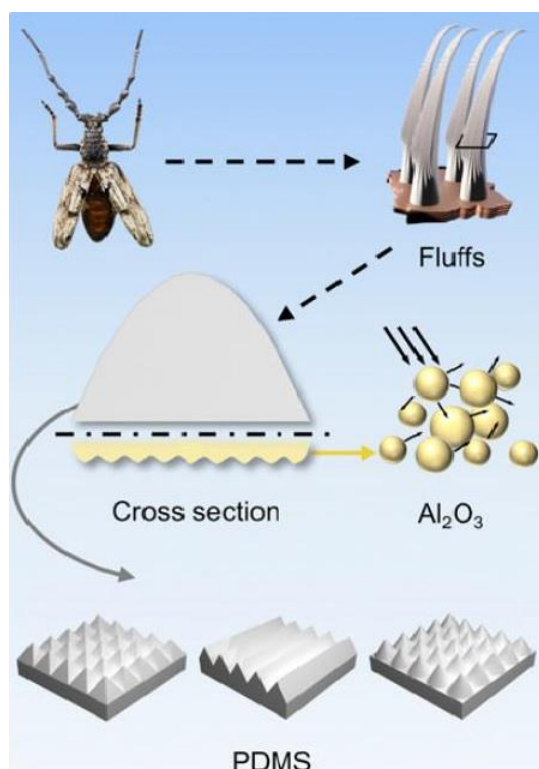


Рис. 2. Волоски на крыльях жука. Вверху: общий вид (SEM) и сечение волоска (ТЕМ). Внизу: SEM изображение гофрированной грани. Схематически показано отражение света, падающего на разные грани, обусловленное рассеянием Ми и полным внутренним отражением.

Исследователи, вдохновленные, по их словам, сверкающими золотистыми жуками, создали гибкие гибридные фотонные пленки для пассивного охлаждения. Диэлектрические сферические микрочастицы внедрены в плоскую матрицу из полидиметилсилоксана (PDMS), верхняя часть которой представляет собой массив микропирамид. Микросферы, которые играют роль складок на волосках, обеспечивают сильное Ми рассеяние, а микропирамиды – полное внутреннее отражение. На рис. 3 показана имитация охлаждающей системы жука новой PDMS- $\text{Al}_2\text{O}_3$  структурой. По результатам моделирования авторы из трех вариантов микроструктуры – пирамиды, конусы и призмы – выбрали микропирамиды.

Рис. 3. Схема создания фотонной пленки по мотивам волосков жука.



Микросферы  $Al_2O_3$  незначительно поглощают излучение vis-NIR диапазона. Материал PDMS прозрачен в vis-NIR диапазоне и имеет сильное MIR поглощение/излучение.

Для изготовления пленок используют известные методы – фотолитографию, ионное и химическое травление, нанесение центрифугированием покрытия из раствора PDMS с микросферами  $Al_2O_3$ . Таким способом можно делать пленки большой площади. Структура гибкой гибридной пленки, SEM изображение ее сечения и фотография рулона шириной 30 см показаны на рис. 4.

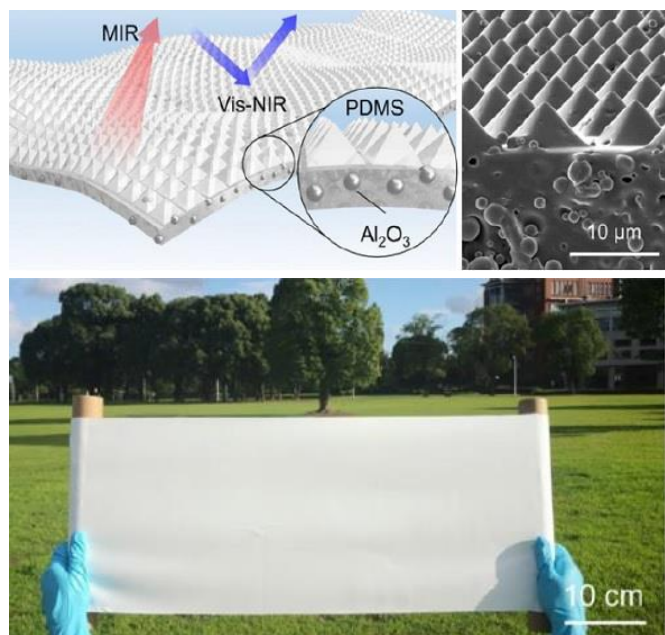


Рис. 4. Структура гибкой гибридной пленки из PDMS и микросфер  $Al_2O_3$ , SEM изображение ее сечения и фотография рулона шириной 30 см.

Пленка отражает ~ 95% солнечного излучения, а в ИК диапазоне ее излучательная способность  $> 0,96$ . При прямом солнечном воздействии температура снижается на  $5^\circ C$ . Авторы [1] продемонстрировали некоторые примеры практического использования – зонт от солнца и дождя (новая пленка гидрофобна), защита мобильных телефонов, охлаждение части тела (руки) в жаркие дни, охлаждение автомобиля (рис. 5).

В примере с автомобилем показано изменение в течение 60 мин температуры незащищенной поверхности капота, поверхности под белой бумагой и под пленкой того же размера.

Можно ожидать, что гибкая, эластичная, механически прочная пленка найдет применение для пассивного охлаждения зданий, различных приборов, носимой электроники и даже тела.

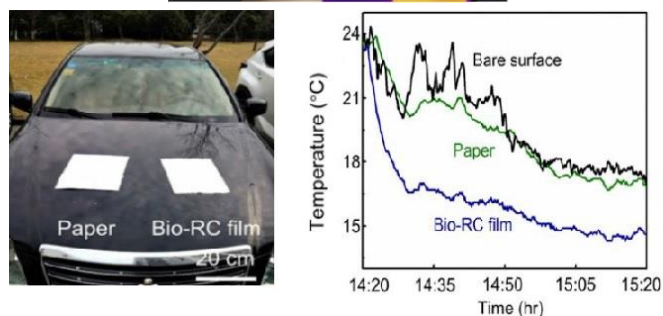


Рис. 5. Охлаждение руки с помощью пленки (в том числе для уменьшения неприятных тепловых воздействий от носимой электроники); фотография автомобиля, на капоте которого находятся лист бумаги и кусок пленки, и соответствующие изменения температуры.

О. Алексеева

\* *Рассеяние Ми* – рассеяние света сферической частицей – классическая задача электродинамики, решенная немецким физиком Густавом Ми (Mie) в 1908 году.

1. H.Zhang et al., PNAS 117, 14657 (2020).

## ДЛЯ ПРАЗДНОГО УМА

### Санкт-Петербургская лотерея в сопромате

Около двухсот лет назад Даниил Бернулли в “Комментариях Санкт-Петербургской Академии”, разъясняя некоторые аспекты теории вероятностей, описал парадокс, получивший название *санкт-петербургского* (само же авторство парадокса большинство историков науки приписывают двоюродному брату Даниила – Николаю Бернулли, а иные – Леонарду Эйлеру).

Представим себе лотерею, проводимую по следующим правилам: если при первом броске выпадает “орел”, игрок получает 1 рубль, если эта сторона монеты выпадет только при повторном броске, то игрок получает 2 рубля, если в серии бросков “орел” появится только на третий раз, то 4 рубля, на четвертый – 8 рублей, и так далее по степеням двойки. Какую сумму не жалко заплатить за участие в такой лотерее? Нетрудно проверить, что ряд из слагаемых, являющихся произведением вероятности каждого из событий на сумму выигрыша

$(1/2)^n \times 2^n$ , представляет собой не что иное, как последовательность единиц, и такой ряд, конечно, расходится. Это значит, что, теоретически, в “петербургской лотерее” можно поставить любую сумму денег и не прогадать. Однако же опытный игрок не поставит и 30 рублей, и будет прав. Дело в том, что в реальной жизни количество бросков всегда конечно, а длина серии  $n$  из сплошных “решек”, которая ведет к большому выигрышу, растет с общим количеством бросков  $N$  очень медленно:  $n \sim \ln(N/2)$ . Игрок просто не дожидется большого куша: чтобы получить хотя бы 32 рубля (серия из пяти решек подряд) нужно в среднем подкидывать монетку почти 3 тысячи раз – этак и палец отвалится...

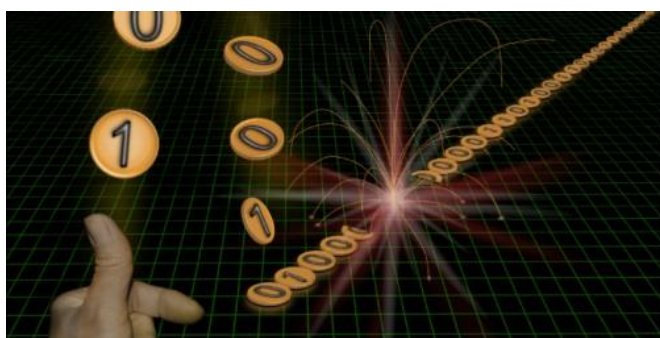


Рис. 1. Вероятность разрыва волокна описывается теми же законами, что и выигрыш в “санкт-петербургской лотерее” [1].

В недавней работе американских ученых санкт-петербургский парадокс применяется для объяснения другого явления – разрыва волокон [1]. Дело в том, что исходя из той же логики, как и с лотереей, можно прийти к выводу, что веревки, тросы и прочий крепеж должен гарантированно разрушаться, поскольку в каком-то месте обязательно найдется критическое количество дефектов: цепочка дефектов аналогична последовательному выпадению решек, а своеобразным “выигрышем” здесь является разрыв волокна. По счастью, это справедливо только для бесконечно длинных волокон и проволок, в реальности же, как показали авторы [1], критическая сила разрыва уменьшается с длиной волокна очень медленно, опять-таки, по логарифмическому закону.

Чтобы доказать логарифмическую зависимость, авторам пришлось исследовать на разрыв проволоки в довольно широком диапазоне длин – от 1 мм до 1 км, так что измерения с волокнами длиннее метра происходили не в стенах лаборатории, а на велодорожке. Как показал эксперимент на волокнах полиэстера и по

лиаида, если по горизонтальной оси графика длину волокна откладывать в логарифмическом масштабе, то экспериментальные значения силы разрыва, действительно, ложатся на нисходящие прямые. Резюмируя, авторы делают обобщение: санкт-петербургский парадокс описывает любые явления, чувствительные к редким событиям.

*А. Пятаков*

*1. J.Fontana and P. Palfy-Muhoray, Phys. Rev. Lett. 124, 245501 (2020).*

## КОНФЕРЕНЦИИ

**2020 International Conference on “Physics and Mechanics of New Material and Their Applications” (PHENMA-2020), March 26-29, 2021, Kitakyushu, Japan**

Конференцию предполагалось провести 2-5 октября 2020 г., но из-за пандемии Covid 19 она была перенесена на следующий год.

**The scope of the conference includes the following topics, namely:**

- 1. Materials:** Ferro-Piezoelectrics, Semiconductors, Superconductors, Environmental Materials, Composite, Ceramics, Thin Films, Nanomaterials, Advanced Materials for Additive Manufacturing, Metal Engineering Materials, Functionally Graded Materials etc.
- 2. Synthesis & Processing:** Powder Processing, Processing Technologies, Piezoelectric Technologies, MEMS-Processing, etc.
- 3. Characterization and Research Methods:** Material Design, Microstructure Properties, Physical Properties, Mechanical Properties, Strength Properties, Finite-Element Modeling, Mathematical Modeling, Physical Modeling, Physical Experiment, etc.
- 4. Applications:** MEMS, Hetero-structures, Piezotransducers, Energy Harvesting, Superconductive Devices, Light-Emitting Diodes, Multimedia Communication, Fiber Reinforced Composites, Construction Health Monitoring, Lubricant and Tribology, etc.
- 5. Underwater Technologies:** Underwater Communication, Marine Engineering, Power System, Ocean Energy, etc.

6. **Biomedical Engineering:** Medical Materials, Nanotechnology in Medicine, Medical Instrumentation, Physical Methods in Medicine, Waste, Biological Product Processing, etc.
7. **Industry and Management:** CAD/CAM/CAE Application, Industrial Instruments, EDM, Materials Machining, Machines, Design and Building Constructions, etc.

The conference will consist of keynote, oral and poster sessions.

#### **Dates & Deadlines**

- Deadline for Abstracts:  
**September 01, 2020**
- Notification of Acceptance:  
**October 01, 2020**
- Preliminary registration of abstracts:  
**September 01, 2020**

The abstracts up to one page in WORD (\*.docx) should be submitted by e-mail before September 01, 2020 to: [parinov\\_ia@mail.ru](mailto:parinov_ia@mail.ru). Authors will be notified by Acceptance: October 01, 2020 whether the contribution has been accepted.

Web site: <http://www.phenma2020.sfedu.ru/>

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  
Выпускающий редактор: И.Фурлетова  
Адрес редакции: 119296 Москва, Ленинский проспект, 64