

ISSN: 2782-5515



ИФТТ РАН
ISSP RAS

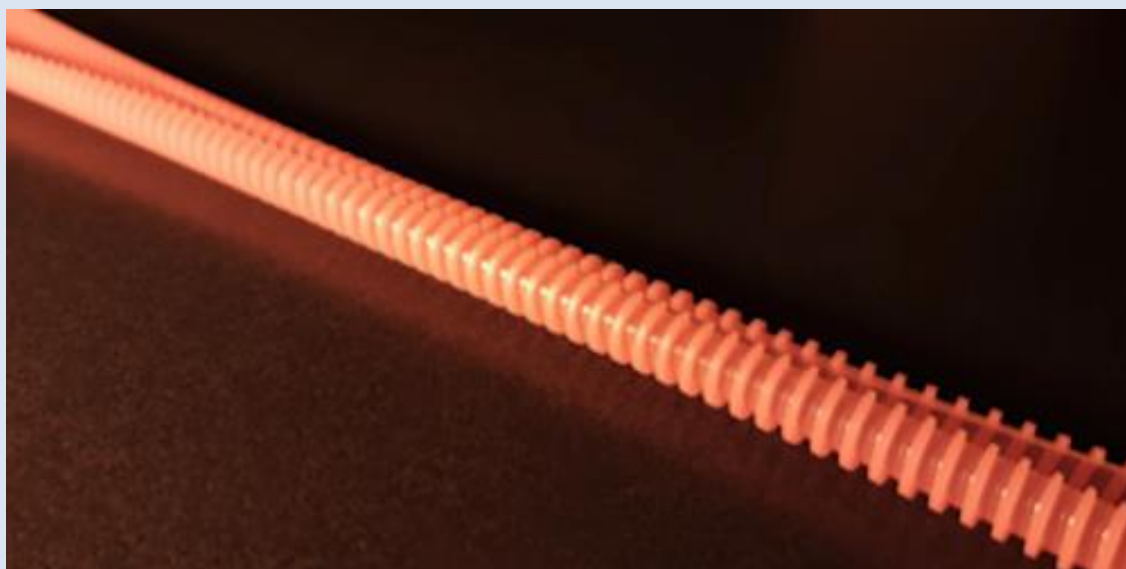
ПерсТ

Информационный бюллетень

перспективные технологии
наноструктуры сверхпроводники фуллерены

Том 28, выпуск 19/20

октябрь 2021 г.



E. Reyssat/ESPCI-PSL, Sorbonne University

Черноголовка

МИКРОТЕХНОЛОГИИ

Ленточки в косую полосочку: где кончается текстурный дизайн и начинается деформационная инженерия

Сложные деформации структурированных материалов сейчас активно изучаются в связи с новым направлением в электронике – стрейнтронике. Кроме сжатия-растяжения, также представляют интерес кручение и изгиб, изменяющие симметрию материала. В связи с этим обращает на себя внимание недавняя работа французско-бельгийской команды исследователей (Univ. Libre de Bruxelles, Sorbonne Univ.) [1]. Они обнаружили эффект самопроизвольного изгиба текстурированного материала под действием растяжения.

Объектом исследования послужили ленты, изготовленные из силиконовой резины с периодической системой полос-неоднородностей. Ленты печатали на 3D-принтере, причем размер и ориентацию полос варьировали. Чтобы измерять кривизну, использовали лазерный луч-подсветку (см. рис. 1)

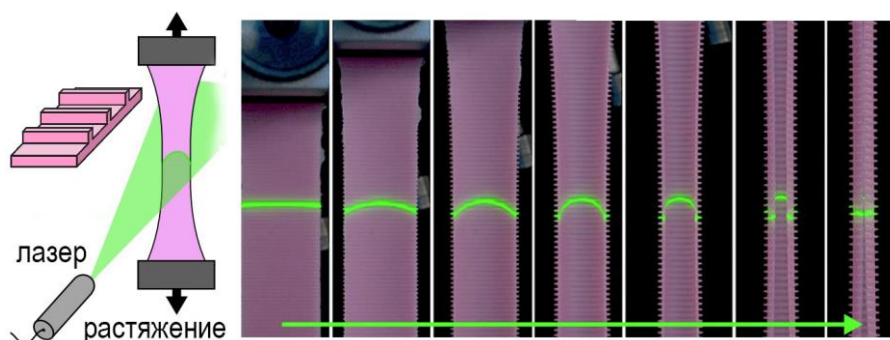


Рис. 1. Схема и результаты эксперимента из работы [1].

Авторы экспериментально исследовали зависимость кривизны ленты от ее растяжения, а также создали аналитическую теорию эффекта. Механизм образования кривизны объясняется очень просто. Под действием продольного растяжения ленты её ширина уменьшается на величину, определяемую как произведение коэффициента Пуассона на приращение длины ленты. В то же время, полосы текстуры, ориентированные поперек ленты, укорачиваются на величину, также определяемую как произведение коэффициента Пуассона, но на приращение их ширины, то есть величину пренебрежимо малую. В результате, пытаясь сохранить свою длину, полосы выгибаются, обеспечивая общий изгиб ленты. Этот изгиб увеличивается с увеличением растяжения (рис. 1). Если переусердствовать с узостью полосок, то возникает ещё один эффект – полоска образует не один изгиб, а несколько, формируя волны (рис. 2б).

И далее ...

НАНОМАТЕРИАЛЫ

4 Борофен: От слоя к слою

СНОВА К ОСНОВАМ

5 Лучше один раз увидеть, чем сто раз услышать: скачки Баркгаузена в сегнетоэлектрике

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

6 Украшение из скандия для притяжения водорода

ТОРЖЕСТВО

7 Нобелевская премия 2021

ВЕСТИ С КОНФЕРЕНЦИЙ

8 Восьмая Всероссийская конференция с международным участием “Топливные элементы и энергоустановки на их основе” и Пятая школа молодых ученых “Современные аспекты высокоэффективных топливных элементов и энергоустановок на их основе”

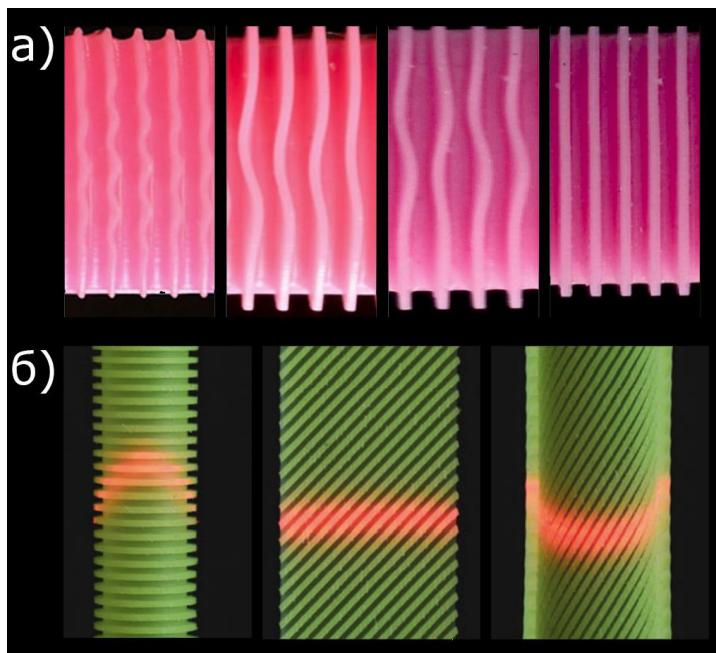


Рис. 2. а - Образование нескольких изгибов; б - изменение кривизны при различной ориентации полос

А что будет с лентой в косую полоску? Оказывается, кривизна максимальна при ориентации полос перпендикулярно ленте, затем она уменьшается до нуля, а потом снова появляется, но уже с обратным знаком – лента изгибается в другую сторону (см. рис. 2а). Теоретические расчеты показывают, что тангенс угла скоса, при котором кривизна обращается в ноль, равен коэффициенту Пуассона, и экспериментальные данные это подтверждают.

Для того чтобы самим наблюдать описанный выше эффект, необязательно покупать 3D-принтер. Во имя науки я пожертвовала силиконовым ковриком для выпечки, вырезав из него три ленты: одну ленту оставила пустой, на вторую наклеила суперклеем маленькую полоску перпендикулярно ленте, а на третью - полоску под углом примерно 30° . Концы лент, в свою очередь, я приклеила к палочкам для суши (рис. 3а). Держась за них, можно равномерно растягивать ленты и наблюдать, как искривляется лента в том месте, где наклеена перпендикулярная полоска (рис. 3б, контраст увеличен, чтобы было лучше видно).



Рис. 3. Эксперимент с силиконовыми лентами в домашних условиях

Чтобы увидеть эффект нескольких изгибов, я наклеила на ленту две полоски разной толщины (рис. 3в). “Толстая” полоска при растяжении ленты дала обычный изгиб, а “тонкая” *ПерсТ, 2021, том 28, выпуск 19/20*

образовала волну, правда, неправильную – не так легко ровно вырезать тонкую полоску (рис. 3г, контраст увеличен). Подобный опыт

может сделать каждый, чтобы ещё раз почувствовать удивительные законы упругости.

Таким образом, дизайн текстуры перестает быть чисто эстетической деятельностью, превращаясь в инженерную науку. Эффекты самопроизвольного образования кривизны при растяжении могут быть использованы для создания устройств стрейнтроники, а также мягких захватов в робототехнике.

З. Пятакова

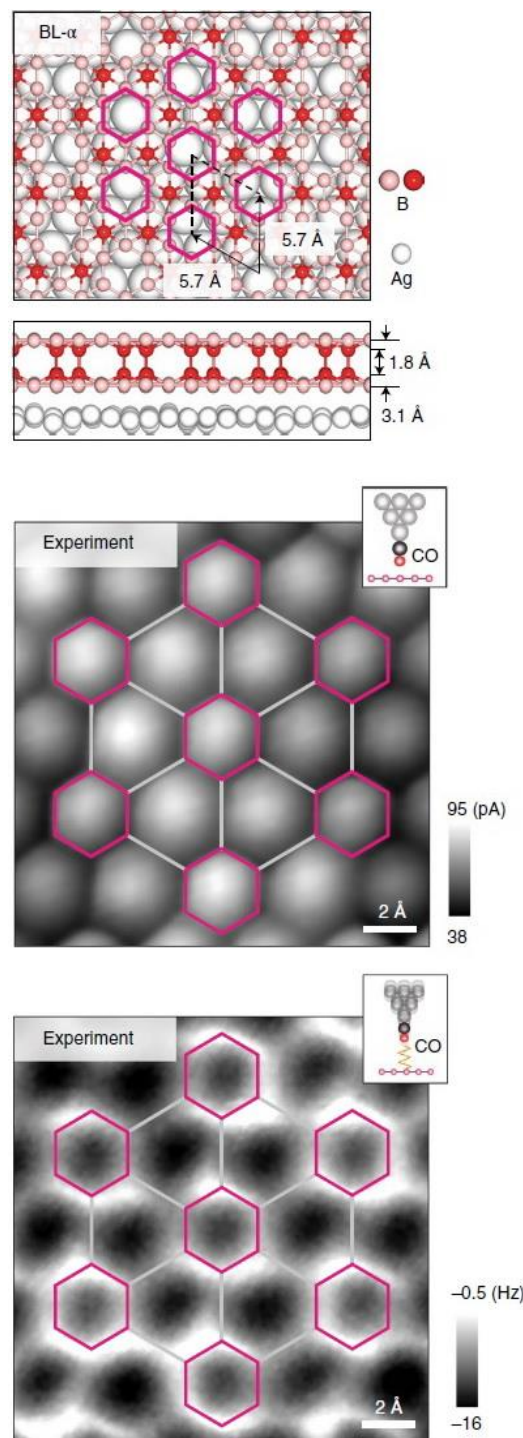
1. E. Siefert et al., *Phys. Rev. Lett.* **127**, 168002 (2021).

НАНОМАТЕРИАЛЫ

Борофен: От слоя к слою

Исследователям из Northwestern Univ. (США) впервые удалось получить бислой борофена [1]. Сам борофен представляет собой двумерный кристалл, аналогичный графену, состоящий только лишь из атомов бора. Борофен является перспективным материалом и известен целым набором уникальных характеристик, среди которых феноменальная прочность, гибкость, высокая электропроводность и даже, при некоторых условиях, сверхпроводимость, что в теории должно обеспечить ему широкое практическое применение. Инженеры делают ставку на его использование в квантовой электронике, молекулярной сенсорике и энергетике, ведь, обладая такими свойствами, борофен способен произвести революцию в аккумуляторах, датчиках, солнечных элементах и квантовых вычислениях. Однако его синтез оказался нетривиальной задачей. В отличие от графена, который сравнительно нетрудно отделить от графита с помощью обыкновенного скотча, борофен нельзя также просто получить из объемного образца бора. Решением здесь служит правильно подобранная подложка. В случае с однослойным борофеном – это могут быть металлические подложки из серебра, золота, меди, алюминия или иридия. Однако, поскольку объемный бор не является слоистым, как, например, графит, дальнейший рост второго и последующих слоев борофена неизменно приводит к кластеризации, а не к желаемым планарным пленкам. В работе [1] исследователи остановились на подложке из монокристалла серебра Ag(111), которая под действием высоких температур принимала необходимую авторам структуру. Итак, синтез бислой борофена происходил на атомарно-плоском монокристалле серебра с помощью метода молекулярно-

лучевой эпитаксии в сверхвысоком вакууме. При этом структура полученного образца формируется как раз двумя ковалентно связанными слоями α -фазы (BL- α), что подтверждается результатами сканирующей туннельной микроскопии, атомно-силовой микроскопии и компьютерным моделированием с использованием теории функционала плотности (см. рис.).



Атомная структура BL- α борофена: вид сверху и сбоку атомной структуры BL- α борофена, осажденного на поверхность Ag(111) (сверху), изображения, полученные с помощью сканирующей туннельной микроскопии CO-СТМ (в центре) и атомно-силовой микроскопии CO-АСМ (внизу).

Авторы проанализировали более детально электронные характеристики BL- α и установили, что полученный бислой сохраняет металлическую природу, присущую монослою (SL) борофена. Так, плотность электронных состояний вблизи уровня Ферми BL- α -борофена подобна полиморфам SL-борофена. Авторы также утверждают, что бислой, сохраняя все желаемые электронные свойства монослоя, обладает при этом очевидными преимуществами. Например, межслоевое пространство вполне можно использовать для хранения высокоэнергетических соединений. Также авторы отмечают, что данные полевой эмиссионной спектроскопии предсказывают повышенную работу выхода по сравнению с полиморфными модификациями SL-борофена. В конечном итоге, можно утверждать, что возможности бора по формированию различных аллотропов ничуть не уступают углероду, и последнему, возможно, придется немного потесниться в борьбе за главную роль в приложениях будущего.

М. Маслов

1. X.Liu et al., Nat. Mater. (2021)

<https://doi.org/10.1038/s41563-021-01084-2>

СНОВА К ОСНОВАМ

Лучше один раз увидеть, чем сто раз услышать: скачки Баркгаузена в сегнетоэлектрике

Скачкообразное продвижение доменных границ было обнаружено Генрихом Баркгаузеном немногим более века назад, задолго до первой визуализации доменов с помощью порошковых фигур Акулова-Биттера. Любопытно, что для демонстрации скачков использовался динамик, в который подавали сигнал с катушки, измеряющей поле от магнитного материала. Характерный треск, сопровождавший процесс перемагничивания стал первым доказательством существования доменов.

Конечно, с тех пор появилось множество методов визуализации доменов в ферромагнетиках, и ученые имели возможность непосредственно наблюдать, как доменные границы цепляются за дефекты решетки, а потом срываются с них под действием усиливающегося магнитного поля.

С сегнетоэлектриками дела обстоят сложнее: домены в них представляют собой субмикронные образования, а оптическое наблюдение подобных процессов ограничено дифракционным пределом.

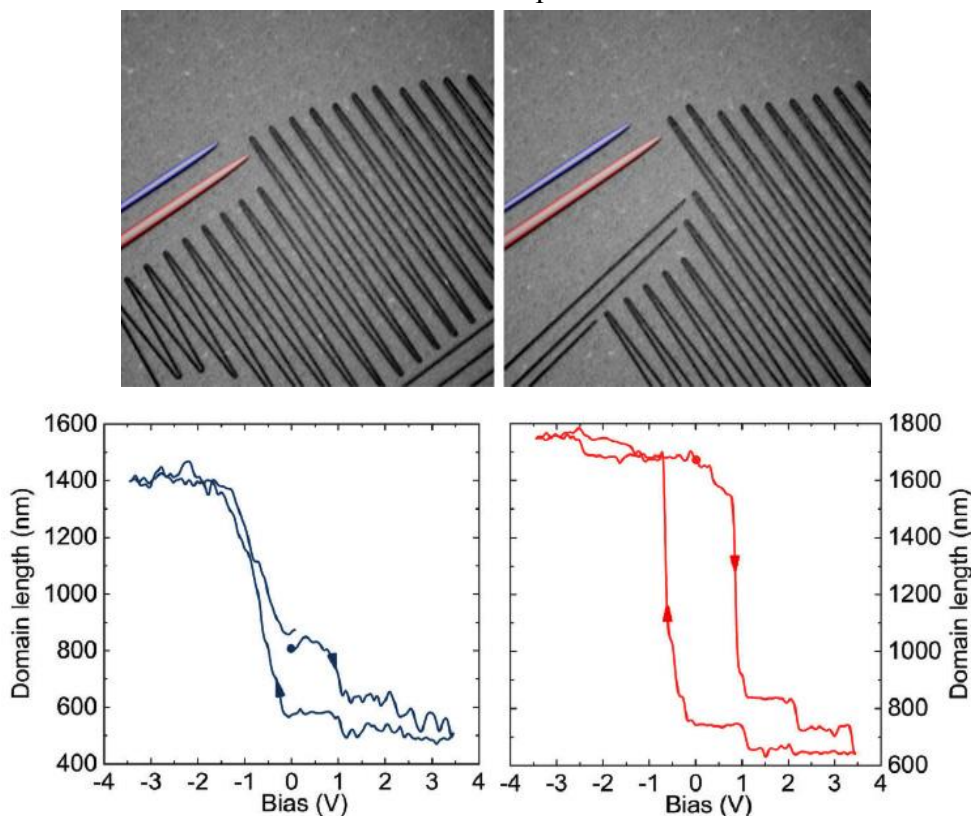


Рис. 1 Шипообразные сегнетоэластические домены в BaTiO_3 и соответствующие им петли гистерезиса: красная петля соответствует домену, упирающемуся в стенку из ряда перпендикулярных ему доменов, синяя петля соответствует домену, движущемуся в “свободном пространстве”. Размер кадра изображения в просвечивающем электронном микроскопе – 2.5 мкм.

В недавней статье швейцарских исследователей (École polytechnique fédérale de Lausanne) [1] с помощью визуализации доменной структуры в просвечивающем электронном микроскопе был выявлен новый механизм скачков, не связанный с дефектами кристалла.

Для своих исследований авторы [1] использовали тонкую пластинку титаната бария, в которой наблюдали шипообразные 90-градусные сегнетоэластические домены, которые можно передвигать с помощью электрического поля, благодаря электромеханическому взаимодействию. Визуализация методами электронной микроскопии представляет собой непростую задачу, так как вследствие того же электромеханического взаимодействия домены создают сильные электрические поля вблизи своих вершин.

Непосредственное наблюдение доменных границ позволило авторам статьи [1] построить “элементарные” петли гистерезиса – по изменению длины шипообразных доменов. На рисунке показано два таких шипа: один (подкрашенный красным) упирается в частокот из перпендикулярных доменов (поскольку с вершиной шипообразного домена связаны большие механические напряжения, она взаимодействует с доменами на расстоянии). Его дальнейшее продвижение возможно только при значительном увеличении поля, заставляющего отступить блокирующие путь домены, и соответствующая ему зависимость длины “шипа” от поля имеет ярко выраженный гистерезис и прямоугольную форму (красная петля на рис. 1). В то же время, домен движущийся в однородно поляризованной области (подкрашен синим) и не имеющий на своем пути других препятствий, кроме дефектов в кристалле, характеризуется небольшим гистерезисом и смазанной формой петли (рис. 1, синяя кривая)

Таким образом, механизм, связанный с периодическим потенциалом решетки и точечными дефектами (барьеры Пайерлса), традиционно привлекавшийся для объяснения скачков Баркгаузена, оказывается совсем неглавным фактором, формирующим петлю гистерезиса, по крайней мере, в титанате бария и керамических сегнетоэлектриках.

А. Пятаков

1. R. Ignatans et al. *Phys. Rev. Lett.* **127**, 167601 (2021).

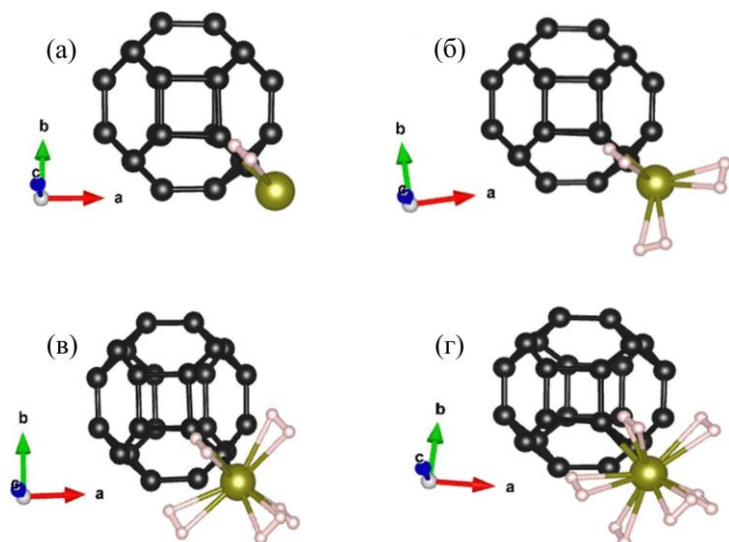
ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

Украшение из скандия для притяжения водорода

Поиск новых источников энергии является сегодня одной из наиболее актуальных задач. Постепенное ухудшение экологической обстановки и неумолимое истощение ископаемых источников топлива побуждает исследователей обратить внимание на нетрадиционные энергетические материалы. И одной из лучших таких альтернатив по праву считается водород благодаря высокому естественному содержанию в природе и сравнительной безопасности для окружающей среды. Однако существует и ряд ограничений, препятствующих широкому его использованию, одним из которых является проблема хранения и транспортировки, ведь для аккумуляирования водорода в газовой фазе требуются громоздкие резервуары, а в виде жидкости – не обойтись без существенных дополнительных затрат на сжижение. Поэтому запасаение водорода в атомарном и молекулярном виде кажется идеальным выходом, а для этого необходим новый наноматериал, способный делать это максимально продуктивно. Конечно, не всякая среда для этого годится. Многие годы целевую планку эффективности водород-сорбционных энергетических систем, куда входит рабочая температура, энергия адсорбции и гравиметрическая емкость, задает Министерство энергетики США (DOE). По последним его рекомендациям, например, гравиметрическая емкость должна составлять не менее 6.5 масс. %, а энергия адсорбции водорода лежать в диапазоне от 0.2 до 0.7 эВ. Различные исследовательские коллективы, ориентируясь на эти данные, предлагают решения в виде цеолитов, металлоорганических соединений, металлгидридов и других систем. Однако среди всего этого многообразия особое место занимают углеродные наноматериалы, такие как фуллерены, нанотрубки, колонный графен.

В работе [1] исследователи из Indian Institute of Technology Bombay и Bhabha Atomic Research Centre (Индия) остановились на фуллерене C₂₄. Однако, во-первых, фуллерен был выбран неклассический, содержащий четырехчленные кольца (углеродные квадраты) на поверхности, а, во-вторых, дополнительно допированный скандием (см. рис.). Исследователи провели детальное компьютерное моделирование с помощью теории функционала плотности, точнее, ее реализации в программе VASP, включающее

как классический анализ структуры, электронных и энергетических характеристик, так и первопринципную молекулярную динамику. Для учета слабого ван-дер-ваальсового взаимодействия ученые использовали поправки Гримме. Необходимо отметить, что результаты у них получились многообещающими. Так, они выяснили, что допированный скандием неклассический фуллерен C_{24} способен адсорбировать до шести молекул водорода (см. рис.) со средней энергией адсорбции около 0.35 эВ.



Атомные структуры допированного скандием неклассического фуллерена C_{24} с присоединенными молекулами водорода: (а) - H_2/ScC_{24} , (б) - $3H_2/ScC_{24}$, (в) - $5H_2/ScC_{24}$, (г) - $6H_2/ScC_{24}$

При этом средняя температура десорбции составляет около 500 К, а гравиметрическая емкость – 13 %, что вдвое превышает рекомендации DOE. Молекулы водорода прикрепляются к декорированному скандием фуллерену с помощью так называемого взаимодействия Кубаса и классического “ван-дер-ваальса” (сам атом скандия крепко держится за углеродную клетку прочной ковалентной связью). Взаимодействие Кубаса характеризуется перетеканием заряда с заполненных σ -орбиталей (НОМО) молекулы водорода на вакантные 3d-орбитали скандия с последующим обратным переносом с заполненных d-орбиталей скандия на вакантные σ^* -орбитали (LUMO) молекулы водорода. Авторы также оценили возможность запуска процесса кластеризации металл-металл, который способен в значительной степени снизить эффективность поглощения водорода. Для этого они рассчитали диффузионный энергетический барьер для атома скандия. Оказалось, что его величина (3.41 эВ) даже при максимальной температуре десорбции в 500 К существенно выше

тепловой энергии (0.0065 эВ), следовательно, процесс кластеризации маловероятен, а сама система достаточно устойчива даже при высоких температурах. Это подтверждают и данные *ab initio* молекулярной динамики. Исследователи провели длительный по атомным меркам нагрев системы до 500 К и убедились в ее стабильности. Таким образом, по мнению авторов, декорированный скандием неклассический фуллерен C_{24} вполне может претендовать на звание эффективного обратимого аккумулятора водорода большой емкости.

М. Маслов

1. V.Mahamiya et al., *Appl. Surf. Sci.* **573**, 151389 (2022).

ТОРЖЕСТВО

Нобелевская премия 2021

С 4 по 15 октября в Стокгольме прошла 120-я Нобелевская неделя, на которой стали известны имена лауреатов Нобелевской премии в области медицины и физиологии, физики, химии, литературы, экономики, а также премии мира.



Лауреатами Нобелевской премии по физике 2021 года стали Сюкуро Манабэ, Клаус Хассельман и Джордж Паризи. Премия присуждена “за новаторский вклад в понимание сложных систем”.



Слева направо: Сюкуро Манабэ, Клаус Хассельман и Джордж Паризи

Сюкуро Манабэ и Клаус Хассельман были награждены “за физическое моделирование климата Земли, количественную оценку изменчивости и надежное прогнозирование глобального потепления”, в то время как Джордж Паризи наградили “за открытие взаимодействия беспорядка и флуктуаций в физических системах от атомных до планетарных масштабов”.

“Сюкуро Манабэ и Клаус Хассельман заложили фундамент наших знаний о климате Земли и

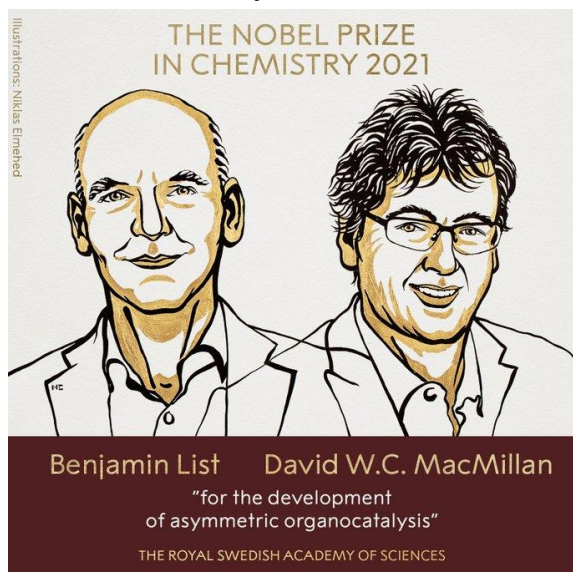
о том, как человечество влияет на него. Джорджо Паризи награжден за его революционный вклад в теорию неупорядоченных материй и случайных процессов” - говорится в пресс-релизе Нобелевского комитета.

В частности, Сюкуро Манабэ показал, как повышенный уровень углекислого газа в атмосфере приводит к росту температуры на поверхности Земли. Его труды легли в основу современных климатических моделей.

Клаус Хассельман разработал модель, “связывающую воедино погоду и климат”, тем самым показав, что “климатические модели могут быть надежными, несмотря на то, что погода изменчива и хаотична”. Он также разработал методы идентификации конкретных “следов” деятельности человека и природных явлений, влияющих на климат. Его методы помогли доказать, что повышение температуры в атмосфере вызвано выбросами углекислого газа.

Джорджо Паризи обнаружил “скрытые закономерности в неупорядоченных комплексных материях”. Его открытия стали “одним из самых важных вкладов в теорию сложных систем” и помогли понять и описать множество разных материй и явлений не только в физике, но и в математике, биологии, нейробиологии.

Нобелевскую премию по химии за 2021 год присудили Бенджамину Листу и Дэвиду Макмиллану за разработку методов так называемого асимметричного органокатализа, применяемого в синтезе молекул.



Бенджамин Лист работает в Институте Макса Планка по исследованию угля (Мюльхайм-на-Руре, Германия), Дэвид Макмиллан — в Принстонском университете (США).

В сообщении Нобелевского комитета отмечается, что долгое время считалось возможным использовать в качестве катализаторов только металлы и ферменты, однако около 20 лет назад Лист и Макмиллан независимо друг от друга разработали третий тип катализа — с использованием каркаса из атомов углерода, к которому могут присоединяться атомы более активных элементов, в том числе кислорода, серы или фосфора. Такие катализаторы безвредны для окружающей среды и при этом дешевы в производстве.

В Нобелевском комитете особо отметили, что работы Листа и Макмиллана показали, что органические катализаторы могут использоваться для запуска множества химических реакций. Используя их, ученые могут более эффективно создавать новые медицинские препараты или повышать КПД солнечных батарей. В Королевской шведской академии наук отметили их вклад в создание эффективных лекарств и “озеленение” химической промышленности.

ВЕСТИ С КОНФЕРЕНЦИИ

Восьмая Всероссийская конференция с международным участием “Топливные элементы и энергоустановки на их основе” и Пятая школа молодых ученых “Современные аспекты высокоэффективных топливных элементов и энергоустановок на их основе”

С 19 по 23 сентября 2021 года в Институте физики твердого тела им. Ю.А. Осипяна РАН прошли Восьмая Всероссийская конференция с международным участием “Топливные элементы и энергоустановки на их основе” и Пятая школа молодых ученых “Современные аспекты высокоэффективных топливных элементов и энергоустановок на их основе”.



Открытие Восьмой Всероссийской конференции с международным участием “Топливные элементы и энергоустановки на их основе”.

Тематика Конференции затрагивала научные и технологические вопросы разработки и создания топливных элементов и энергоустановок на их основе, в первую очередь – твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ) и протонообменных топливных элементов (ПОМТЭ). Однако представленные доклады и их обсуждения значительно расширили тематику Конференции. Участники активно дискутировали о возобновляемых источниках энергии, о хранении и транспортировке энергии, в том числе в форме водорода и водородсодержащих газовых смесей, об экологичности и экономической эффективности различных решений альтернативной энергетики. Всего в работе Конференции приняли участие более 160 представителей российских научных организаций, университетов и промышленных компаний, ученые и разработчики из Австрии, Бельгии и Германии, в том числе более 110 человек в очном формате и более 60 коллег в on-line формате посредством платформы Zoom. Были представлены 65 устных и 15 стендовых докладов. Особый интерес вызвал доклад представителей АО “Русатом Оверсиз” о проектах ГК “Росатом” в области технологий применения водорода и водородного транспорта. Участники конференции активно обсуждали новые результаты фундаментальных исследований твердооксидных электролизных элементов (ТОЭлЭ), представленные Александром Самойловым из ИФТТ РАН (фото 2).



Фото 2. Батареи планарных твердооксидных топливных элементов, разработанные и изготовленные в ИФТТ РАН.

Программа Конференции включала не только доклады о результатах фундаментальных научных исследованиях, но и о конкретных разработках, которые в настоящее время проходят промышленные испытания. Сотрудник ФГУП “Крыловский государственный научный центр” из Санкт-Петербурга Сергей Анатольевич Живулько рассказал о новой разработке центра

– трамвае, работающем на водородных топливных элементах, который в настоящее время успешно проходит ходовые испытания (фото 3).



Фото 3. Разработка Крыловского государственного научного центра - действующий макетный образец трамвая с энергоустановкой на топливных элементах во время испытаний.

Олег Сергеевич Попель (ОИВТ РАН) представил участникам крайне обширный и содержательный обзор проблем и перспектив декарбонизации российской энергетики. В качестве одного из шагов к данной цели Владимир Иванович Матренин из ООО НПО “Центротех” (компания в контуре АО “ТВЭЛ”) рассказал участникам о текущем состоянии разработок накопителей энергии повышенной удельной энергоемкости на водородном цикле. Юрий Владимир Васильев (МФТИ) представил коллегам план создания полигона для отработки различных технологий топливных элементов и водородной энергетики в целом – был представлен доклад о создании и открытии в период председательства Российской Федерации в Арктическом совете в 2021-2023 годах Международной арктической станции “Снежинка”. В направлении фундаментальных поисковых исследований Михаил Валентинович Патракеев из ИХТТ УрО РАН представил результаты по созданию и исследованиям новых электродных материалов для высокотемпературных электрохимических устройств, а Елена Евгеньевна Ломонова из ИОФ РАН – материалов твердых электролитов для твердооксидных топливных элементов.

Особенностью прошедшей Конференции стало большое количество участников, представляющих различные государственные и частные корпорации, промышленные и инжиниринговые компании.

Другой, отличительной чертой Конференции стало участие многочисленных молодых уче-

ных, инженеров-разработчиков и технологов, работающих в области топливных элементов и в смежных направлениях. В рамках Пятой школы молодых ученых “Современные аспекты высокоэффективных топливных элементов и энергоустановок на их основе” для молодых участников было представлено 24 доклада от ведущих ученых по различным тематикам, связанным с топливными элементами, а также с производством, хранением и применением водорода.

Прошедшая Конференция продемонстрировала возросший интерес промышленности к наукоемким разработкам отечественных научных организаций и университетов в области водородной энергетики и топливных элементов.

Учитывая актуальность тематики и быстрый прогресс исследований в области разработок топливных элементов и энергоустановок на их основе, Оргкомитет принял решение провести в 2022 году Девятую Конференцию “Топливные элементы и энергоустановки на их основе”. О месте и сроках проведения Конференции будет сообщено в ближайшее время.

С. Бредихин, Д. Агарков

**Информационный бюллетень ПерсТ
издается информационной группой ИФТТ РАН**

Главный редактор: И.Чугуева, e-mail: ichugueva@yandex.ru

Научные редакторы К. Кугель, Ю. Метлин

В подготовке выпуска принимали участие Д. Агарков, С. Бредихин, М. Маслов, А. Пятаков, З. Пятакова

Выпускающий редактор: И. Фурлетова

Адрес редакции: 119296 Москва, Ленинский проспект, 64