

ISSN: 2782-5515

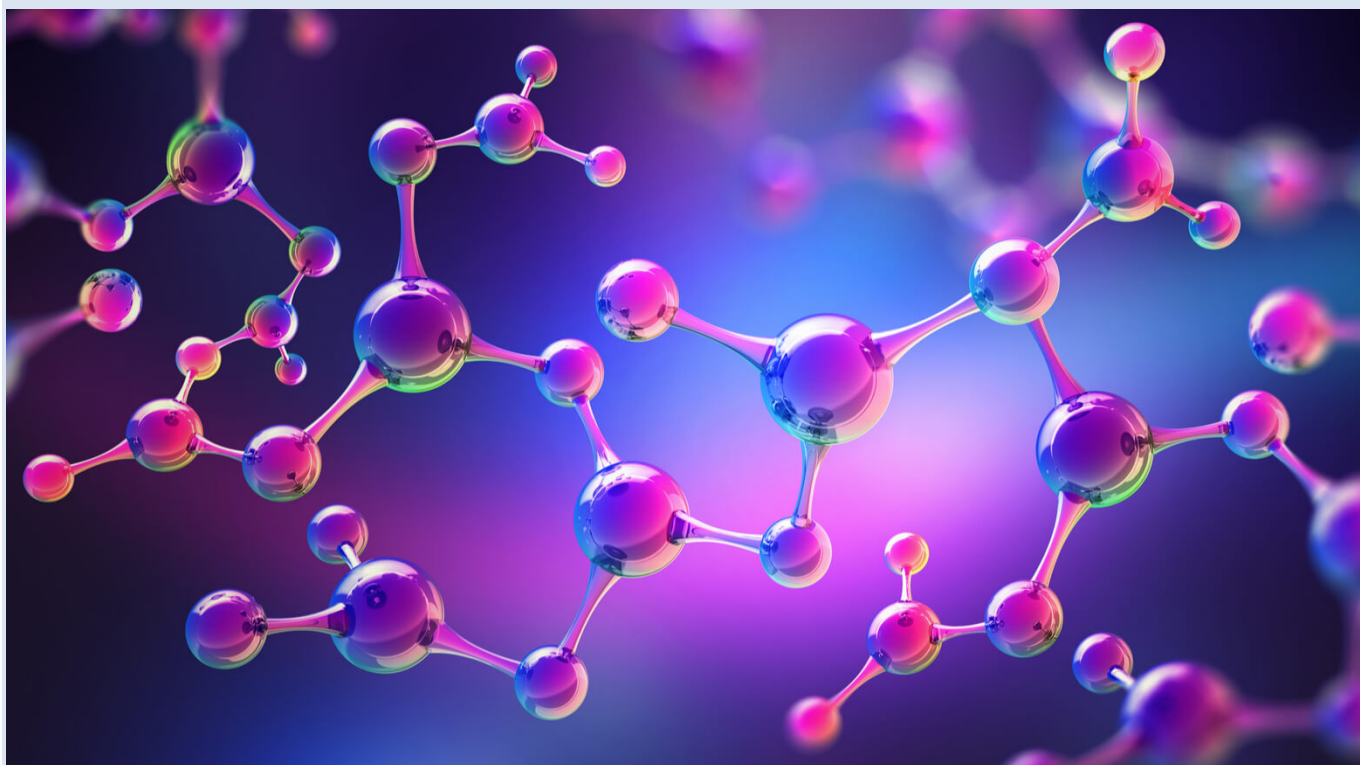


# Перст

Информационный бюллетень  
перспективные технологии  
наноструктуры сверхпроводники фуллерены

Том 31, выпуск 1

январь 2024 г.



<https://hightech.fm/2022/03/07/images-of-complex-molecules>

Черноголовка

Том 31, выпуск 1

январь 2024 г.

В этом выпуске:

## НАНОСТРУКТУРЫ, НАНОТЕХНОЛОГИИ

### *Нанотопографические системы доставки лекарств подсказаны природой*

Уникальные свойства наноматериалов помогают обеспечить эффективную доставку лекарственных препаратов, необходимых для лечения различных заболеваний, создания антибактериальных покрытий. Ранние разработки были в основном посвящены выбору материала, химии поверхности, морфологическим особенностям (форме и размеру). Этого, однако, оказалось недостаточно для того, чтобы обеспечить необходимое взаимодействие доставщика лекарства с биологической структурой. Во многом помогло изучение крыльев насекомых. Ученые выяснили, что именно специфическая наноструктура поверхности, а не химический состав, играет главную роль в гибели бактерий. В обзоре [1] ученые из Univ. of California San Francisco (США) продемонстрировали, как изучение нанотопографии поверхности природных объектов помогает находить подобные варианты для создания систем доставки. Идеи, взятые у природы, помогают улучшить перенос лекарств, биоадгезию, преодоление биологических барьеров, контролируемое выделение и противомикробную активность.

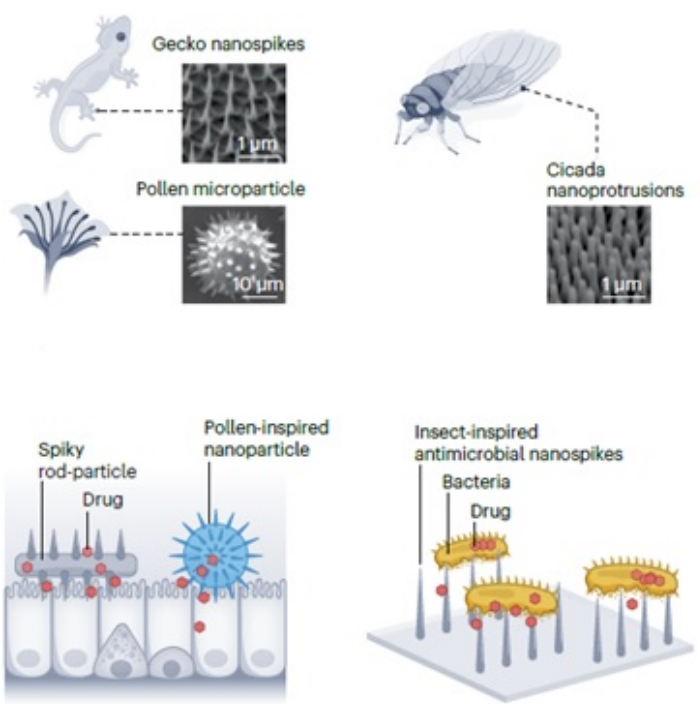


Рис. 1. Примеры нанотопографии поверхности лапок геккона, зерна пыльцы, крыла цикады, используемые для создания эффективных систем доставки препаратов.

И далее ...

## НАНОМАТЕРИАЛЫ

- 4 На пути к алмазоподобным нанолентам
- 5 Проявление скрытого магнетизма при изгибе материала или как “флексят” двумерные антиферромагнетики
- 6 Графин против графдиена

## ФОТОНИКА

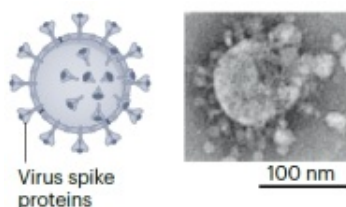
- 7 Поляритонный лазер с управляемым переключением поляризации

## КОНФЕРЕНЦИИ

- 8 XXI Конференция “Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления”, 23 мая 2024 г.

Какие же нанотопографические особенности поверхности природных систем особенно привлекают исследователей? Авторы обзора приводят примеры наношипов на лапках гекконов, нанобугорков и шипов на зернах цветочной пыльцы (*pollen*), нановыступов на крыле цикады (рис. 1).

Модифицирование поверхности носителей с учетом этих подсказок помогло улучшить адгезию к слизистым тканям и клеткам и обеспечить длительное выделение лекарственного препарата. Например, было показано, что наночастицы оксида кремния с нанотопографией поверхности, “скопированной” с частиц пыльцы, могут доставить к бактериям и долго выделять вблизи них антимикробный фермент. Антимикробные наноструктурные покрытия на основе графеновых чешуек, углеродных нанотрубок, нанопроволок и наностолбиков TiO<sub>2</sub> (в том числе важные для имплантатов) были разработаны благодаря изучению наноструктур на крыльях цикад и стрекоз. Острые наностолбики, созданные на поверхности титана, обеспечили даже поражение клеток устойчивых грибков. ПерсТ подробно рассказывал об этих и подобных работах (например, [2,3]), поэтому остановимся на другом очень интересном примере из обзора [1]. Речь идет об использовании природной нанотопографии вируса (рис. 2).



#### Bioinspired designs

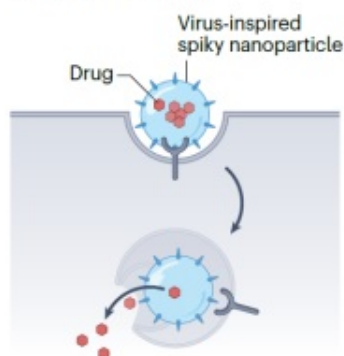


Рис. 2. Вирус с белковыми шипами на внешней поверхности и вирусоподобные наночастицы – носители лекарств.

Сложные вирусы имеют оболочки, на поверхности которых расположены наношипы – специальные белки, способные протыкать мембрану целевой клетки и обеспечивать взаимодействие вируса с этой клеткой (прикрепление и проникновение в нее). Следовательно, подобные вирусам наноматериалы могут улучшить доставку лекарства в нужную клетку. Были предложены различные варианты наночастиц с наношипами, наноиглками, нанотрубками на поверхности. Например, группа исследователей из Дании, Великобритании, Италии, Швеции и Китая синтезировала вирусоподобные мезопористые наночастицы из оксида кремния [4]. Внешняя поверхность покрыта шипами (нанотрубками) в среднем 15 нм высотой, расположенными на расстоянии 30 нм друг от друга. Для сравнения были также получены и проверены мезопористые частицы из оксида кремния с гладкой поверхностью и непористые гладкие частицы (рис. 3). Вирусоподобные частицы в отличие от двух других типов разрушили бактериальную мембрану. Более того, исследования показали, что они могут служить доставщиками антимикробных пептидов. В этом случае воздействие топографии наночастиц на мембрану усиливается, происходят серьезные изменения структуры и состава (схема на рис. 3), бактерия погибает. Частицы с гладкой поверхностью, “нагруженные” антимикробными пептидами, а также свободные пептиды не могут вызвать такие эффекты.

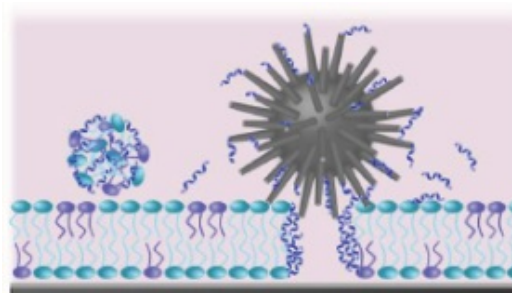
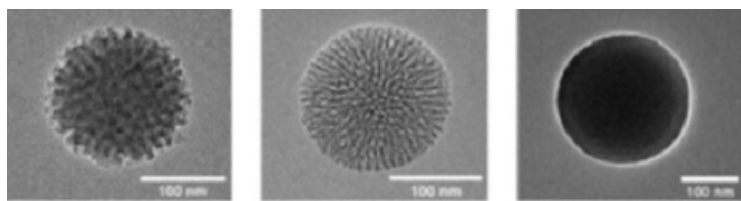


Рис. 3. ТЕМ изображения (слева направо) вирусоподобной мезопористой частицы, мезопористой частицы с гладкой поверхностью и непористой частицы. Схема взаимодействия вирусоподобной частицы, несущей антимикробные пептиды (“спиральки”), с бактериальной мембраной [4].

Авторы обзора [1] анализируют возможные способы создания 3D нанотопографических структур (пор, иглонок, столбиков) на поверхности любого класса носителей – тонких пленок, пластырей, имплантатов, стентов, микро- и наночастиц. Пленки и пластыри могут быть из неорганических материалов или полимеров, стенты и имплантаты в основном, из оксида титана. Микро- и наночастицы синтезируют из оксида кремния, золота, серебра, полимеров и биоматериалов (белков, пептидов, полисахаридов). Методы синтеза включают разные варианты литографии, химическое травление, химическое осаждение из газовой фазы, электроспиннинг и др. К сожалению, проблемой остаются масштабирование производства нанотопографических материалов, необходимое для клинических испытаний, и их воспроизводимость.

О. Алексеева

1. J.A.Finbloom et al., *Nat. Rev. Bioeng.* **1**, 139 (2023).
2. [ПерсТ 30, вып. 10, с.1 \(2023\).](#)
3. [ПерсТ 25, вып. 11/12, с.7 \(2018\).](#)
4. S.M.Haffner et al., *ACS Nano* **15**, 6787 (2021).

## НАНОМАТЕРИАЛЫ

### На пути к алмазоподобным нанолентам

В работе [1] авторы из МИСиС и Кореи с помощью компьютерного моделирования предсказали новый углеродный квазиодномерный материал – двухслойные алмазоподобные наноленты, которые могут быть получены путем фторирования одностенных углеродных нанотрубок (см. рис. 1).

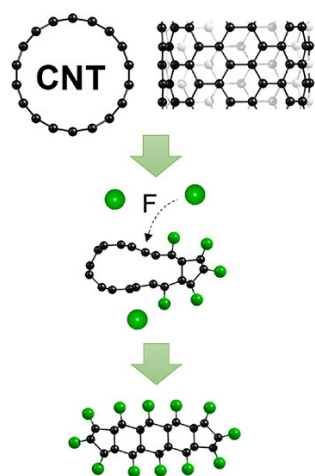


Рис. 1. Иллюстрация механизма формирования двухслойной алмазоподобной наноленты при допировании углеродной нанотрубки атомами фтора.

Расчеты они проводили в программе Siesta в рамках теории функционала плотности с использованием функционала PBE. Дело в том, что функционализация зигзагообразных или кресельных нанотрубок атомами фтора вызывает изменение гибридизации атомов угле-

рода с  $sp^2$  на  $sp^3$ , что приводит к последующему спонтанному “коллапсу” нанотрубки, формированию межслойных ковалентных связей C–C и образованию, в конечном итоге, так называемой “двухслойной алмазоподобной наноленты”. При этом, в зависимости от выбора узлов для присоединения атомов фтора структура получившегося низкоразмерного материала может быть различной (рис. 2). Дальнейший анализ электронных характеристик показал, что величина запрещенной зоны такой наноструктуры практически не зависит от ее ширины, но зависит от морфологии. Согласно полученным данным, алмазоподобные ленты обладают диэлектрической щелью в диапазоне от 3.4 до 4.6 эВ в зависимости от ориентации края и типа поверхности. Однако наноленты, содержащие в структуре восьмичленное кольцо (рис. 2), демонстрируют особое поведение.

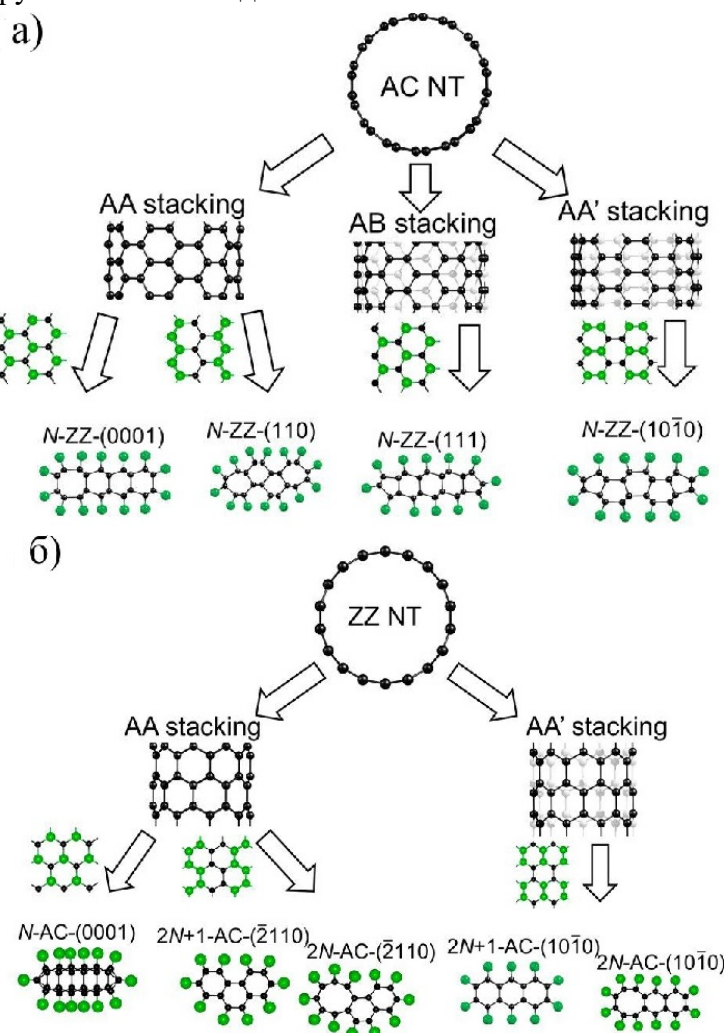


Рис. 2. Полиморфизм алмазоподобных нанолент: возможные структуры нанолент, которые могут быть получены при “коллапсе” кресельных (а) и зигзагообразных (б) углеродных нанотрубок. Рядом со стрелками показаны варианты размещения атомов фтора на поверхности нанотрубки.

Электроны кольца создают дополнительную зону на границе зоны проводимости, что приводит к существенному уменьшению щели. Кроме того, алмазоподобные наноленты обладают и уникальными механическими свойствами. Так, их жесткость, выраженная через энергию упругой деформации, достаточно высока и сравнима с жесткостью графена и углеродных нанотрубок. Таким образом, по совокупности характеристик двухслойные алмазоподобные наноленты могут найти применение в качестве жесткого и прочного наполнителя различных композитов, в электронике из-за наличия полупроводниковой щели и, возможно, в качестве элементов наноэлектромеханических систем. Сами авторы ожидают, что представленные ими результаты способны положить начало дальнейшим экспериментальным и теоретическим исследованиям по формированию алмазоподобных нанолент из хиральных углеродных нанотрубок.

*М. Маслов*

*I. S.V.Erohin et al., J. Phys. Chem. C 128, 549 (2024).*

### ***Проявление скрытого магнетизма при изгибе материала или как “флексят” двумерные антиферромагнетики***

“Флексить” на молодежном жаргоне означает не только танцевать (т.е. сгибаться/разгибаться), но и хвастаться, выпячивать какие-то стороны своего характера. Я бы не стал засорять текст очередным новомодным словом, если бы оно наилучшим образом не иллюстрировало бы тот эффект, о котором пойдет речь ниже.

О пьезоэлектрическом эффекте знают практически все, хотя он встречается далеко не во всех материалах. Другой же эффект, флексоэлектрический, связанный с возникновением электрической поляризации при изгибной деформации, известен только узкому кругу специалистов в физике твердого тела. И это несмотря на то, что флексоэлектрический эффект – явление универсальное, не зависящее, как в случае пьезоэлектрического эффекта, от того нарушена ли инверсионная симметрия в кристалле, поскольку в самом воздействии, его порождающем – градиенте деформации – уже “встроено” полярное направление, указывающее, куда будет “смотреть” поляризация. Столь малая известность эффекта связана с его небольшими величинами: для создания электрической поляризации сравнимой с той, что

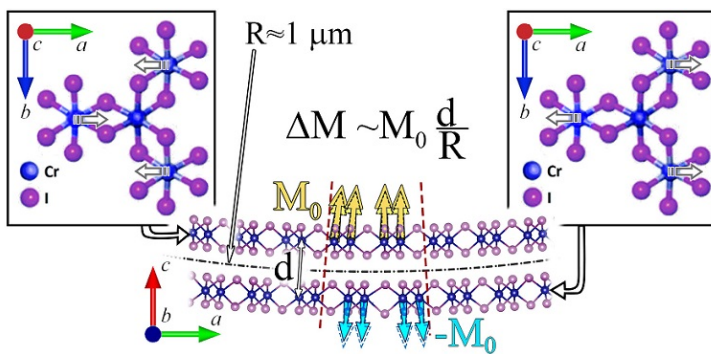
наблюдается в сегнетоэлектрическом материале, требуется согнуть материал в дугу с радиусом всего 10 нм, что достижимо только в нанотрубках.

*Флексомагнитному* эффекту, заключающемуся в возникновении намагниченности при изгибе, повезло еще меньше – он совсем не универсальный (встречается только в материалах с особой магнитной симметрией) и не отличается большой величиной: чтобы получить намагниченность порядка магнетона Бора на ячейку требуется радиус кривизны ... меньше самой ячейки. Отсюда следует, что в диапазоне градиентов деформаций, имеющих место в эпитаксиальных магнитных пленках, возникающая намагниченность не превысит тысячной процента от намагниченности постоянных магнитов.

В статье [1] сотрудников физфака МГУ им. М.В. Ломоносова, написанной совместно с коллегами из Шанхайского университета и Словацкой академии наук на примере двойного молекулярного слоя антиферромагнетика CrI<sub>3</sub> показано, что флексомагнитный эффект в двумерных антиферромагнетиках по сравнению с объемными кристаллами увеличивается на два порядка. На масштабах деформаций, характерных для этих “ван-дер-ваальсовых” материалов (т.е. состоящих из слоев, связанных только силами Ван-дер-Ваальса), это может дать величины намагниченности, уже сравнимые с магнетоном Бора на формульную ячейку.

В отличие от флексоэлектрического эффекта, возникающего практически в любом теле, флексомагнитный эффект не вытекает из симметрии самого воздействия, а требует специальной магнитной симметрии антиферромагнитной системы кристалла, аналогичной той, что имеет место в магнитоэлектриках. Пример двойного слоя триоксида хрома CrI<sub>3</sub> служит наглядной иллюстрацией механизма флексомагнитного эффекта (см. рис.). Этот двумерный антиферромагнетик относится к классу ван-дер-ваальсовых материалов, в которых внутрислойный обмен – ферромагнитный, а межслойное обменное взаимодействие – антиферромагнитно. В двойном молекулярном слое такого материала за счет полной компенсации намагниченности слоев магнитные свойства оказываются надежно скрытыми, а выйти наружу им помогает изгибная деформация: при сжатии верхнего слоя атомы сближаются, и магнитное взаимодействие между ними возрастает, а нижний слой, напротив, растягивается, и

его намагниченность уменьшается (вставки на рисунке). В результате возникает раскомпенсация магнитных моментов верхних и нижних ионов хрома, и “выпячивается” скрытая в материале намагниченность.



Ван-дер-ваальсов антиферромагнетик – двойной слой CrI<sub>3</sub>. Магнитные моменты ионов хрома в недеформированном состоянии показаны пунктирными стрелками. После деформации эти магнитные моменты в верхнем слое увеличиваются за счет сближения взаимодействующих ионов (на вставке слева), а нижнего слоя при его растяжении (вставка справа) – уменьшаются. Возникает некомпенсированная намагниченность  $\Delta M$  пропорциональная исходной намагниченности каждого из слоев  $M_0$ , расстоянию между магнитными подрешетками  $d$  и обратно пропорциональная радиусу кривизны при изгибе  $R$ .

Усиление эффекта в ван-дер-ваальсовых материалах можно объяснить двумя факторами: вследствие квазидвумерной геометрии материала намагниченность каждого из слоев сильно зависит от деформации, кроме того, другой особенностью ван-дер-ваальсовых материалов является относительно большое расстояние между слоями (0.5–1 нм), поэтому при одном и том же градиенте механического напряжения разница в деформации соседних антиферромагнитно упорядоченных слоев в ван-дер-ваальсовом материале будет больше, чем в объемном антиферромагнетике с близко расположенными ионами антиферромагнитных подрешеток.

Поскольку в двумерных магнетиках легко возникают разного рода складки и рябь на поверхности, то предсказанный эффект может иметь существенное влияние на магнитные свойства образцов при исследованиях, а также может быть использован в стрейнтронике ван-дер-ваальсовых магнитных материалов.

А. Пятаков

I. L. Qiao et al., *Phys. Rev. B* **109**, 014410 (2024).

## Графин против графдиена

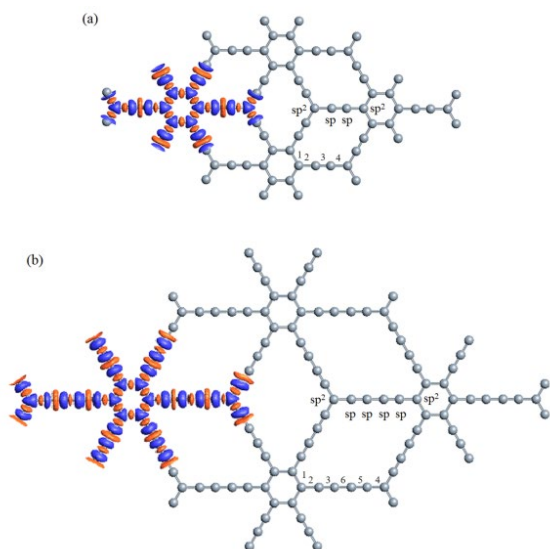
Долгое время считалось, что исключительно графен обладает уникальными электронными характеристиками, а также высокими электро- и теплопроводностью. Однако существуют и другие системы, обладающие схожими, как с друг с другом, так и с графеном свойствами. Следовательно, такие структуры, также как и графен, могут быть применены в многих областях науки и техники, например, в электронике. В статье [1] исследователи из Ирана и Катара предложили структуры, которые могут быть сравнимы с графеном. Одной из таких является  $\delta$ -графин с ацетиленовыми связями ( $-C\equiv C-$ ). Второй –  $\delta$ -графдиен, представляющий собой двумерную плоскость с диацетиленовыми связями ( $-C=C-C=C-$ ). В работе рассматривались сверхъячейки  $2\times 2$  с постоянными решетки 9.44 Å и 13.95 Å для  $\delta$ -графина и  $\delta$ -графдиена, соответственно. Эти системы являются устойчивыми.

На основе методов молекулярной динамики и теории функционала плотности с помощью пакета программ *openMX3.9*, обобщенного градиентного приближения (GGA) и функционала PBE ученые оптимизировали системы, а также оценили обменно-корреляционную энергию. Затем провели оценку переноса заряда между атомами в структурах, основываясь на малликовском методе, и исследовали термическую устойчивость слоев с использованием *ab initio* молекулярно-динамического моделирования (AIMD). В случае динамической стабильности фононные дисперсионные зависимости рассчитывали с помощью пакета *Siesta*. Оптические свойства определяли с помощью формулы Кубо-Гринвуда при воздействии поляризованного света.

Авторы определили, что система  $\delta$ -графина является более устойчивой, чем  $\delta$ -графдиен из-за большей энергии связи (для  $\delta$ -графина 8.31 эВ/атом, а для  $\delta$ -графдиена 8.20 эВ/атом). В дальнейшем, получив зонные структуры, авторы выяснили, что носители заряда ведут себя, как безмассовые частицы. Такое явление наблюдается из-за образования дираковских конусов, как в случае графена. При этом на графике плотности состояний исследуемых структур присутствует энергетическая щель на уровне Ферми. Следовательно, из-за схожести электронных характеристик исследуемых структур с графеном  $\delta$ -графдиен и  $\delta$ -графин можно отнести к классу полуметаллов. Иссле-

*ПерсТ*, 2024, том 31, выпуск 1

дователи повторили расчеты с учетом аппроксимации локальной плотности Сеперли-Алдера (LDA-CA), тем самым, подтвердив свои выводы.



Атомная структура и распределение зарядовой плотности в  $\delta$ -графине (a) и  $\delta$ -графдиене (b). Красная и синяя области соответствуют накоплению и сокращению заряда, соответственно.

Во второй части исследования по зависимостям действительной и мнимой компонент были определены величины диэлектрической проницаемости для разных ориентаций поляризации. В случае параллельной поляризации они равны 13.9 и 13.4, а в случае перпендикулярной 1.15 и 1.09 для  $\delta$ -графина и  $\delta$ -графдиена, соответственно. При этом в системах не обнаруживаются плазменные частоты и коллективные колебания систем из-за отсутствия действительных компонент. Следовательно, такие большие величины указывают на высокую концентрацию свободных носителей заряда.

Стоит отметить, что оптические свойства исследуемых структур также имеют практический интерес. В случае параллельной поляризации отражение составляет 33% и 32% для  $\delta$ -графина и  $\delta$ -графдиена, соответственно. Хотя для графена максимальная величина составляет менее 30%. Коэффициент отражения равен нулю для исследуемых структур при энергии 8 эВ. Следовательно,  $\delta$ -графин и  $\delta$ -графдиен прозрачны именно в ультрафиолетовой области.

Таким образом, структурная устойчивость, электронные и оптические свойства  $\delta$ -графдиена имеют схожие свойства с  $\delta$ -графинном. Стоит отметить, что обе структуры показывают анизотропные оптические реакции, сравнимые

с графеном, и могут быть применены в многих областях электроники. Кроме того, как  $\delta$ -графин, так и  $\delta$ -графдиен способны отфильтровывать “вредное” ультрафиолетовое излучение.

*А. Грекова*

*I. R. Majidi et al., J. Phys. Chem. C 127, 22234 (2023).*

## ФОТОНИКА

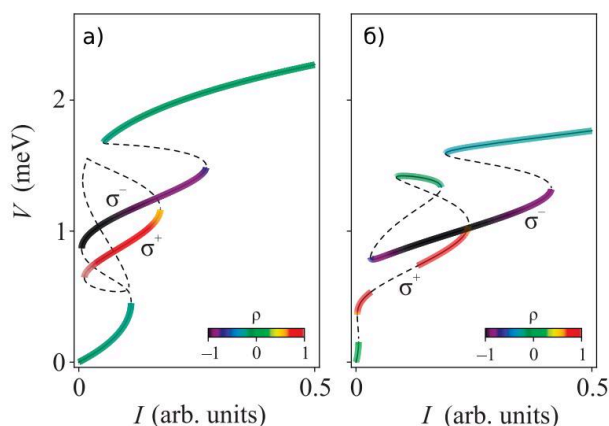
### *Поляритонный лазер с управляемым переключением поляризации*

Экситон-поляритоны – квазичастицы, возникающие при взаимодействии фотонов с экситонами в полупроводниках – являются перспективными объектами сразу в нескольких прорывных направлениях: и в исследованиях высокотемпературной сверхпроводимости, и в оптических квантовых вычислениях. В недавней статье [1] российские ученые из Института физики твердого тела им. Ю.А.Осипьяна РАН в Черноголовке показали, что в полупроводниковых квантовых столбиках возможно управляемое переключение поляризации экситон-поляритонов в магнитном поле, и более того, наличие режима динамического хаоса. Исследуемая система представляет собой микростолбик из GaAs диаметром порядка 2 мкм. Это поляритонный лазер, который отличается по принципу действия от обычных полупроводниковых лазеров. В полупроводниковых лазерах необходима инверсная населенность и достаточно высокий порог накачки, при этом когерентность достигается за счет большого числа фотонов, в поляритонных же когерентность излучения достигается за счет бозе-эйнштейновской конденсации поляритонов, поэтому они могут быть достаточно слабым и энергоэффективным источником когерентных фотонов для различных приложений. Поляритонный лазер, работающий при комнатной температуре и имеющий электрическую накачку, впервые продемонстрирован в 2014 г. [2].

Если микрорезонатор, в котором могут возбуждаться поляритоны, помещен во внешнее магнитное поле, то за счет эффекта Зеемана будет происходить расщепление энергетических уровней поляритонов, и система будет обладать двумя собственными поляризациями.

Расчеты авторов [1] продемонстрировали, что при изменении интенсивности накачки поляритоны могут переходить из состояния линейной поляризации через хаотической режим в состо-

яние с другой линейной поляризацией. На рисунке приведены характерные кривые переключения, соответствующие устойчивым и неустойчивым состояниям поляритонов, и они соответствуют известным характеристикам многих сильно нелинейных колебательных систем. Особенностью представленного в статье [1] переключения поляризации является то, что оно происходит без гистерезиса. Переключение состояний в нелинейной системе без перехода к хаосу, как правило, обладает гистерезисом, что заставляет подбирать особым образом форму управляющего сигнала и затрудняет возможности применения. В рассматриваемой системе хаотический режим становится, как ни удивительно, стабилизирующим фактором, переключение происходит одинаково как в одну, так и в другую сторону, и определяется только интенсивностью сигнала накачки.



Зависимость энергии излучения и его поляризации от интенсивности накачки: а) – при “сильном” магнитном поле, когда влияние эффекта Зеемана на энергетические уровни больше, чем дают механические напряжения в кристалле; б) – при “слабом” магнитном поле ( $\rho$  – степень циркулярной поляризации, 0 соответствует линейной поляризации; штриховые линии соответствуют неустойчивым состояниям).

Таким образом, поляритонные лазеры, кроме низкого энергопотребления, становятся удобными перестраиваемыми источниками когерентного света.

З. Пятакова

1. С.С.Гаврилов и др., *Письма в ЖЭТФ* **118**, вып. 9, 649 (2023).
2. P.Bhattacharya et al., *Phys. Rev. Lett.* **112**, 236802 (2014).

## КОНФЕРЕНЦИИ

**XXI Конференция “Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления”, 23 мая 2024 г., ФИАН (Ленинский пр. 53, Москва)**

Традиционно на Конференции будут представлены материалы по таким темам, как магнитные и Кондо-системы, волны зарядовой и спиновой плотности, топологические материалы, включая: топологические изоляторы и полуметаллы, сверхпроводимость и топологические сверхпроводники, сверхпроводники с магнитным упорядочением, электронное фазовое расщепление, фазовые переходы и критические явления, влияние давления на физические свойства и пр.

На Конференции предполагаются устные выступления и постерная сессия. Время устных выступлений строго ограничено и не должно превышать 15 минут, включая вопросы и ответы. Авторы стендовых презентаций должны разместить свои постеры на стендах с номерами, соответствующими номерам, указанным в программе. Рекомендуемый размер постера составляет: 594 мм (ширина) x 841 мм (высота), что соответствует формату A1.

### Важные даты

Начало регистрации, подачи тезисов и оплаты оргвзноса - **15 января 2024 г.**

Окончание приема тезисов докладов - **1 апреля 2024 г.**

Окончание регистрации - **22 апреля 2024 г.**

Дополнительную информацию можно получить у Ольги Иосифовны Акинфиевой - [akinfiavaoi@lebedev.ru](mailto:akinfiavaoi@lebedev.ru) и Аллы Евгеньевны Петровой - [petrovaae@lebedev.ru](mailto:petrovaae@lebedev.ru)

Сайт: <http://scs.lebedev.ru>



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

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, А.Грекова, М. Маслов, А. Пятаков, З. Пятакова

Выпускающий редактор: И. Фурлетова

Адрес редакции: 119296 Москва, Ленинский проспект, 6