

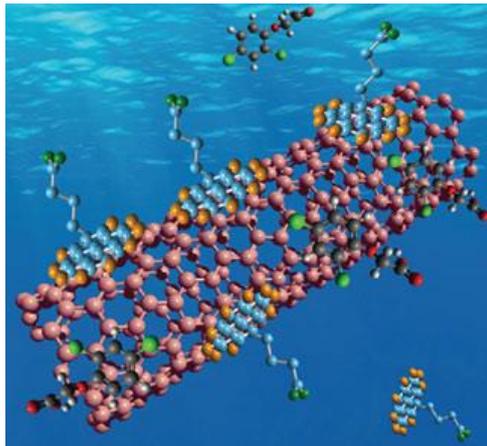
В этом выпуске:

## ФУЛЛЕРЕНА И НАНОТРУБКИ

### Углеродные нанотрубки эффективно очищают воду от ароматических органических молекул

Исследования, проведенные за последнее десятилетие, показали, что углеродные наноматериалы, особенно графен и углеродные нанотрубки, могут быть эффективно использованы в различных процессах водоподготовки. На основе углеродных нанотрубок разработаны сорбенты, удаляющие ионы тяжелых металлов, биосенсоры для детектирования токсинов в воде, композитные фильтры для дезинфекции (*подробнее см. Перст* [1,2]). Большой интерес представляют графеновые мембраны и мембраны из углеродных нанотрубок (в том числе композитные) [3]. Это новое поколение мембран для фильтрации, дезинфекции, обессоливания. Но, конечно, производство таких мембран пока остается сложным и дорогим. Для практического применения в настоящее время наибольший интерес представляют фильтры из углеродных нанотрубок. Американские исследователи (Rochester Institute of Technology) выяснили, как можно повысить эффективность удаления из воды ароматических органических загрязнений с помощью фильтров такого типа [4]. Эксперименты показали, что адсорбционная емкость одностенных углеродных нанотрубок полупроводникового типа (S-SWCNT) существенно выше (до 70.6 %), чем одностенных углеродных нанотрубок металлического типа (M-SWCNT). По мнению авторов, ароматические органические соединения сильнее взаимодействуют с S-SWCNT благодаря меньшей электронной плотности вблизи поверхности этих нанотрубок. На рис. 1 представлены данные по кинетике адсорбции для трех видов загрязнителей – пиренового модельного соединения и двух гербицидов. Во всех случаях нанотрубки S-типа оказались намного эффективнее нанотрубок M-типа.

Исследователи впервые использовали для очистки воды нанотрубки, сортированные по типу проводимости, и обнаружили влияние хиральности на сорбционные свойства. Дальнейшие эксперименты с S-SWCNT и M-SWCNT помогут разобраться в механизмах сорбции и выбрать нанотрубки наиболее эффективные для удаления конкретных загрязнений.



И далее ...

- 2 Фуллерен C<sub>60</sub> в роли детектора наркотических средств

### НАНОМАТЕРИАЛЫ

- 3 Диметаллофуллерены на основе бора

### МУЛЬТИФЕРРОИКИ

- 4 Доменная граница в роли фотозатвора

### КОНФЕРЕНЦИИ

- 5 Семинар–чтения “Спиновая динамика упорядоченных и квантовых магнетиков”, посвященный памяти Людмилы Андреевны Прозоровой, 17-18 мая 2017 г.

The International Conference  
Modern Development of  
Magnetic Resonance,  
25–29 September 2017,  
Kazan, Russian Federation

2<sup>nd</sup> International Workshop Novel  
Trends in Physics of Ferroics  
(NTPF’2017), July 6-8, 2017,  
St. Petersburg, Russia

QTC 2017 Conference  
Mesoscopic Transport and Quantum  
Coherence, August 5-8 2017,  
Espoo, Finland

- 6 28<sup>th</sup> International Conference on  
Low Temperature Physics,  
August 9-16, 2017,  
Gothenburg, Sweden

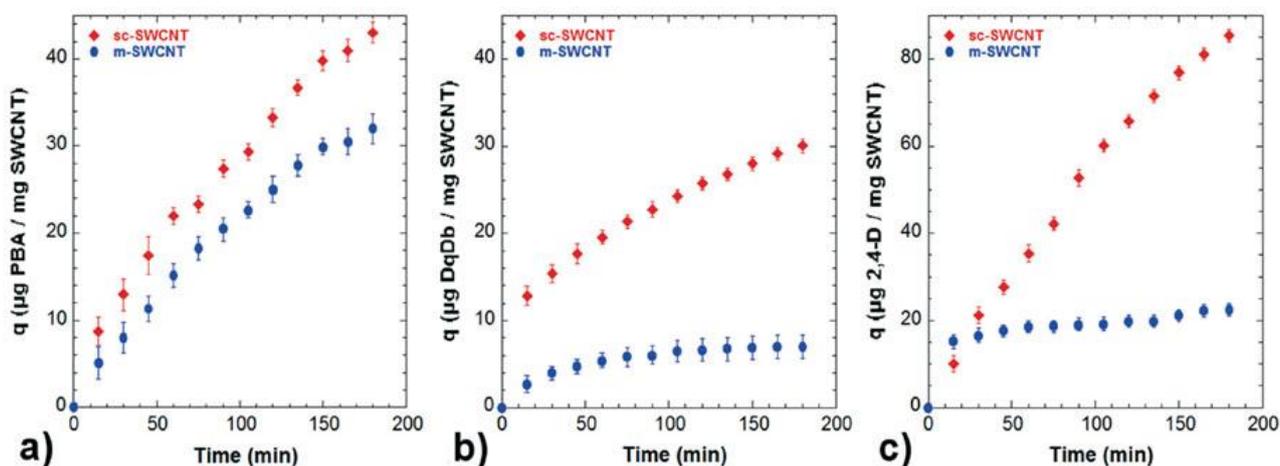


Рис. 1. Адсорбция как функция времени на S-SWCNT (красный цвет) и M-SWCNT (синий цвет):  
 а - PBA – пиренилмасляная кислота, б - DqDb – дихлорфеноксиуксусная кислота, с - 2,4-D-дикват дибромид.

Еще одно достижение авторов [4] – для разделения S-SWCNT и M-SWCNT они использовали хроматографический метод. Дисперсия нанотрубок М-типа свободно прошла через колонку, а нанотрубки S-типа благодаря сильному взаимодействию с гелевой средой (Sephacryl-200) остались в колонке (затем их извлекли путем промывания). Для изучения адсорбционной способности из нанотрубок с помощью вакуумной фильтрации и отжига сделали “бумагу” толщиной 10-20 мкм. Для сравнения использовали коммерческие S-SWCNT и M-SWCNT, разделенные методом ультрацентрифугирования в градиенте плотности, и “бумагу” из этих нанотрубок. Адсорбция на S- и M-нанотрубках, сортированных по типу проводимости с помощью хроматографической колонки, оказалась на 26.5 и 60% лучше, чем для коммерческих S-SWCNT и M-SWCNT, соответственно (рис. 2).

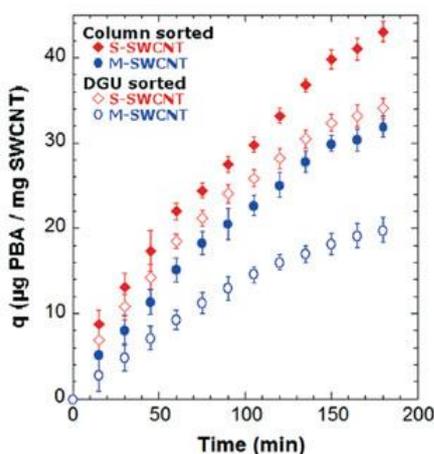


Рис. 2. Сравнение адсорбции пиренилмасляной кислоты на нанотрубках полупроводникового (красный цвет) и металлического типа (синий цвет), разделенных хроматографическим методом и методом ультрацентрифугирования в градиенте плотности (закрашенные и не закрашенные символы, соответственно).

Таким образом, использование хроматографического метода приводит к более эффективному разделению нанотрубок по типу проводимости. Метод легко масштабировать. Регенерацию фильтров для очистки воды провести очень легко – поместить их на 5 минут в микроволновку.

О. Алексеева

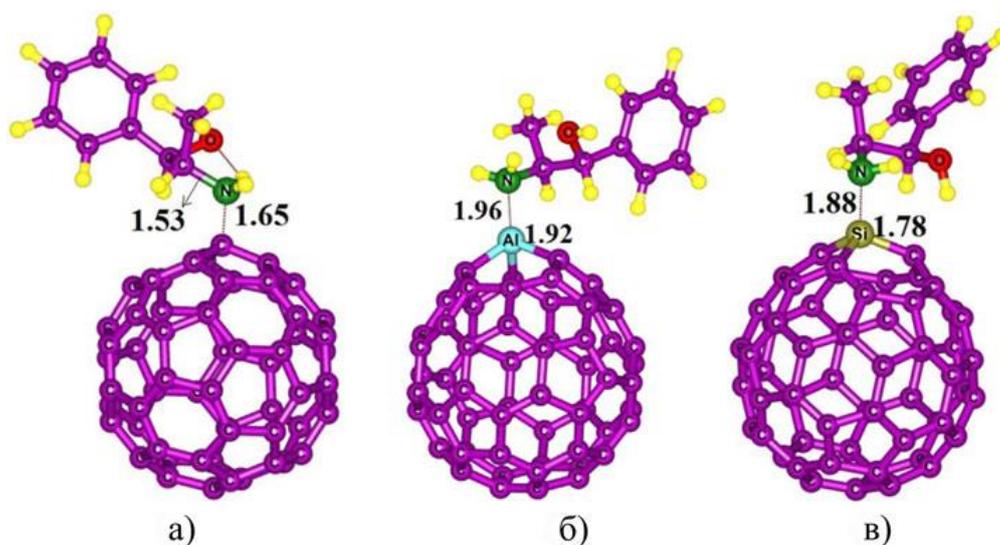
1. [ПерсТ 17, вып. 10, с. 5 \(2010\).](#)
2. [ПерсТ 18, вып. 4, с. 5 \(2011\).](#)
3. О.Алексеева, *ВодаMagazine* №6 (82), с.30 (2014).
4. J.-D.R.Rocha et al., *Environ. Sci.: Water Res. Technol.* 3, 203 (2017).

### Фуллерен C<sub>60</sub> в роли детектора наркотических средств

Исследователи из Materials and Energy Research Center, Islamic Azad Univ. (Иран) [1] предлагают бороться с наркотрафиком с помощью фуллеренов. На примере молекулы фенилпропаноламина или PPA (который, кстати, входит в список прекурсоров, оборот которых в Российской Федерации ограничен) и бакибола C<sub>60</sub> они попытались доказать эффективность использования фуллеренов для обнаружения наркотических веществ. Для этого авторы изучили электронную чувствительность и реакционную способность как чистого, так и допированных алюминием или кремнием фуллеренов к PPA с помощью теории функционала плотности. Вычисления выполняли в программе GAMESS, используя популярный функционал B3LYP с учетом дисперсионных поправок и базис 3-21G\*. Предложенный базис, на первый взгляд, представляется достаточно скудным, однако, по заверению авторов, расширение базисного набора не приводит к качественным изменениям физико-химических свойств рассматриваемых систем и по факту оказывается достаточным. В результате авторы предсказывают два различных механизма адсорбции PPA

на незамещенный  $C_{60}$ : циклоприсоединение и присоединение с помощью  $NH_2$ -группы (см. рис.). Незамещенный фуллерен, по их мнению, обладает неплохой чувствительностью к препарату, но слабо с ним взаимодействует из-за структурных искаже-

ний в процессе адсорбции и разрушения ароматичности. На допированный алюминием или кремнием  $C_{60}$  PPA присоединяется посредством  $OH$ - или  $NH_2$ -групп (см. рис.).



Адсорбция фенилпропаноламина посредством  $NH_2$ -группы на поверхность незамещенного фуллерена  $C_{60}$  (а), а также молекулярных комплексов  $Al-C_{60}$  (б) и  $Si-C_{60}$  (в). Межатомные расстояния приведены в ангстремах.

При этом алюминий значительно улучшает химическую активность фуллерена по отношению к PPA, но, с другой стороны, отрицательно влияет на электронную чувствительность к препарату. В отличие от алюминия легирование кремнием повышает как реакционную способность, так и электронную чувствительность фуллерена к PPA по сравнению с чистым  $C_{60}$ . Так, после закрепления PPA на поверхности фуллереновой клетки с помощью группы  $OH$  проводимость допированного кремнием  $C_{60}$  значительно увеличивается из-за уменьшения НОМО-LUMO щели более чем на 30%. По мнению авторов, это изменение проводимости может быть конвертировано в электрический сигнал, что и позволит эффективно определять присутствие PPA. В итоге авторы позиционируют допированные  $C_{60}$  как основу эффективных средств обнаружения наркотических средств для полиции и соответствующих спецслужб. Возможно, в перспективе этот прогноз успешно сбудется, однако вряд ли они смогут уже сегодня составить достойную конкуренцию современным коммерческим аналогам.

*М.Маслов*

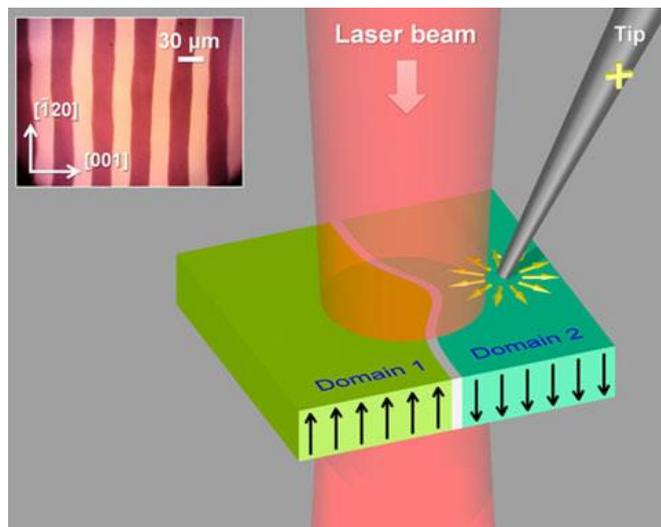
1. M.Moradi et al., *Physica E* 87, 186 (2017).

## НАНОМАТЕРИАЛЫ

### *Диметаллофуллерены на основе бора*

Традиционно металлофуллеренами называют эндоэдральные комплексы, представляющие собой классический углеродный фуллерен с атомами металла внутри. Считается, что подобные системы в будущем могут оказаться полезными, например, в качестве основы для систем доставки лекарственных средств или хранения различных газов. Исследователи из Hebei Univ. of Technology (Китай) [1] с помощью теории функционала плотности предсказывают существование соединений-аналогов, в которых углеродная клетка замещена борной и содержит не один, а сразу два атома металла: скандия или иттрия (см. рис.). Сами исследователи называют подобные структуры эндоэдральными диметаллоборофуллеренами. Оптимизацию геометрии и расчет их энергий связи они проводили в программе Gaussian 09 с использованием функционала PBE и гибридного базисного набора 6-31G\*/LANL2DZ. Оказалось, что оба рассмотренных в работе [1] комплекса  $Sc_2@B_{80}$  и  $Y_2@B_{80}$  термодинамически устойчивы, и их энергии связи составили 171.2 и 191.5 ккал/моль для  $Sc_2@B_{80}$  и  $Y_2@B_{80}$ , соответственно. Кроме того, кинетическая стабильность этих соединений достаточно высока. Исследователи выполнили молекулярно-динамические расчеты как при комнатной (300 K) температуре, так и при температуре 800 K (молекулярная динамика проводилась на уровне теории PBE/DND в программе DMol<sup>3</sup>). И в том, и в другом случае (хотя клетки, образованные атомами бора, и претерпевали не-

большие деформации) распада не происходило в течение как минимум 3000 фс. Дополнительной интересной особенностью обладает комплекс  $\text{Sc}_2@B_{80}$ . Как отмечают авторы, в зависимости от расположения атомов скандия внутри борного фуллера магнитный момент системы может принимать значения ноль или два магнетона бора. Таким образом,  $\text{Sc}_2@B_{80}$  является потенциальным кандидатом на роль одномолекулярного магнитного переключателя. Кроме того, авторы полагают, что расположение атомов металла внутри борной клетки можно регулировать с помощью внешнего ее допирования, и это позволит настраивать магнитные свойства системы желаемым образом.

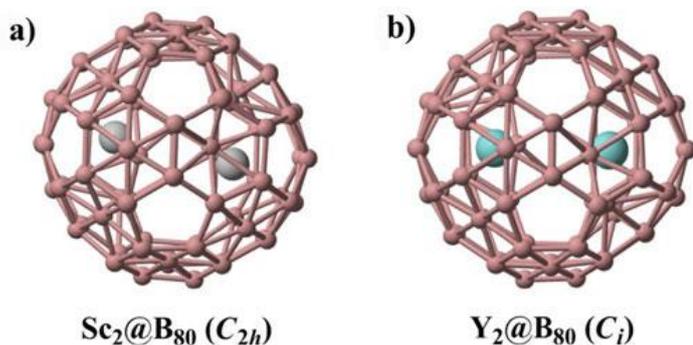


Электромагнитооптический модулятор на доменной границе, управляемой электрическим полем. На вставке – изображение доменной структуры феррита граната, помещенного между двумя поляроидами, оси которых скрещены под углом, близким к прямому.

Поскольку в предложенной схеме модулятора электрическое поле приводит к изменению угла фарадеевского вращения, то данный эффект относится к семейству *электромагнитооптических*, открытых в середине 80-х годов прошлого века [3]. В первых экспериментах изменение угла фарадеевского вращения под действием электрического поля плоских электродов (~100 кВ/см) не превышало одной угловой секунды, но вскоре выяснилось, что эффект можно на два порядка усилить, если сфокусировать луч в область границы между доменами [4]. Однако полностью реализовать весь потенциал электромагнитооптического эффекта можно лишь, локализовав не только оптическое излучение, но и электрическое поле, что и было сделано в [2] с помощью заостренного электрода-иглы. При этом вызванное электрическим полем изменение фарадеевского вращения достигает 100%. Таким образом, в новом модуляторе сочетается гигантская оптическая активность магнитных пленок с преимуществами электрического управления, которое позволяет инерционные и неудобные в изготовлении электромагниты заменить миниатюрными электродами, с их локальностью воздействия и быстротой управления.

А. Пятаков

1. [ПерсТ 22, вып. 17, с. 7 \(2015\); ПерсТ 15, вып. 23, с. 3 \(2008\).](#)
2. N.E.Khokhlov et. al., *Sci. Rep.* **8**, 13985 (2017).
3. В.В.Кричевцов, Р.В.Писарев, А.Г.Селицкий, *Письма в ЖЭТФ* **41**, 259 (1985).
4. В.В.Кричевцов, Р.В.Писарев, А.Г.Селицкий, *ЖЭТФ* **101**, 1056 (1992).



Атомные структуры энергетически наиболее выгодных изомеров  $\text{Sc}_2@B_{80}$  (a) и  $Y_2@B_{80}$  (b).

В результате исследователям удалось продемонстрировать возможность существования целого нового класса соединений на основе бора, поскольку диметаллоборофуллерены, в принципе, могут состоять из борных клеток различного размера и формы и содержать атомы металлов разного сорта. Авторы, безусловно, ожидают скорейшего синтеза хотя бы некоторых представителей этого семейства, и надеются, что “поймать” их на эксперименте помогут характеристические ИК-спектры, которые уже предсказаны теоретически.

М.Маслов

1. C. Liu et al., *Chem. Phys. Lett.* **676**, 89 (2017).

## МУЛЬТИФЕРРОИКИ

### Доменная граница в роли фотозатвора

Ранее в ПерсТе мы уже сообщали об электрической поляризации магнитных доменных границ и возможности их передвижения с помощью электрически заряженного электрода [1]. В недавней работе [2] группа исследователей физического факультета МГУ, Российского квантового центра, ИОФАН и МФТИ использовала этот магнитоэлектрический эффект для создания миниатюрного модулятора светового излучения на образце пленки редкоземельного феррита граната. Доменная граница, двигаясь в электрическом поле электрода, открывала и закрывала путь лучу лазера подобно краю шторки фотоаппарата (см. рис.).

## КОНФЕРЕНЦИИ

### **Семинар–чтения “Спиновая динамика упорядоченных и квантовых магнетиков”, посвященный памяти Людмилы Андреевны Прозоровой, 17-18 мая 2017 г.**

(Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, г. Москва)

Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН проводит двухдневный семинар-чтения по спиновой динамике, посвященный памяти Людмилы Андреевны Прозоровой. Планируется заслушать около 20 приглашенных и устных докладов и провести стендовую сессию.

Тематика семинара охватывает спиновую динамику магнитоупорядоченных сред и интерфейсов, квантовых и фрустрированных магнетиков.

Контакты:

Председатель Семинара:

А.И. Смирнов, тел. +7 499 137 09 98,

E-mail: [smirnov@kapitza.ras.ru](mailto:smirnov@kapitza.ras.ru)

Секретарь Семинара:

Ю.В. Красникова, тел. +7 499 137 06 59 доб. 396,

E-mail: [krasnikova.mipt@gmail.com](mailto:krasnikova.mipt@gmail.com)

Сайт:

[www.kapitza.ras.ru/rgroups/esrgroup/prozorova\\_seminar.html](http://www.kapitza.ras.ru/rgroups/esrgroup/prozorova_seminar.html)

### ***The International Conference Modern Development of Magnetic Resonance, 25–29 September 2017, Kazan, Russian Federation***

#### ***The Scope of the Conference***

- Theory of magnetic resonance
- Low-dimensional systems and nano-systems
- Electron spin based methods for electronic and spatial structure determination in physics, chemistry and biology
- Molecular magnets and liquid crystals
- Spin-based information processing
- Strongly correlated electron systems
- Chemical and biological systems
- Medical physics
- Magnetic resonance imaging
- Other applications of magnetic resonance
- Modern methods of magnetic resonance
- Magnetic resonance instrumentation
- Related phenomena

#### ***Language***

The official language of the conference is English

The Zavoisky Physical-Technical Institute of the Russian Academy of Sciences, the Academy of Sciences of the Republic of Tatarstan and the Kazan Federal University organize the Zavoisky Week in the period from 25 till 29 September 2017 including the annual International Conference “Modern Development of Magnetic Resonance 2017”, the Zavoisky Award 2017 ceremony ([www.kfti.knc.ru/en/zavoisky](http://www.kfti.knc.ru/en/zavoisky)) supported by the Government of the Republic of Tatarstan and a special session devoted to the 110 anniversary of E.K. Zavoisky. The conference is organized under the auspices of the Groupement AMPERE.

#### ***Important Dates***

Deadline for the registration and submission of abstracts **June 30, 2017**

Notification of the report acceptance **July 15, 2017**

Zavoisky Award 2017 ceremony **September 29, 2017**

Web: [www.kfti.knc.ru/mdmr/2017](http://www.kfti.knc.ru/mdmr/2017)

### ***2<sup>nd</sup> International Workshop Novel Trends in Physics of Ferroics (NTPF’2017), July 6-8, 2017, St. Petersburg, Russia***

NTPF’2017 is the satellite event of the Moscow International Symposium on Magnetism MISM’2017 (<https://mism.magn.ru>), and is devoted to recent advances in physics of magnetic, ferroelectric, multiferroic and other types of ferroic media.

For more information on the Workshop, abstract submission, and on-line registration please visit the website: <http://www.ioffe.ru/optics/NTPF2017>.

### ***QTC 2017 Conference Mesoscopic Transport and Quantum Coherence, August 5-8 2017, Espoo, Finland***

The QTC 2017 conference will be organized August 5-8, 2017 in Espoo, Finland. It is the official satellite of the 28th International Conference on Low Temperature Physics, LT28, <http://www.lt28.se>, and is endorsed by the IUPAP.

QTC 2017 brings together experts working on topics involving quantum effects in electron transport, superconducting qubits and hybrid circuits, quantum thermodynamics, circuit QED, cavity optomechanics, topological and 2D materials.

#### ***Important Dates***

Registration & Abstract submission now open **April 30**

Abstract submission deadline **May 31**

E-mail: [qtc2017@aalto.fi](mailto:qtc2017@aalto.fi)

Web: <http://qtc2017.aalto.fi/>

**28<sup>th</sup> International Conference on Low  
Temperature Physics, August 9-16, 2017,  
Gothenburg, Sweden**

We are very pleased to welcome physicists from all over the world to Gothenburg, Sweden, for the 28th International conference on low temperature physics.

The Low Temperature Physics Conference is an international event held every three years, under the auspices of the IUPAP through its Commission C5 on Low Temperature Physics. The aim of these conferences is to exchange information and views among the members of the international scientific community in the general field of Low Temperature Physics. It is a tradition that LT offers updates on the various topics, provided by the highest representatives of the field, as well as oral and poster contributions in the different areas. As usual the conference covers five subtopics:

- Quantum fluids and solids
- Superconductivity
- Cryogenic techniques and applications
- Magnetism and quantum phase transitions
- Quantum transport and quantum information in condensed matter

**Important Dates**

Extended abstract submission deadline **May 1**

Early bird registration deadline **May 3**

Web: <http://www.lt28.se/>

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<sup>а</sup>