

В этом выпуске:

СНОВА К ОСНОВАМ

Акустическая волна как смазка – звук гасит трение

Знание о способах борьбы с трением отнюдь не является прерогативой физиков: о чудодейственном влиянии смазки рассказывают даже пословицы и поговорки. Однако трение в твердых телах возникает не только на поверхности, но и внутри вещества – при перемещении дефектов кристалла под действием нагрузки. Способы уменьшения такого трения далеко не очевидны. Авторы теоретической работы [1] предлагают неожиданный вариант – гасить трение с помощью акустических волн, которые проникают внутрь кристалла и механически воздействуют на кристаллическую решетку и дефекты.

Движение дефектов по кристаллической решетке сопровождается колебаниями решетки – фононами, которые излучают энергию, что приводит к ее диссипации. В зависимости от вида дефектов, возбуждаются фононы акустической ветви – низкочастотной, оптической – высокочастотной, или сразу обеих ветвей. Звук внешнего источника – “волна-смазка” при определенных условиях может интерферировать с этими фононами. В упрощенном представлении, подавление внутреннего трения происходит как результат деструктивной интерференции “волны-смазки” с излучением фононов. В этом случае фононы не возникают, и дефект движется плавно с постоянной скоростью. Энергия на поддержание движения берется из акустической волны от внешнего источника.

Один из видов дефектов, рассмотренных в статье [1] – дислокация. Зависимость локального напряжения от смещения частицы при воздействии постоянной силы задается пилообразной функцией (рис. 1а). Решение системы уравнений для смещений частиц определяет среднюю силу, действующую на дислокацию, и среднюю скорость ее перемещения.

Условием возбуждения фононов, а значит, возникновения трения, является пересечение дисперсионных кривых фононов и прямой, соответствующей движению дислокации (рис. 1б). В случае только одной точки пересечения этих кривых (точка k_1 на рис. 1б) фононы будут излучаться только одним источником, и тогда внешняя звуковая волна-смазка с амплитудой и фазой, подобранной из условия минимума, может погасить излучение до нуля. В случае, если есть три точки пересечения (k_1 , k_2 и k_3 на рис. 1б), внешний источник звука уже не может погасить трение до нуля, но может его существенно уменьшить.

И далее ...

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

2 Новый фуллерит из неклассического C_{32}

3 Правила устойчивости для азота

НАНОСТРУКТУРЫ, НАНОТЕХНОЛОГИИ

4 Уроки природы. Глаз дрозофилы показал, как синтезировать многофункциональные нанопокртия

СПИНТРОНИКА

7 Переключение долиной поляризации с помощью электрического поля

Авторы рассчитали амплитуды и фазы акустической волны, необходимые для подавления трения, для трех видов дефектов – доменные стенки, дислокации и трещины. В расчетные формулы входят волновые числа точки пересечения дисперсионных кривых, скорость движения дефектов и упругие параметры кристалла.

Также рассчитано, что движение дефектов при этих оптимальных условиях происходит плавно, с постоянной скоростью. Таким образом, показано, что существует возможность контроля перемещения дефектов в кристалле и уменьшения энергетических потерь внутри кристалла.

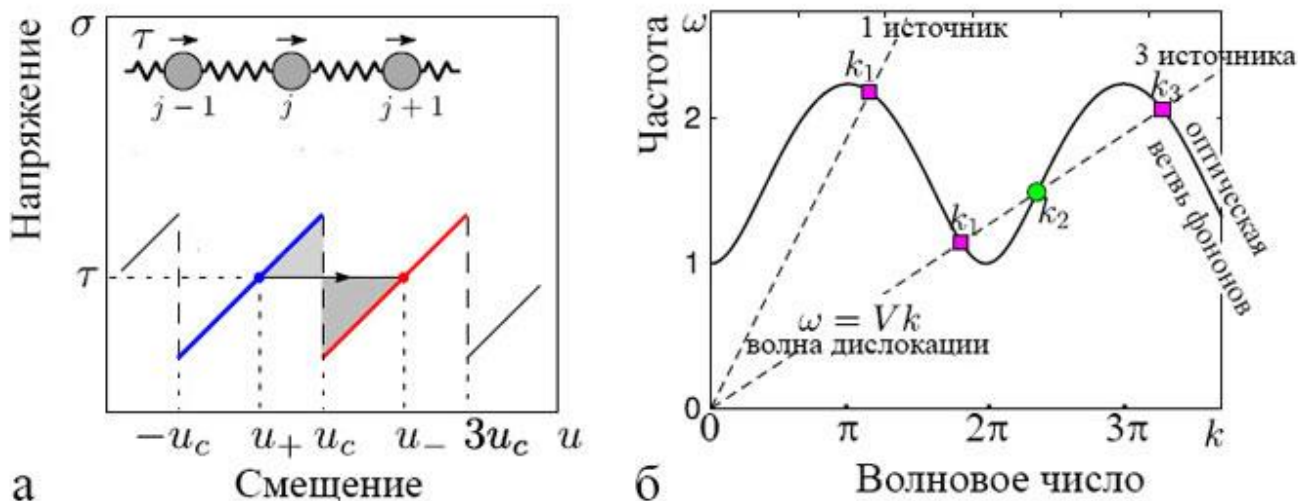


Рис. 1. Движение дислокаций в кристалле под действием постоянного напряжения τ [1]: а - связь механического напряжения и смещения атомов, эффективная сила; б - условие возникновения трения – пересечение дисперсионных кривых оптических фононов и прямой, соответствующей дислокации, движущейся со скоростью V .

Итак, дефекты в кристаллах уже воспринимаются не как помеха, а как инструмент тонкой настройки, и акустическое управление дефектами – еще одна нетривиальная технология для создания акустических метаматериалов и передачи информации механическим способом.

З. Пятакова

I. N.Gorbushin et al., Phys. Rev. Lett. 125, 195502 (2020).

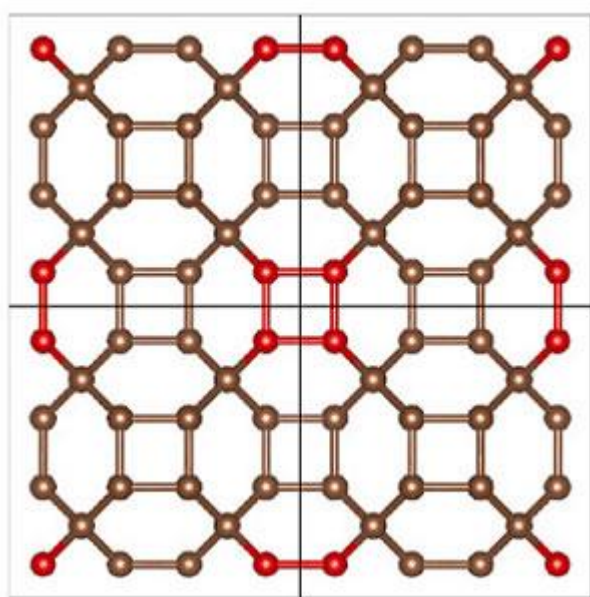
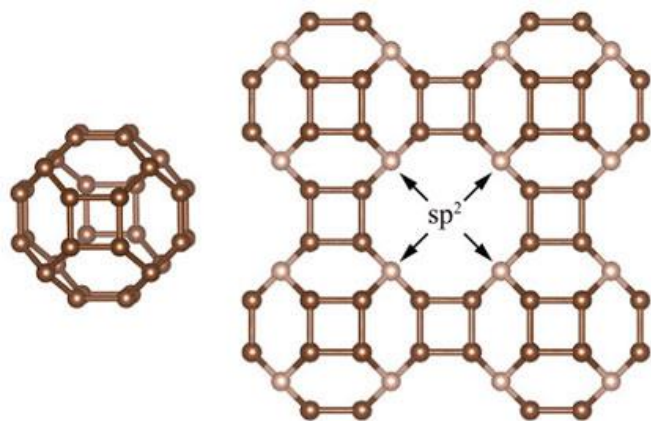
ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

Новый фуллерит из неклассического C_{32}

Исследователи из Nanchang Univ. (Китай) [1] с помощью теории функционала плотности определили физико-химические характеристики ранее неизвестного фуллерита – ковалентного кристалла, построенного из неклассических фуллеренов C_{32} . Напомним, что неклассические фуллерены помимо углеродных пяти- и шестиугольников могут быть образованы также и другими многочленными кольцами, например, упомянутый выше C_{32} содержит на поверхности клетки шесть углеродных квадратов (см. рис.).

Авторы выполнили геометрическую оптимизацию и анализ электронной зонной структуры в программе VASP с использованием периодических граничных условий и функционалов PBE и HSE06, а расчет фононов и оценку динамической устойчивости – в программе Phonopy. Они установили, что в отсутствие “компенсирующих” атомов углерода (см. рис.) молекулы C_{32} образуют гибридный sp^2/sp^3 ковалентный кристалл, в котором фуллерены расположены в узлах простой кубической решетки. Присутствие же в материале дополнительных четырехчленных колец приводит к полностью sp^3 -гибридизованному кристаллу с гранецентрированной кубической решеткой ГЦК- C_{32} (см. рис.). Особое внимание было уделено тепловым свойствам последнего, таким как параметр Грюнайзена, коэффициент теплового расширения, решеточная теплопроводность и другие. Полученные результаты свидетельствуют, что этот фуллерит при комнатной температуре обладает достаточно низким коэффициентом теплового расширения $3.5 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ и аномально высокой решеточной теплопроводностью 642 Вт/м·К. Что касается механических характеристик, то хотя ГЦК- C_{32} представляет

собой достаточно легкий углеродный аллотроп, он обладает высокой твердостью по Виккерсу 61.2 ГПа и значительным пределом прочности на разрыв.



Атомная структура неклассического фуллера C_{32} (вверху, слева), фрагмент гибридного sp^2/sp^3 ковалентного кристалла фуллерита, построенного из неклассических C_{32} (вверху, справа), и фуллерит ГЦК- C_{32} (внизу). Красным цветом выделены так называемые “компенсирующие” атомы углерода.

Исследователи также определили ИК- и рамановские спектры фуллерита, которые в дальнейшем можно использовать для идентификации ГЦК- C_{32} и отделения его от других полиморфов. По мнению авторов, уникальная совокупность термических и механических свойств делают ГЦК- C_{32} перспективным функциональным материалом для использования, например, в космической отрасли. При этом электронные характеристики ковалентного фуллерита можно настраивать с помощью замещения тех самых “компенсирующих” атомов углерода между фуллереновыми клетками на пары В–N. Такое выборочное легирование способно изменить диэлектрическую щель в материале

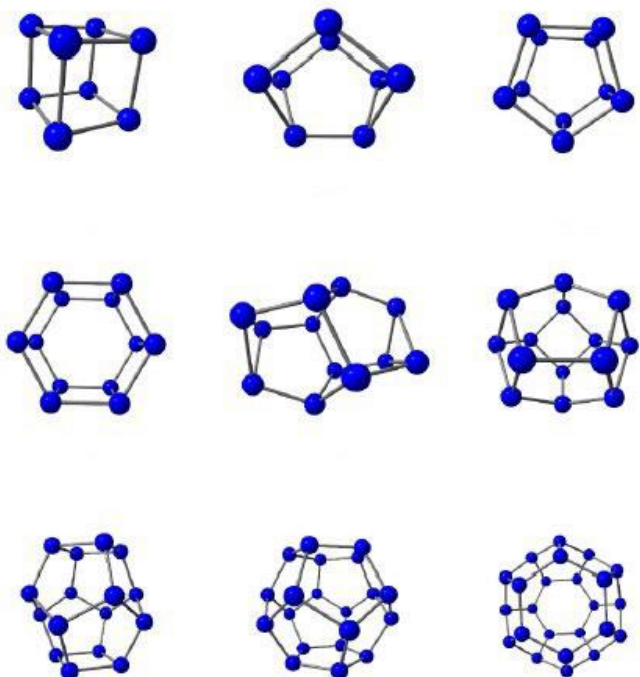
от 2.6 до 3.3 эВ в зависимости от содержания нитрид-борных пар в кристалле $C_{32}(B_xC_{8-x}N_x)$. С нетерпением будем ждать его экспериментального получения.

М. Маслов

I. A. Zhou et al., *Mater. Chem. Phys.* **258**, 123853 (2021).

Правила устойчивости для азота

В процессе исследования устойчивости углеродных фуллеренов сформировалось правило изолированных пятиугольников (isolated pentagon rule – IPR). Наиболее просто его можно сформулировать следующим образом: самыми устойчивыми фуллеренами являются изомеры, в каркасе которых нет двух пятичленных колец, имеющих общую сторону, то есть каждый углеродный пятиугольник полностью окружен углеродными шестиугольниками. Авторы работы [1] решили проверить выполнение этого правила для гипотетических азотных фуллереноподобных каркасов. С помощью *ab initio* молекулярной динамики и сканирования по внутренней координате реакции (IRC) они проанализировали устойчивость и механизмы пиролиза различных азотных замкнутых систем от N_4 до N_{120} . Устойчивость каркасов оценивалась по энергиям активации их термического разложения. Ожидается, что в случае азота IPR не выполняется. Расчеты показывают, что распад азотной клетки стартует как раз с разрыва ковалентной связи, общей для двух смежных шестиугольников. Тем не менее, ученые смогли заметить ряд топологических особенностей, которые могут указывать на принципиальную стабильность замкнутых азотных каркасов или квазифуллеренов. Так, термодинамически устойчивыми являются такие структуры, в которых азотные шестичленные кольца в принципе отсутствуют или максимально удалены друг от друга (см. рис.) или же атомы азота в смежных шестиугольниках не лежат в одной плоскости, формируя (за счет вогнутости) так называемые “азотные лодки”. Из этого следует, что не только N_{60} (азотный аналог хорошо всем известного бакибола C_{60}) оказывается неустойчивым, поскольку структурно является выпуклым многогранником и содержит смежные азотные шестиугольники на поверхности, но и вообще все квазифуллерены вида N_n с $n > 24$. Таким образом, число стабильных азотных каркасов существенно ограничено по сравнению с их углеродными аналогами.



Примеры замкнутых азотных каркасов, не содержащих смежные шестиугольники

Для оставшихся систем с $n = 4 \div 24$ исследователи определили активационные барьеры, препятствующие их распаду, а также частотные факторы и времена жизни при различных температурах. Они установили, что величины энергий активации уменьшаются с ростом эффективных размеров азотной системы. Результаты, полученные авторами, свидетельствуют, что наиболее устойчивыми полностью азотными каркасами являются самые маленькие системы N_4 и N_6 , которые способны также образовывать молекулярные кристаллы. Анализ плотности электронных состояний и зонной структуры последних свидетельствует о том, что эти кристаллы относятся к классу диэлектриков. Оценки энергоэффективности, приведенные авторами, свидетельствуют, что азотные каркасы и материалы на их основе не уступают современным перспективным высокоэнергетическим системам, например, широко известному CL-20. Будем надеяться, что рано или поздно азотные системы займут достойное место среди высокоэнергетических материалов и топлив будущего.

М. Маслов

1. K.P.Katin et al., Computation 8, 91 (2020).

НАНОСТРУКТУРЫ, НАНОТЕХНОЛОГИИ

Уроки природы. Глаз дрозифилы показал, как синтезировать многофункциональные нанопокртия

Российские ученые с коллегами из Швейцарии провели междисциплинарные исследования наноструктур роговичной поверхности глаза плодовой мушки дрозифилы [1]. Авторы работы не только выяснили, как такие наноструктуры возникают в природе, но использовали полученные данные для разработки метода синтеза многофункциональных нанопокртий.

Раньше российские ученые (в том числе авторы [1]) с помощью атомно-силовой микроскопии досконально изучили нанопокртия роговицы многих образцов чешуекрылых (бабочек, мотыльков, моли), а также некоторых пауков, сороконожек, скорпионов [2]. Были обнаружены разнообразные наноструктуры из разупорядоченных и плотноупакованных бугорков, извилистых выступов (“лабиринтов”), плотных гребней, лунок и ряд промежуточных вариантов. Эти наноструктуры могут существенно подавлять отражение света, обеспечить защиту от пыли и от намокания. Самое замечательное – эти бионаноструктуры соответствуют полному набору узоров Тьюринга* (рис. 1), причем это первый пример обнаружения нанозоров.

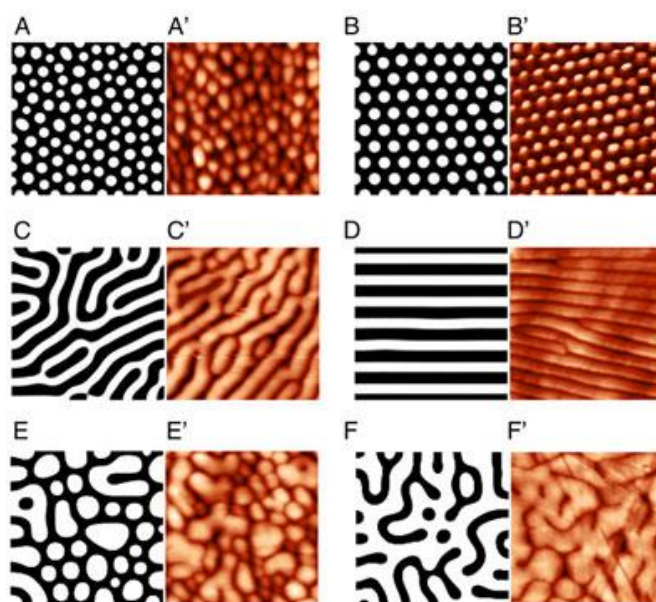


Рис. 1. Некоторые из узоров Тьюринга, обнаруженные с помощью атомно-силовой микроскопии на роговичной поверхности глаза различных насекомых [2]. Высота элементов наноструктуры ~ 20 - 100 нм, ширина ~ 100 - 400 нм. Черно-белые рисунки – результаты моделирования авторов [2] по механизму “реакция-диффузия” Тьюринга.

В 1952 году Тьюринг предложил систему дифференциальных уравнений, описывающих механизм самоорганизации, который приводит к формированию повторяющихся элементов биологических, химических, физических структур. По модели Тьюринга происходит взаимодействие медленно диффундирующего активатора и быстро диффундирующего ингибитора (модель “реакция-диффузия”). Наглядные примеры узоров Тьюринга в природе на макроуровне – пятнистость и полосатость некоторых животных и рыб.

Плодовая мушка *Drosophila melanogaster*, точнее, поверхность роговицы ее глаза, – перспективный объект изучения механизмов “реакция-диффузия” в живых организмах. Эта мушка

давно служит науке, в том числе для генетических экспериментов. Глаз дrosофилы представляет собой сложную структуру из почти тысячи структурных единиц омматидиев – вытянутых конусов, сходящихся вершинами в глубине глаза, с выпуклой шестигранной роговичной линзой на поверхности [3]. Результаты исследований с помощью атомно-силовой и электронной микроскопии [1,3] показали, что роговица покрыта прозрачными бугорками высотой ~ 30-40 нм и шириной ~ 250-300 нм (рис. 2). Такая наноструктура обеспечивает не только проникновение света (снижая почти до нуля его отражение), но и защиту от пыли и влаги. Да, у дrosофилы “соринку в глазу” не увидишь!

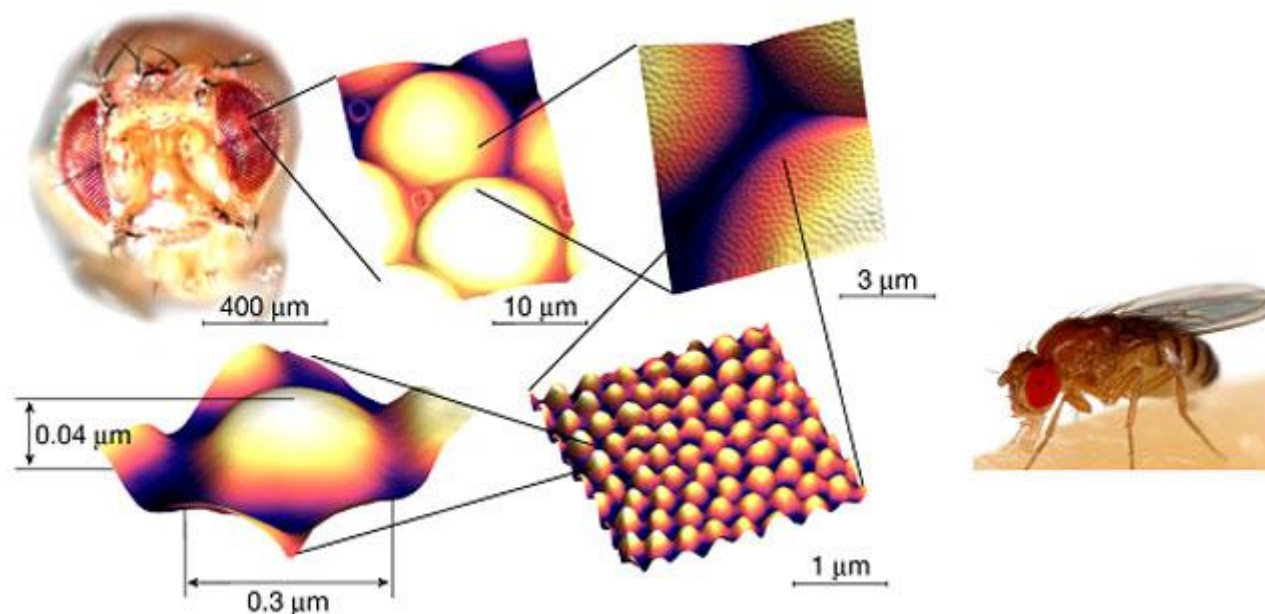


Рис. 2. Изображения роговичных нанопокровов *D. melanogaster*, полученные с помощью атомно-силовой микроскопии при разном увеличении. Справа – увеличенная фотография плодовой мушки.

Авторы работы [1] провели свои исследования на плодовой мушке *D. melanogaster*, геном которой полностью расшифрован, а также на 13 дrosофилах другого типа. Целью было определить, есть ли у них в роговицах общие компоненты, которые могут действовать как активатор и ингибитор по механизму Тьюринга. Сначала ученые “разобрали” роговицу на базовые молекулярные составляющие, из которых формируется наноструктура ее поверхности (метод обратной биоинженерии), и продемонстрировали физическое и генетическое взаимодействие этих компонентов. Результаты математического моделирования соответствовали экспериментальным данным. У всех изученных дrosофил базовые “кирпичики” оказались одними и теми же – белок ретинин (активатор) и рого-

вичные воски (ингибитор). При взаимодействии с воском исходно неструктурированный белок начинал сворачиваться, образуя глобулярную структуру (рис. 3).

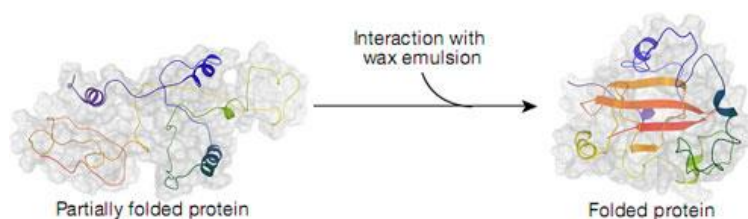


Рис. 3. Схема изменения структуры ретинина при взаимодействии с восками.

Затем исследователи методом прямой биоинженерии, используя ретинин и воски, запустили самоорганизующийся процесс по механизму

Тьюринга и “воссоздали” роговичные нанопокрyтия на подложках из стекла и пластика. Использовали рекомбинантный белок ретинин, полученный от бактерий, и распространенные природные воски – пчелиный, шерстяной (ланолин), пальмовый (карнаубский). Отдельно ретинин, или воск, или контрольная смесь белков никаких покрyтий не образовали.

Если нанопокрyтия формируются по модели Тьюринга, то их структура и, соответственно, свойства, должны зависеть от количественного соотношения активатор-ингибитор в смеси. Действительно, эксперименты показали, что увеличение количества активатора (или уменьшение количества ингибитора) приводит к слиянию бугорков в гребни и снижению антиотражающих свойств, но повышению антиадгезионных. Второй важный параметр – характеристики ингибитора, то есть воска. Воски имеют разную вязкость и, соответственно, разные коэффициенты диффузии, что должно

влиять на действие ингибитора. Это также было подтверждено экспериментально и расчетами.

Сочетание физического, генетического, биохимического подходов и математического моделирования позволило авторам [1] разработать метод синтеза разнообразных нанопокрyтий. Некоторые примеры приведены на рис. 4. Использовали активатор ретинин и ингибиторы с разной вязкостью (ланолин с температурой плавления 38°C и карнаубский воск с температурой плавления 82°C). Наносили последовательно 2 слоя (на рис. 4 они обозначены римскими цифрами и знаком >). Нанопокрyтия, полученные в соответствии с протоколом 1 и 2, имели антиотражающие свойства, с протоколом 3 и 4 – гидрофобные и гидрофильные, соответственно. При этом у структуры с более высокими бугорками (протокол 2) пропускание света оказалось больше.

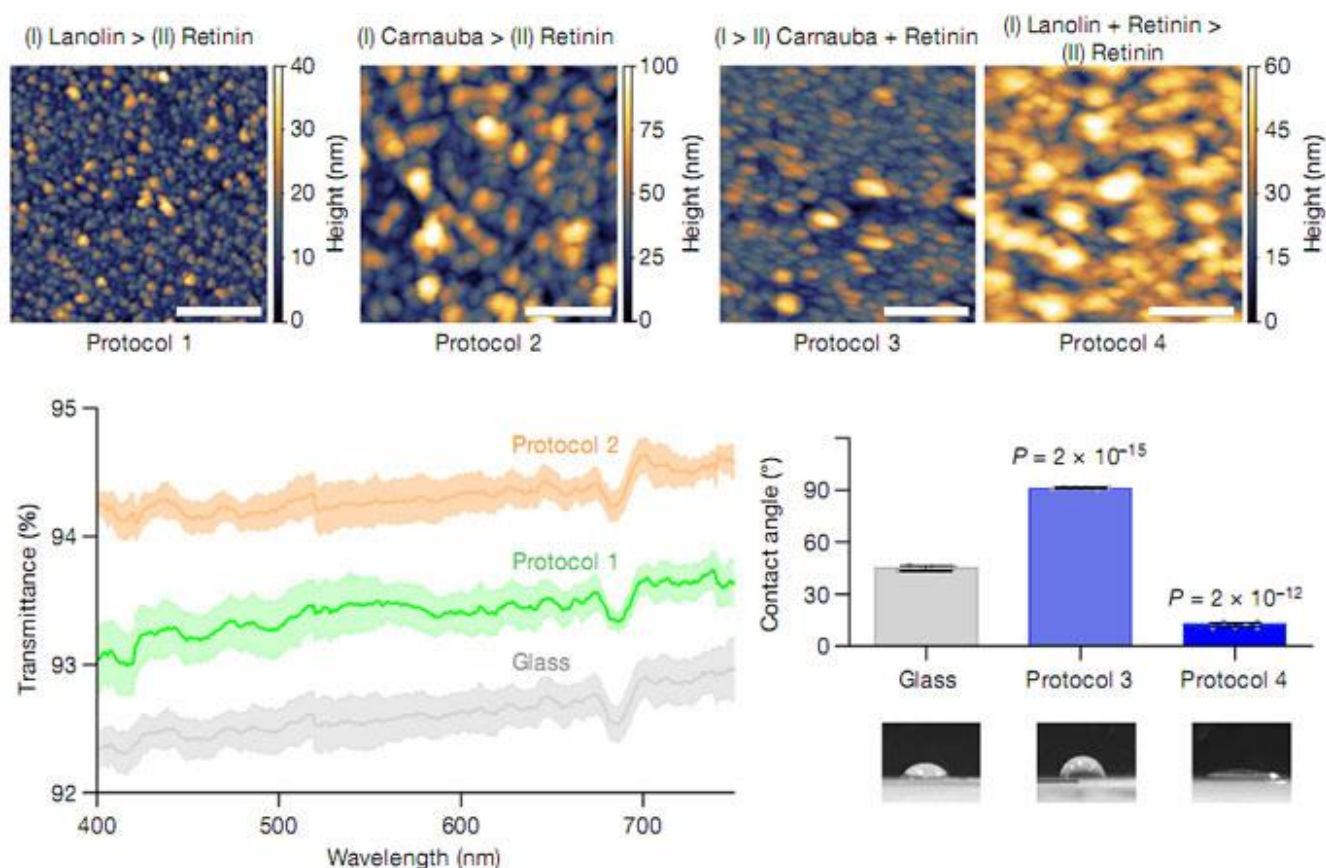


Рис. 4. Вверху – изображения наноструктур, полученные с помощью атомно-силовой микроскопии. Наносили последовательно 2 слоя (обозначены римскими цифрами и знаком >). Шкала 1 мкм. Внизу – результаты измерения пропускания в диапазоне длин волн видимого света для образцов, полученных по протоколам 1 и 2, и стекла. Пропускание через стекло без покрyтия составляет 92% (по 4% отражается с каждой стороны). Нанесение покрyтия на одну сторону снижает отражение от нее примерно в 2 раза (пропускание увеличивается на 2%). Приведены также результаты измерения краевого угла смачивания для стекла и образцов, полученных по протоколам 3 и 4, и соответствующие фотографии капли воды. P – сила адгезии.

Нанопокрyтия стабильны, выдерживают длительное промывание. Их можно наносить на поверхности большого размера, любой конфигурации. Модифицируя генетически ретинин, подбирая воск, изменяя концентрации, можно получать покpытия с требуемыми свойствами (антиотражающими, антиадгезионными и др.). Сферы применения разнообразны – медицина, оптика, наноэлектроника, автомобильная и даже текстильная промышленности. Сейчас для получения наноструктурированных покpытий такого типа приходится использовать сложные и дорогие методы, часто вредные для людей и окружающей среды – химическое травление, литографию, лазерные технологии. Метод, на который ученым указал глаз дрозофилы, не требует специального оборудования и больших энергозатрат и использует биоразлагаемые материалы.

О. Алексеева

*
Алан Тьюринг (Alan Turing), 1912-1954, знаменитый британский математик, логик, криптограф (в годы Второй мировой войны расшифровывал немецкие радиogramмы); “отец” современной информатики. В последние годы жизни интересовался также химией, биологией.

1. M.Kryuchkov et al., *Nature* **585**, 383 (2020).
2. A.Blagodatski et al., *PNAS* **112**, 10750 (2015).
3. В.Л.Катанаев и др., *Успехи биохимии* **51**, 401 (2011).

СПИНТРОНИКА

Переключение долинной поляризации с помощью электрического поля

Спиновая электроника основана на идее использования спина электрона вместо его заряда. Однако кроме собственного момента количества движения, у электронов есть еще орбитальный момент, и под эту степень свободы уже придумали новую область, так называемую “долинную электронику” (valleytronics). Само название связано не с Кремниевой долиной, а с “долинами” в кремнии и других полупроводниках – так называют локальные минимумы в графиках дисперсии электронных состояний. Обычно наблюдается вырождение по этой степени свободы, что приводит к тому, что экстремумы зон представлены в двух копиях. Если же каким-нибудь образом (например, с помощью циркулярно-поляризованного света) засе-

лить преимущественно одну из долин, то в этом случае говорят о долинной поляризации, с помощью которой, как с помощью обычной электрической поляризации или спина, можно кодировать двоичную информацию. В недавней работе исследователей из Cornell Univ. (США) и National Inst. for Materials Science (Tsukuba, Япония) продемонстрирована возможность электрического переключения долинной поляризации в двумерном материале – монослое селенида вольфрама WSe_2 , что делает перспективы долинной электроники более отчетливыми [1].

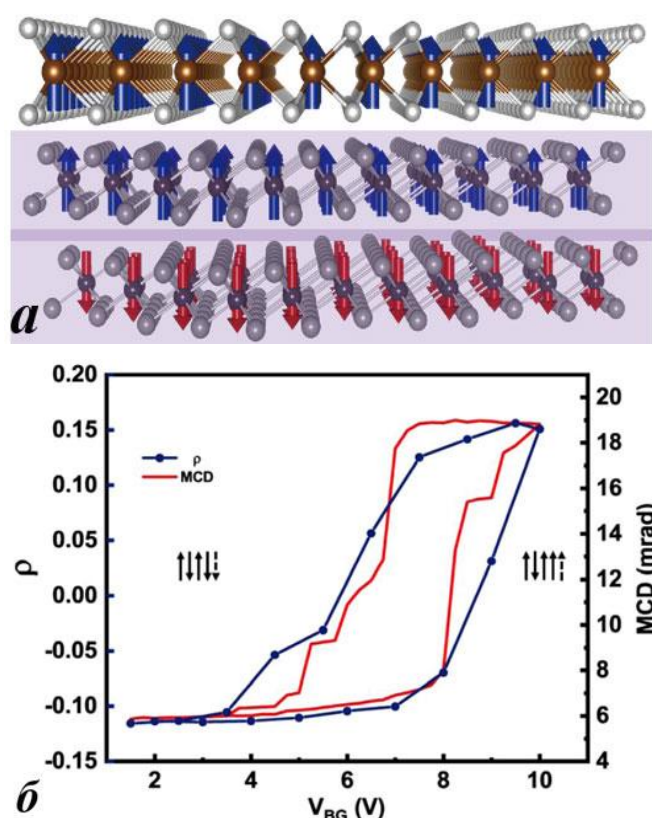


Рис. 1. Переключение долинной поляризации в двумерном материале WSe_2 : а - монослой WSe_2 (сверху) на подложке из CrI_3 (шарики со стрелками – ионы вольфрама и хрома, соответственно); б - переключение долинной поляризации (синяя кривая, ρ) и намагниченности (красная кривая, MCD) при изменении потенциала затвора (V_{BG}) в структуре из монослоя WSe_2 на подложке 4-слойного CrI_3 (сплошными стрелками показаны направления намагниченностей в четырех слоях CrI_3 , штриховой стрелкой – в WSe_2) [1].

Интрига состоит в том, что долинная поляризация, подобно намагниченности, непосредственно электрическим полем управляться не может, нужен посредник. В качестве такого выступает двумерный магнитный материал иодид хрома CrI_3 , который обладает магнитоэлек-

трическими свойствами. Под действием электрического поля в иодиде хрома переключается намагниченность верхнего слоя, и за счет обменной связи меняется направление спинов в двумерном селениде вольфрама WSe_2 , граничащего с ним.

Как показывает эксперимент, относительная заселенность двух долин, действительно, менялась при определенном критическом электрическом напряжении, что детектировалось по изменению поляризации фотолюминесценции WSe_2 . Это переключение долиной поляризации коррелировало с изменением магнитооптического сигнала, соответствующего переключению намагниченности в верхнем слое иодида хрома, граничащего с монослоем селенида вольфрама.

К сожалению, магнитное упорядочение в иодиде хрома наблюдается при температуре ниже 60 К, поэтому следующим логичным этапом этой работы стал бы подбор на роль затвора двумерного материала, сохраняющего магнетизм при комнатной температуре, таких как Fe_3GeTe_2 или гематен.

А. Пятаков

1. *L.Li et al., Phys. Rev. Mater. 4, 104005 (2020).*



Ушел из жизни выдающийся ученый и организатор науки академик **Владимир Евгеньевич Фортв.**

Талантливый ученый, творческий, увлеченный любимым делом человек, Владимир Евгеньевич всегда был полон новых идей и замыслов, ему было 74 года, он двух месяцев не дожил до своего юбилея.

Владимир Евгеньевич был Президентом Российской академии наук с 2013 по 2017 гг., многие годы директором, а затем научным руководителем Объединенного института высоких температур РАН. Лауреат государственных премий, полный кавалер ордена “За заслуги перед Отечеством”.

Светлая память о Владимире Евгеньевиче навсегда останется в наших сердцах.

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, З.Пятакова

Выпускающий редактор: И.Фурлетова

Адрес редакции: 119296 Москва, Ленинский проспект, 64