

В этом выпуске:

ГРАФЕН

Концентратор метана на основе пористого колонного графена

Метан – природный газ, не имеющий ни цвета, ни запаха, который всегда считался перспективным энергоносителем благодаря сравнительной безопасности и нетоксичности для человека и окружающей среды. Кроме того, его можно отнести к категории возобновляемых источников энергии, поэтому запасание метана и создание высокочемических аккумуляторов этого газа остается актуальной задачей. Совсем недавно министерство энергетики США (DOE) обновило свой стандарт для эффективных метан-сорбционных материалов. В условиях эксплуатации объемная емкость должна составлять $11.741 \text{ ммоль/см}^3$ ($\rho = 0.188 \text{ г/см}^3$) и гравиметрическая емкость – 33.3 масс. %. Эти ограничения накладывают на “газовые контейнеры” дополнительные условия, а именно, они должны обладать достаточной площадью поверхности и низкой плотностью. Долгое время в качестве концентраторов метана казались перспективными чисто углеродные наноструктуры, в частности фуллерены, нанотрубки или графен. Рассматривались в литературе и более сложные композитные системы, например, колонный графен, который построен из параллельных листов графена, ковалентно связанных между собой углеродными нанотрубками.

Ученые из Sichuan Univ. (Китай) [1] сделали следующий шаг в этом направлении и предложили в качестве хранилища для метана семейство пористых колонных графенов, а непосредственной целью исследования стало определение их оптимальных геометрических параметров в широком диапазоне давлений для достижения максимальной эффективности запасаения газа. Изолированный лист пористого графена представляет собой квазидвумерный слой атомов углерода с равномерно распределенными по поверхности порами (расстояние между порами около 7.4 \AA) одинакового размера (диаметром $\sim 2.48 \text{ \AA}$). Такая структура может быть получена посредством удаления части бензольных колец в традиционном графене с последующей пассивацией свободных связей атомами водорода (рис. 1). В этом случае часть углеродных атомов замещается водородом, что приводит к уменьшению плотности до 0.54 мг/м^2 , что на 30% ниже по сравнению с классическим графеном (0.77 мг/м^2) и это, соответственно, существенно должно повысить эффективность адсорбции. Система, которую авторы моделировали, включала пористый колонный графен (состоящий из различного числа слоев пористого графена, скрепленных (6,6) нанотрубками) в качестве

И далее ...

НАНОМАТЕРИАЛЫ

- 2 Наночастицы помогут в борьбе с бактериями зубного налёта

МУЛЬТИФЕРРОИКИ

- 4 Фтороперовскит NaMnF_3 : новый виртуальный мультиферроик

ВЕСТИ С КОНФЕРЕНЦИЙ

- 6 В Баку отметили 100-летний юбилей Гасана Багировича Абдулаева

ТОРЖЕСТВО

Нобелевская премия 2018 г.

КОНФЕРЕНЦИИ

- 7 Третья российская конференция “Графен: молекула и 2D кристалл”, 5-9 августа 2019 г., г. Новосибирск

адсорбента, и собственно метан в качестве адсорбата.

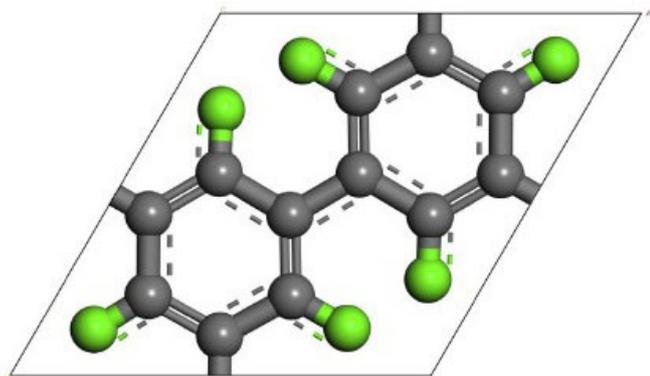


Рис. 1. Элементарная ячейка пористого графена.

Исследования проводили при комнатной температуре (298 К). Межатомное взаимодействие в процессе молекулярной динамически описывали в рамках классического потенциала ReaxFF, реализованного в программе LAMMPS, с использованием периодических граничных условий. Полученные авторами результаты говорят в пользу пористого колонного графена. Эти наноструктуры способны стать лучшими аккумуляторами метана из известных: максимальное количество адсорбированного газа (21.3 ммоль/г) достигается при использовании четырехслойного пористого колонного графена (рис. 2) с расстоянием между слоями 1.2 нм и промежутками между колоннами, в два раза превышающими интервалы между порами, и давлении 40 бар.

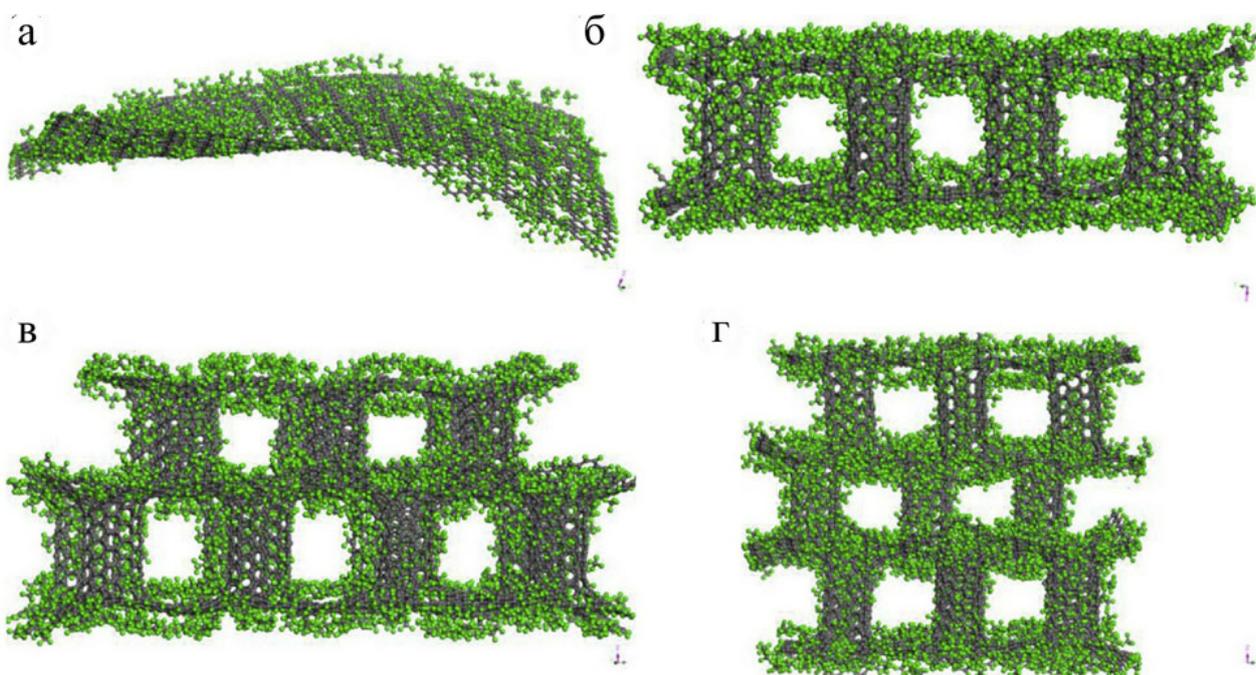


Рис. 2. Визуализация адсорбции метана на колонный пористый графен, построенный из одного (а), двух (б), трех (в) и четырех (г) слоев, при давлении 40 бар.

Кроме того, оказалось, что дополнительная деформация углеродных нанотрубок, объединяющих слои, улучшает адсорбционные характеристики материала. По мнению авторов, пористый колонный графен – это именно та система, которая способна удовлетворить жестким стандартам DOE и проявить себя в качестве основы топливных элементов “энергетики на метане”.

М.Маслов

1. H.Jiang et al., *J. Mol. Graph. Model.* **85**, 223 (2018).

НАНОМАТЕРИАЛЫ

Наночастицы помогут в борьбе с бактериями зубного налёта

Зубной налёт – скопление на поверхности зубов различных бактерий, обитающих в полости рта. Одной из наиболее вредных бактерий является стрептококк *S.mutans*, который не только вызывает кариес, но без должного лечения может привести к сер-



дечнососудистым заболеваниям, диабету, бактериальной пневмонии. К сожалению, удалить зубной налёт очень сложно, поскольку бактерии образуют биопленку – колонии клеток, погруженных в синтезированное ими полимерное вещество. Этот внеклеточный матрикс защищает бактерии от внешнего воздействия, в том числе от лекарств. Еще одна проблема заключается в том, что биоплёнку на поверхности зуба сложно обнаружить. Обычно используют интраоральную рентгенографию. Для улучшения изображения предлагают применять новые рентгеноконтрастные агенты в виде наночастиц, например, нано-Au или нано-Bi. Однако золото – дорогой материал, а висмут – токсичен. Исследователи из Univ. of Illinois at Urbana-Champaign (США) впервые продемонстрировали, что синтезированные ими наночастицы на основе оксида гафния (Hf PS NP) эффективны не только для диагностики, но и для уничтожения вредных биоплёнок [1]. Наночастицы HfO₂ диаметром ~ 4 нм получали золь-гель методом. Затем поверхность модифицировали с помощью специального полимера (PS),

который придавал им бактерицидные свойства. В исследованиях использовали водные дисперсии наночастиц нужной концентрации. В некоторых экспериментах, требующих адресной доставки наночастиц, к ним присоединяли пептиды, обеспечивавшие специфическое связывание с *S.mutans* (но не обладающие бактерицидным действием). Такие “нацеленные” наночастицы важны для локализации вредной биоплёнки.

Эксперименты *in vitro* показали, что контрастное усиление, полученное с помощью Hf PS NP, на 30% выше, чем для распространенного контрастного вещества на основе йода. Используя стоматологический рентгеновский радиографический метод и наночастицы с пептидами, авторы [1] смогли *ex vivo* обнаружить бактериальную пленку *S.mutans* на удаленном зубе человека (зуб был помещен в мясо цыпленка). Более того, после 20-минутной обработки наночастицами число колоний значительно уменьшилось.

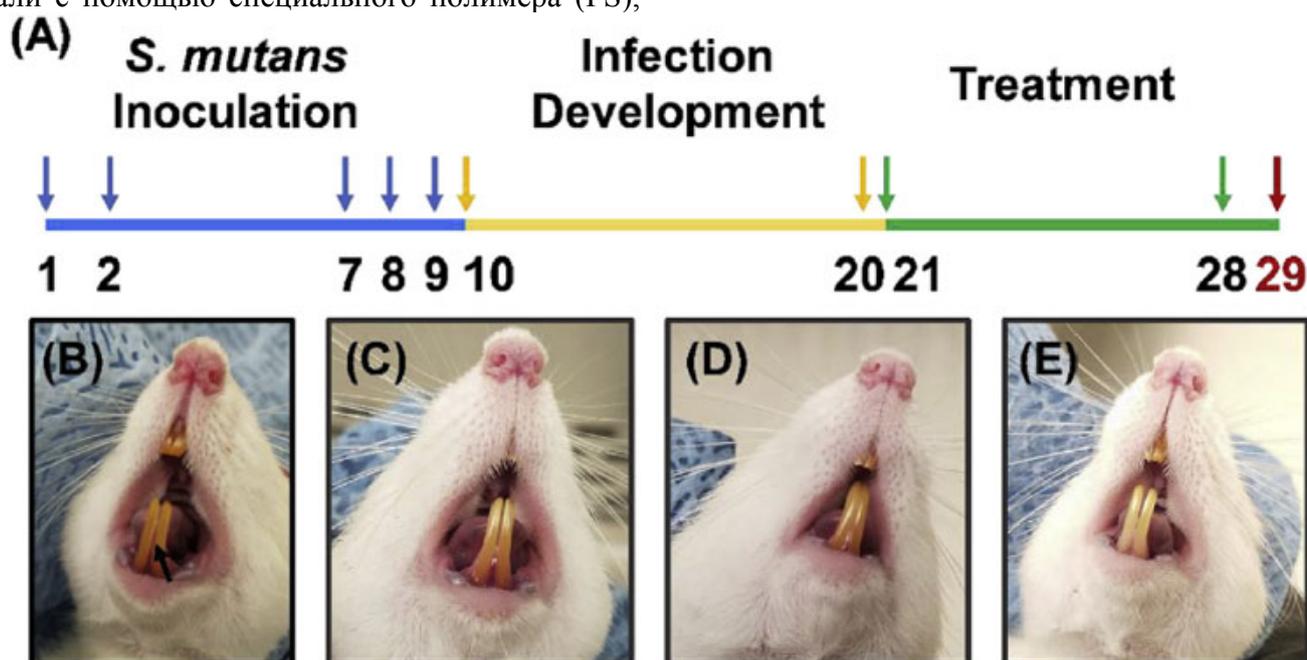


Рис. 1. *In vivo* эксперименты на крысах. (А). Протокол эксперимента. Введение бактерий. Развитие инфекции. Обработка биопленки. (В) вид зуба после образования биопленки и после обработки (С) водой, (D) хлоргексидином, (Е) наночастицами.

Затем исследователи перешли к важным исследованиям *in vivo* (рис. 1). На рис. 1А показан протокол 29-дневного эксперимента. Крысам ввели бактерии *S.mutans*. Внешний вид зуба после формирования биопленки показан на рис. 1В. Грызунов разделили на три группы. В течение 8 дней проводили обработку зрелых биоплёнок водой, антисептиком хлоргексиди-

ном (0.2 мг/мл) и наночастицами (0.2 мг/мл). Вид зубов после окончания обработки показан на рис. 1С (обработка водой), рис. 1D (обработка хлоргексидином) и рис. 1 Е (обработка наночастицами). Как видно на фотографиях, обработка наночастицами привела к наилучшему результату.

После окончания обработки крыс умертвили и подсчитали число колоний *S.mutans* в каждой группе (рис. 2). Результаты подтвердили эффективность действия наночастиц. Дополнительные эксперименты показали, что гибель бактерий происходит вследствие повреждения клеточной мембраны.

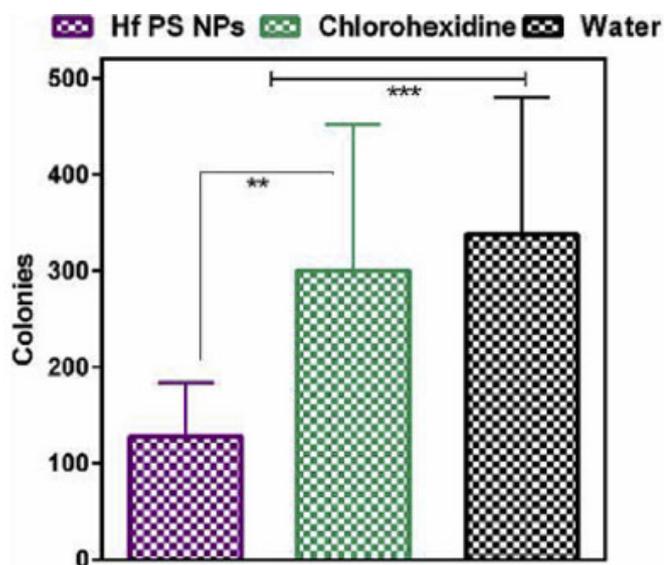


Рис. 2. Число колоний *S.mutans* в каждой из групп крыс после соответствующей обработки.

На модельных клетках авторы [1] проверили, насколько безопасны Hf PS наночастицы для клеток дёсен. Обработку проводили в течение 20 мин (этого времени достаточно для уничтожения *S.mutans*). Выживаемость клеток после воздействия наночастиц оказалась даже выше, чем после обработки (в той же концентрации) широко применяемым хлоргексидином (рис. 3).

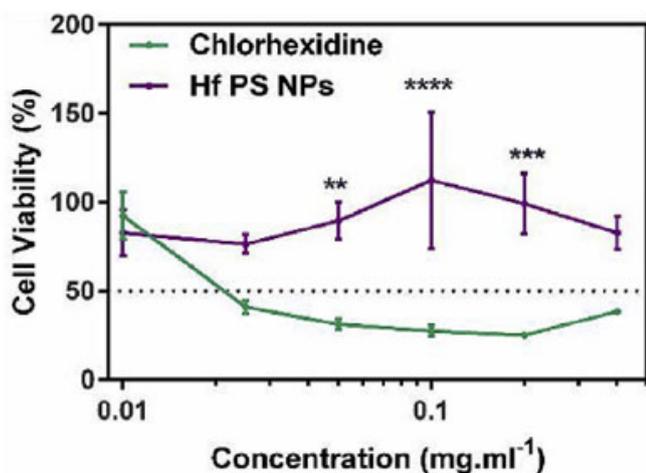


Рис. 3. Выживаемость клеток после воздействия хлоргексидина и наночастиц.

Исследователи считают, что предложенный ими подход использования наночастиц как для диагностики, так и для лечения, может оказать помощь в борьбе и с другими бактериальными

инфекциями, например, вызывающими желудочно-кишечные заболевания.

О. Алексеева

1. F.Ostadossein et al., *Biomaterials* **181**, 252 (2018).

МУЛЬТИФЕРРОИКИ

Фтороперовский NaMnF_3 : новый виртуальный мультиферроик

Как часто бывает в науке, рождение новой области или возрождение интереса к ранее известной проблеме, начинается с вопроса, поставленного подчас в острой, даже провокационной форме. Так, ренессанс магнитоэлектрической тематики в начале столетия ознаменовался статьей “Почему так мало магнитных сегнетоэлектриков?” [1]. Спустя десятилетие интенсивных исследований мультиферроиков, преимущественно оксидов, ироническим парадоксом прозвучал обзор “Магнитные фториды: почему так много магнитных сегнетоэлектриков” [2], в котором на примере веществ, находившихся на периферии магнитоэлектрических исследований, было показано, что сегнетоэлектричество в магнитоупорядоченных средах не столь уж редкое явление. Примечательно, что за рамками этого обзора остались фториды со структурой перовскита как материалы с хорошо изученными магнитными и другими свойствами, но считавшиеся малоперспективными в магнитоэлектрическом отношении. Однако, недавние расчеты из первых принципов показали, что кристаллическая решетка фтороперовскитов характеризуется сегнетоэлектрической неустойчивостью, а магнитный перовскит NaMnF_3 может обладать магнитоэлектрическими свойствами [3].

В недавней работе исследователей из Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН [4] были впервые экспериментально изучены температурные зависимости диэлектрических свойств NaMnF_3 , а также ряда других магнитных и немагнитных фтороперовскитов. Результаты исследований не только подтвердили предсказания первопринципных расчетов [3], но и преподнесли ряд сюрпризов (см. рис.).

Во-первых, бросается в глаза сильный аномальный рост диэлектрической проницаемости с понижением температуры, достигающий 170% от высокотемпературной величины, что, действительно, свидетельствует о наличии сегнетоэлектрической неустойчивости. Во-

вторых, в низкотемпературном диапазоне этот рост уже не описывается классическим законом Кюри-Вейса, а намного лучше описывается зависимостью Барретта, характерной для квантовых параэлектриков. В этом отношении фтороперовскит NaMnF_3 подобен известному “виртуальному сегнетоэлектрику” (incipient ferroelectric) титанату стронция SrTiO_3 , в котором квантовые флуктуации пре-

пятствуют сегнетоэлектрическому упорядочению. И далее, при охлаждении ниже температуры магнитного упорядочения $T_N \sim 66$ К, экспериментальная кривая существенно отклоняется от квантовой зависимости за счет гигантского магнитодизэлектрического эффекта $\Delta\epsilon^m \sim 25\%$ (MD effect), что свидетельствует о связи нестабильности решетки с магнетизмом.

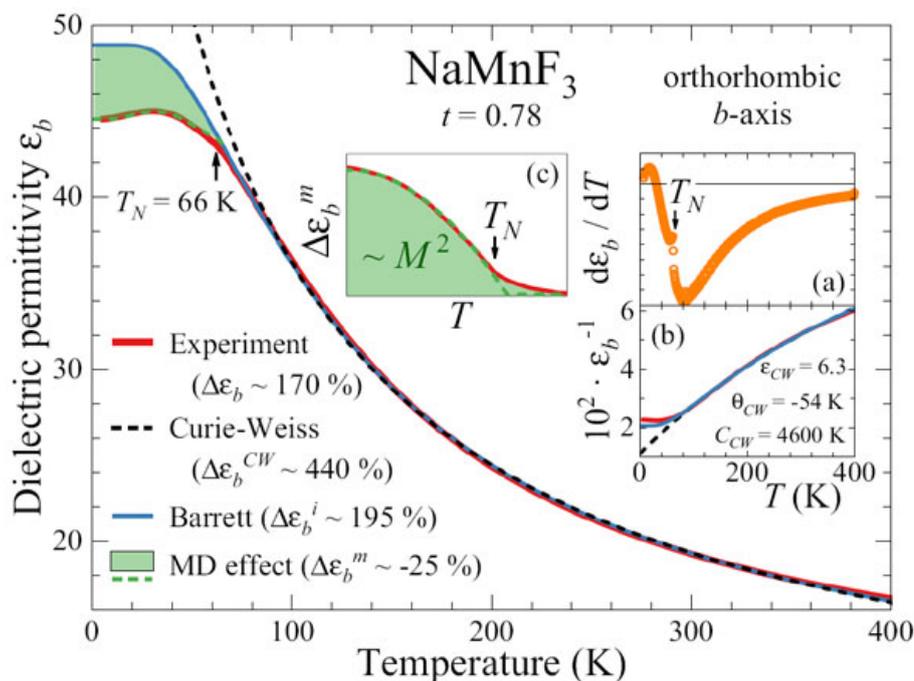


Рис. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости фтороперовскита NaMnF_3 . На вставках: а - производная от проницаемости по температуре с четкой аномалией в точке Нееля $T_N \sim 66$ К; б - зависимость обратной проницаемости, которая отклоняется от классического закона Кюри-Вейса; в - магнитодизэлектрический эффект (MD), пропорциональный квадрату магнитного параметра порядка.

Таким образом, данное исследование выявило новую группу магнитоэлектрических перовскитов, альтернативных оксидным соединениям, со многими физическими свойствами, существенно отличными от оксидов (очень низкие диэлектрические потери, большая ширина запрещенной зоны и др.). Полученные результаты позволяют предсказать существование интересных проявлений магнитоэлектрических взаимодействий в других фтороперовскитах, например в NaCrF_3 (ян-теллеровский ион Cr^{2+}), в NaFeF_3 (ион Fe^{2+} с сильной спин-орбитальной связью) и в других. Это исследование открывает интересные перспективы перед деформационной инженерией, примером которой служит индуцированное механическими напряжениями сегнетоэлектрическое состояние в титанате стронция. Действительно, напряженные пленки NaMnF_3 и возможно других фтороперовскитов

могут из виртуальных мультиферроиков перейти в реальные

А. Пятаков

1. N.A.Hill, *J. Phys. Chem. B* **104**, 6694 (2000).
2. J.F.Scott and R. Blinc, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 299401 (2011).
3. A.C.Garcia-Castro et al., *Phys. Rev. B* **89**, 104107 (2014).
4. R.M.Dubrovina et al., *Phys. Rev. B* **98**, 060403(2018).

ВЕСТИ С КОНФЕРЕНЦИЙ

В Баку отметили 100-летний юбилей Гасана Багировича Абдуллаева

Избрание Гасана Абдуллаева в 1970 г. президентом Академии наук Азербайджана привело к развитию новых для республики направлений фундаментальных наук: электрохимии, биохимии, биофизики, молекулярной биологии, молекулярной генетики и т.д.

Программа Международной конференции и школы, посвященных 100-летию академика Г.Б. Абдуллаева (МТСМР – 2018), охватывала многие области физики конденсированного состояния, а также радиационной физики, астрофизики, физической химии, кристаллографии, биофизики.



В программу юбилейной конференции также вошли выступления соратников Г.Б. Абдуллаева, которые поделились воспоминаниями о выдающемся ученом. В торжествах приняла участие представительная делегация Российской академии наук (Ж.И. Алферов, Е.П. Велихов; В.А. Матвеев и др.).

“Абдуллаевские семинары” постепенно получили сначала всесоюзное, а потом и всемирное признание, на них съезжались ведущие исследователи из разных стран, в том числе лауреаты Нобелевской премии, действующие и будущие. Вот как вспоминает о своем коллеге и друге академик РАН, нобелевский лауреат Жорес Алферов: “Когда я стал заниматься гетеропереходами, именно Гасан Багирович предложил провести один из первых семинаров по этой тематике в Баку, взяв на себя все организационные хлопоты. А подводя его итоги, дал прекрасное определение гетеропереходов: “Жорес, гетеропереход - это брак между мужчиной и женщиной разных национальностей”.

Вспоминая великих ученых, мы можем перечислять не только их дела, научные открытия, но и их шутки, достойные остаться в памяти поколений.

Вспоминая великих ученых, мы можем перечислять не только их дела, научные открытия, но и их шутки, достойные остаться в памяти поколений.

ТОРЖЕСТВО

Нобелевская премия 2018 г

С 1 по 8 октября 2018 года в Стокгольме и Осло прошла 117-я Нобелевская неделя, на которой стали известны имена лауреатов Нобелевской премии в области медицины и физиологии, физики, химии, премии мира и экономики.



По физике награждены Артур Эшкин, Жерар Муру и Донна Стрикленд за “новаторские изобретения в области лазерной физики”.

Их открытия произвели революции в лазерной физике, и сегодня “чрезвычайно маленькие объекты и невероятно быстрые процессы можно наблюдать в новом свете”.

А.Эшкин получит половину награды “за оптические пинцеты и их применение в биологических системах”. Другую половину вручат профессорам Ж.Муру и Д.Стрикленд “за разработку метода генерации высокоинтенсивных ультракоротких оптических импульсов”.

По химии премию присудили Фрэнсис Арнольд, Джорджу Смиту и Грегори Уинтеру за работы по направленной эволюции химических молекул.

Эти достижения позволят, в частности, создавать новые лекарства.

Ф.Арнольд удостоена премии за работы по направленной эволюции ферментов - молекул, катализирующих биохимические реакции, а Д.Смит и Г.Уинтер - за создание метода так называемого фагового дисплея пептидов и антител, позволяющего довольно просто и при этом эффективно выбирать биологические молекулы, белки и пептиды с нужными свойствами.

КОНФЕРЕНЦИИ

Третья российская конференция “Графен: молекула и 2D кристалл”, 5-9 августа 2019 г., г. Новосибирск

Научные направления:

- Химический и CVD синтезы графена и родственных материалов
- Химическая модификация графена и гибридных 2D материалов
- Топологические изоляторы и полуметаллы Вейля
- Диагностика графена и других 2D материалов
- Теория, строение и моделирование свойств графена и родственных низкоразмерных материалов
- Графеновая электроника
- Механические и электромеханические свойства и приложения
- Оптические и электромагнитные свойства и приложения
- Применение графена и родственных материалов в электрохимии

Желающим принять участие в конференции необходимо заполнить регистрационную форму на веб-сайте <http://grapheneconf.nsu.ru> и ввести название доклада. Официальный язык конференции – русский.

Заявка на участие должна быть представлена до **1 января 2019 года**.

Тезисы должны быть загружены на сайт до **1 марта 2019 года**.

Сайт: <http://grapheneconf.nsu.ru>

E-mail: graphene@niic.nsc.ru

Телефон: 383 330 53 52 (ИНХ СО РАН)

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

Главный редактор: И.Чугуева, e-mail: 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^а