

ISSN: 2782-5515

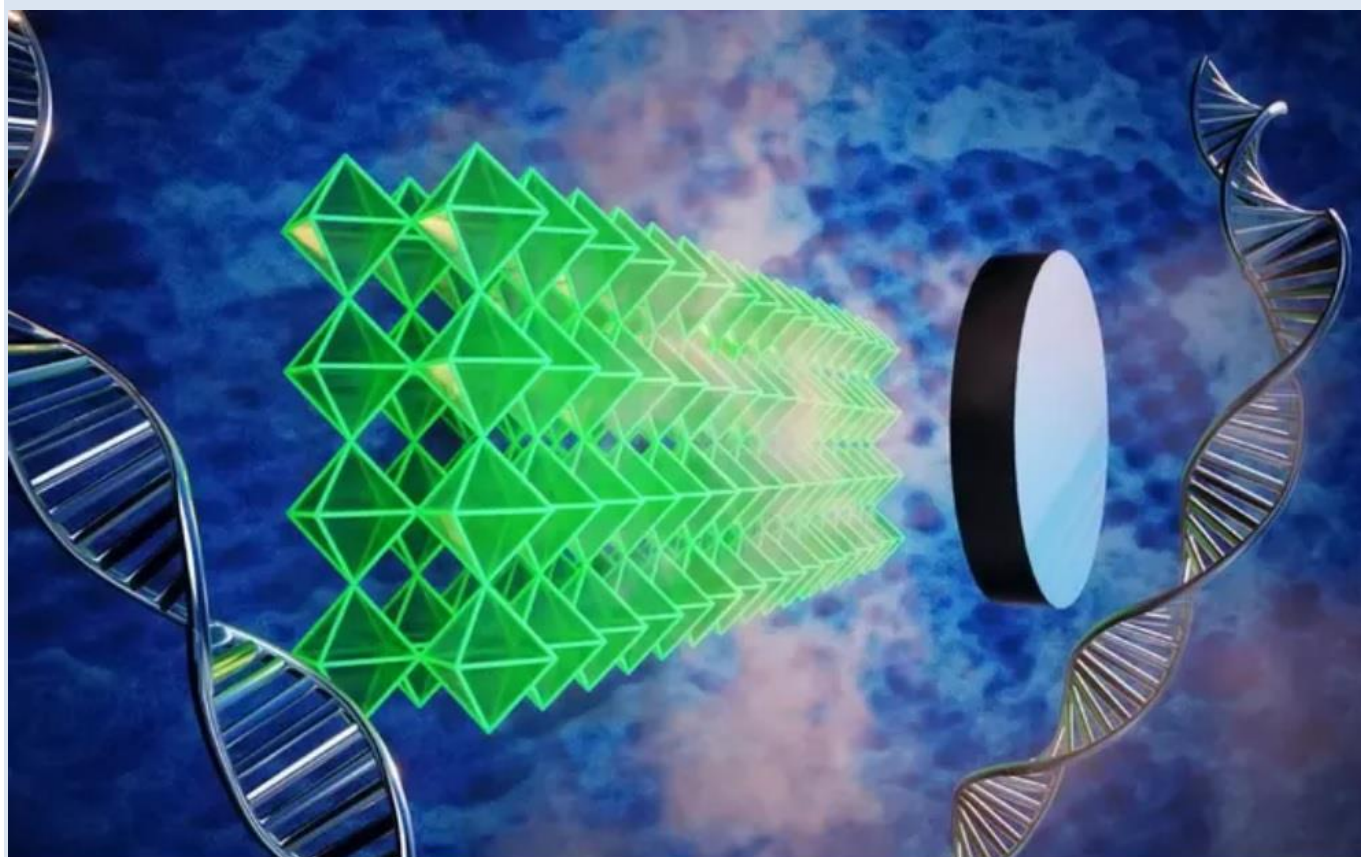


Перст

Информационный бюллетень
перспективные технологии
наноструктуры сверхпроводники фуллерены

Том 29, выпуск 5

май 2022 г.



Наноструктуры/Brookhaven National Lab/

Черноголовка

В этом выпуске:

ДЛЯ ПРАЗДНОГО УМА

Флуоресцентный шёлк можно получить, подкармливая шелковичных червей углеродными точками

Шёлковая нить из коконов тутового шелкопряда *Bombyx mori*, известная с древнейших времен, сейчас используется не только для получения тканей, но и в медицине, в биомедицине, электронике. Эти нити – лёгкие, тонкие, достаточно прочные, эластичные. Исследования показали, что на их основе можно создать сверхпрочные композиты даже без использования сложного оборудования и вредных реагентов. Достаточно подобрать правильное питание для шелковичных червей (гусениц тутового шелкопряда). Например, распылить на листья тутового дерева, любимую пищу червей – суспензии графена или углеродных нанотрубок (*подробнее см. Перст* [1]). Другой вариант – добавить в корм нановолокна целлюлозы, получаемой из растений (*см. Перст* [2]). Нужная сверхпрочная структура формируется *in vivo* в жидкой текучей среде “прядельного аппарата” шелковичных червей.

В последнее время исследователи активно работают над созданием флуоресцентного шёлка. Он интересен не только для получения светящегося текстиля, но и для медицины и биоинженерии. Природный шёлк либо не является флуоресцентным, либо под действием УФ-излучения проявляет слабое голубоватое или бледно-жёлтое свечение. Чтобы добиться флуоресценции используют генное модифицирование или добавление органических красителей. Первый подход дорогой и требует длительных процедур, второй – вреден для здоровья и окружающей среды. Оптимальная стратегия – использовать биосовместимые люминесцентные добавки к корму для червей. Самыми подходящими кандидатами являются углеродные точки, или углеродные квантовые точки (УТ). Это углеродные наноструктуры, обычно состоящие из одного или нескольких слоев графена. Они уже показали свою эффективность для визуализации биообъектов, доставки лекарств, фототермической терапии, но их люминесцентное излучение в основном ограничено синей и зеленой областями спектра. Сообщений о синтезе “красных” или “инфракрасных” углеродных точек, особенно важных для биологических применений, очень мало. Работы по расширению спектра излучения в красную область ведутся и в России в университете ИТМО, где несколько лет назад была создана лаборатория “Светоизлучающие углеродные квантовые наноструктуры” [3].

И далее ...

СНОВА К ОСНОВАМ

- 5 Вопрос выживания кота Шрёдингера

НАНОМАТЕРИАЛЫ

- 5 Решение фундаментального вопроса об основном состоянии нитрида бора

СПИНТРОНИКА

- 7 Обнаружен новый источник затухания спиновых волн в пленках ферритов гранатов

КОНФЕРЕНЦИИ

- 8 Четвёртая школа молодых ученых “Новые материалы и технологии для систем безопасности”, с 1 по 2 июня 2022 года, Черноголовка, Московская область

Девятая Всероссийская конференция с международным участием “Топливные элементы и энергоустановки на их основе”, Шестая школа молодых ученых “Современные аспекты высокоэффективных топливных и электролизных элементов”, с 20 по 23 июня 2022 года, Черноголовка, Московская область

Однако необходимо учитывать, что УТ, применяемые в качестве добавок к корму для создания флуоресцентного шёлка *in vivo*, должны не только давать интенсивное красное излучение, но и быть безопасными для шелколичных червей в течение длительного времени. После изучения множества вариантов исследователи из

Fudan Univ. (Китай) [4] сумели подобрать нужное сырьё для создания эффективных и безопасных УТ – листья шелковицы. Способ синтеза простой, экологичный, позволяет получать яркие “красные” углеродные точки в больших количествах из дешевой биомассы.



Рис. 1. Схема синтеза УТ из листьев шелковицы

Как видно из схемы (рис. 1), листья растёрли, замочили в спирте, прогрели в автоклаве и высушили в роторном испарителе. Экстракцию углеродных точек проводили, используя смесь воды и дихлорметана. Углеродные точки, извлеченные из воды, показали только зеленое свечение, а из дихлорметана – яркое красное.

Излучение “красных” УТ имеет узкий пик (FWHM = 20 нм) при 676 нм и плечо при 725 нм. Квантовый выход достигает 73%. Эти углеродные точки имеют одинаковый размер ~ 3 нм, расстояние между слоями 0.21 нм (рис. 2). Гидрофобность – еще одно преимущество полученных “красных” УТ при использовании их в качестве добавок к корму, т.к. гидрофильные быстро выводятся из организма. Исследования с помощью XPS и др. методов показали, что степень графитизации “зеленых” углеродных точек гораздо ниже, в их составе больше азота и кислорода, на поверхности много гидрофильных полимерных цепочек.

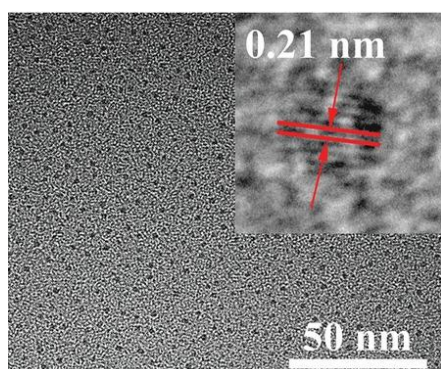


Рис. 2. ТЕМ и HRTEM (во врезке) изображение “красных” углеродных точек.

Насколько известно авторам работы [4], таких ярких “красных” УТ еще никому не удалось синтезировать. Сильная красная флуоресценция возникает при возбуждении излучением в широком диапазоне длин волн от УФ до красного цвета, и даже под действием солнечного света. Она видна невооруженным глазом, и за состоянием шелколичных червей, накормленных “красными” УТ, легко наблюдать.

Исследователи [4] кормили несколько сотен гусениц свежими листьями шелковицы. После четвертой линьки для экспериментов отобрали 120 червей с одинаковым весом. Для контроля 20 червей продолжали кормить, как и раньше, а остальным давали листья, на которые распылили раствор “красных” УТ. Эти гусеницы продолжали расти так же, как и контрольные, и затем сплели коконы. Из коконов вышли бабочки, которые в положенное время отложили яйца. И все они, и гусеницы, и коконы, и бабочки, и яйца были люминесцентными. На фотографиях червя, получившего корм с “красными” УТ видно яркое красное свечение при возбуждении зеленым излучением (рис. 3а). Для червей из контрольной группы наблюдали только слабую зеленоватую люминесценцию при возбуждении УФ (рис. 3б).

Черви, получившие корм с разными концентрациями УТ, а также черви из контрольной группы развивались практически одинаково (рис. 3с), и ни один из них не умер. На фотолюминесцентном спектре червей, получивших с кормом УТ (рис. 3е), присутствуют те же пики, что и на спектре синтезированных “красных” УТ, то есть углеродные точки в организме червей не изменились. Коконы при дневном

освещении розоватые, а при воздействии УФ излучения проявляют красную флуоресценцию (рис. 3f). Также в УФ видно слабое красное свечение бабочек, вышедших из коконов (рис. 3g). Из яиц, которые отложили эти бабочки, появилось новое поколение жизнеспособ-

ных шелковичных червей, что подтвердило полную биосовместимость “красных” УТ. Дополнительный ТЕМ анализ подтвердил, что “красные” УТ, съеденные с кормом, попали в прядильные железы червей, что и привело к флуоресценции коконов.

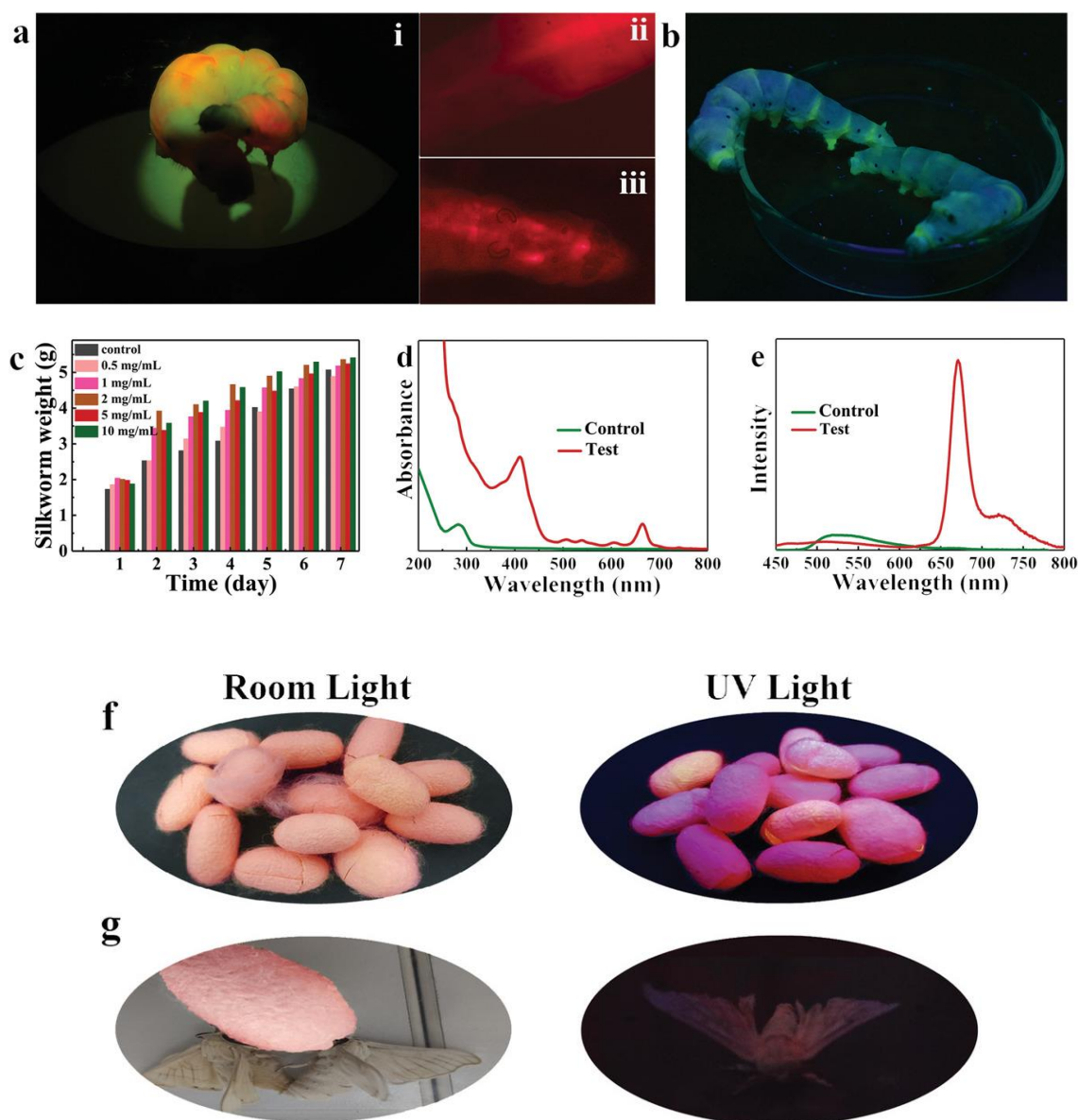


Рис. 3. **a** - Фотографии шелковичного червя, получившего корм с “красными” УТ: **i** - гусеница при зелёном освещении, **ii** - голова и **iii** - грудная клетка под флуоресцентным микроскопом с зеленым фильтром. **b** - Черви из контрольной группы при УФ освещении. **c** - Изменение веса червей, получивших разные концентрации УТ, а также червей из контрольной группы, в последние 7 дней перед формированием кокона. **d** - Спектры поглощения стенок тела червей с УТ и контрольных при УФ воздействии. **e** - Эмиссионные спектры стенок тела червей с УТ и контрольных. **f** - Коконы и **g** - бабочки червей с УТ при дневном и УФ освещении, соответственно.

Метод синтеза красных углеродных точек, разработанный авторами [4], позволяет получать их в большом количестве из дешевого сырья – листьев шелковицы.

Выживаемость шелковичных червей, которым к корму добавляли эти УТ, практически 100%, и в будущем можно рассчитывать на массовое

производство красного флуоресцентного шёлка для практических применений.

О. Алексеева

1. [ПерсТ 28, вып. 5/6, с. 5 \(2021\).](#)
2. [ПерсТ 23, вып. 21/22, с. 5 \(2016\).](#)
3. E.A.Stepanidenko et al., *Nanomaterials* **12**, 543 (2022).
4. J.Liu et al., *Adv. Mater.* **34**, 2200152 (2022).

СНОВА К ОСНОВАМ

Вопрос выживания кота Шрёдингера

С парадоксом кота Шрёдингера на протяжении многих десятилетий сталкиваются все изучающие квантовую механику, да и люди, далёкие от науки, тоже слышали про него. Мысленный эксперимент с котом в ящике рассматривается как демонстрация парадоксальности квантовой механики, но сегодня среди учёных уже нет сомнений в объективности квантовомеханических законов. Сам термин “кот Шрёдингера” применяется для описания макроскопической системы, управляемой состоянием микроскопической частицы, и уже создано много вариантов “котов” на основе самых разных физических носителей – фотонов, ионов, ридберговских атомов, и они активно применяются в квантовых вычислениях. Но вопросы, касающиеся интерпретации, остаются. Микроскопическое ядро может быть в суперпозиции двух состояний (нераспавшееся-распавшееся), а макроскопический кот обязан быть живым или мертвым вне зависимости от наблюдателя. Возникает вопрос, где граница между “микроскопическим” и “макроскопическим”, при каких условиях происходит переход от суперпозиции состояний к чётко определенному?

В недавней работе [1] исследователи из ФТИ РАН нашли ответ на этот вопрос, создав аналитическую модель макроскопической квантовой системы, образующей большое числа мод – собственных функций частиц. Многомодовая система может быть поделена на две подсистемы: “кот” -подсистема, которая может находиться в суперпозиции двух состояний, условно названных “жив” и “мёртв”, и окружение – подсистема, состояния которой квантово связаны с состояниями “кота”. Частицами в данной системе являются фотоны, в каждой моде среднее число фотонов мало ($\ll 1$), но общее число фотонов достаточно велико.

ПерсТ, 2022, том 29, выпуск 5

Поскольку состояния хорошо различимы, то для определения состояния “кота” достаточно измерить сравнительно небольшое число мод, содержащих порядка одного фотона. В численном эксперименте можно менять количество мод и среднее количество фотонов в каждой моде, и смотреть, при каких условиях система перейдет из смешанного состояния в четко определённое – “жив” или “мёртв”, то есть произойдёт коллапс волновой функции. На рис. 1 показан график зависимости “выживания” кота в зависимости от количества измеренных мод. Расчёты показали, что, начиная с 15000 мод (при среднем числе фотонов на моду, равном 10^{-4}), суперпозиция состояний “кота” разрушается, и “кот” переходит в определенное состояние, как и положено классической макроскопической системе. Как пишут авторы [1], “Таким образом, судьба легендарного кота Шрёдингера зависит не от макроскопического наблюдателя, а от микроскопических процессов, затрагивающих ограниченное число мод окружения и составляющих ничтожно малую долю от самого исходного многомодового состояния”.

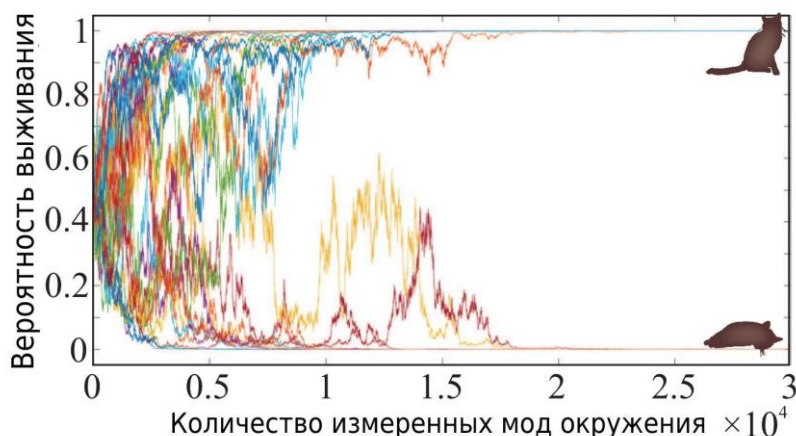


Рис. 1. Вероятность выживания “кота Шрёдингера” при в зависимости от количества мод окружения (численный эксперимент).

Разработанный авторами подход может быть применён к широкому классу систем, используемых в квантовых вычислениях. А для исследователей из других областей эти результаты несомненно интересны с позиции общего понимания квантовых закономерностей.

З. Пятакова

1. Ю.И.Богданов и др., *Письма в ЖЭТФ* **115**, 520 (2022).

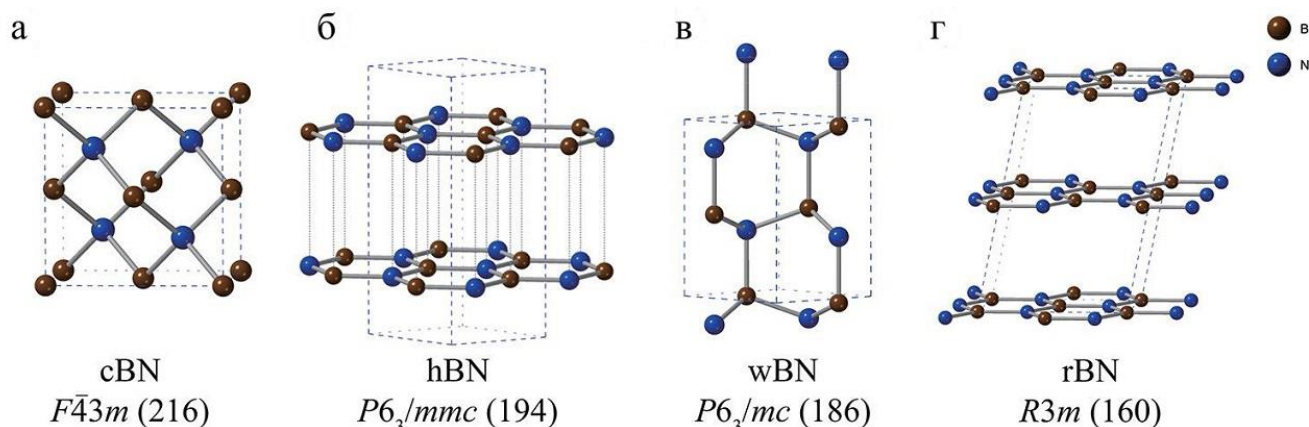
НАНОМАТЕРИАЛЫ

Решение фундаментального вопроса об основном состоянии нитрида бора

Нитрид бора (BN) – это универсальный материал, который применяется сейчас в различных областях науки и техники. Во многом это связано с таким интересным свойством, как полиморфизм, а именно способностью кристаллизоваться в более чем одном типе структуры. При этом различные “полиморфы” заметно различаются по своим физическим свойствам, несмотря на то, что имеют одинаковый химический состав. В результате эта способность играет важную роль в дизайне материалов. Понимание того, как получать, контролировать или поддерживать определенную фазу в зависимости от заданных условий, имеет решающее значение для материаловедения. В случае нитрида бора известно о существовании четырех стабильных полиморфных модификаций в узком энергетическом диапазоне: гексагональ-

ной (hBN), ромбоэдрической (rBN), вюрцитной формы (wBN) и структуры типа цинковой обманки (cBN). Первые две модификации относят к так называемому sp^2 -гибризованному нитриду бора, а последние два – к sp^3 -гибризованному (см. рис.).

Несмотря на многочисленные эксперименты по определению относительной устойчивости этих кристаллических полиморфов, консенсуса по этому вопросу пока не достигнуто. Собственно, поставить окончательную точку в решении этой фундаментальной задачи и попытались исследователи из Японии, США, Индии и Италии [1] с помощью метода квантового Монте-Карло, а именно диффузионного Монте-Карло с фиксированным узлом (fixed-node diffusion Monte Carlo, FNDMC). Выбор FNDMC обусловлен его эффективностью при количественном анализе слабых ван-дер-ваальсовых взаимодействий.



Полиморфные модификации нитрида бора: а – cBN, б – hBN, в – wBN и г – rBN. Атомы бора и азота показаны коричневым и синим цветом, соответственно.

Расчеты FNDMC авторы выполняли в пакете QMCPACK с пробной волновой функцией типа Слейтера-Джастроу (Slater-Jastrow). Орбитали детерминанта Слейтера исследователи определяли с помощью теории функционала плотности (DFT) с функционалом vdW-DF2 в программе Quantum Espresso. Согласно данным FNDMC, наиболее стабильной структурой оказался все-таки hBN, за которым последовали rBN, cBN и, наконец, wBN. При этом hBN является наиболее термодинамически устойчивым среди четырех кристаллических полиморфов при атмосферном давлении как при 0 К, так и при комнатной температуре (300 К). Энергия Гиббса полиморфов BN при конечной

температуре оценивалась с помощью фононных расчетов DFT в дополнение к энергии FNDMC. Примечательно, что данные FNDMC согласуются с результатами, полученными с помощью других прецизионных подходов квантовой химии, таких как метод связанных кластеров. Авторы отмечают, что представленное исследование не только отвечает на фундаментальный вопрос об основном состоянии нитрида бора, но и демонстрирует способность FNDMC действительно верно учитывать “тонкие” различия в энергии, связанные с ван-дер-ваальсовыми силами. Таким образом, молекулярное моделирование, основанное на этом точном и эффективном методе, позволит рас-

ширить возможности проектирования соединений в фармацевтике и катализе.

М. Маслов

I. Y. Nikaido et al., J. Phys. Chem. C 126, 6000 (2022).

СПИНТРОНИКА

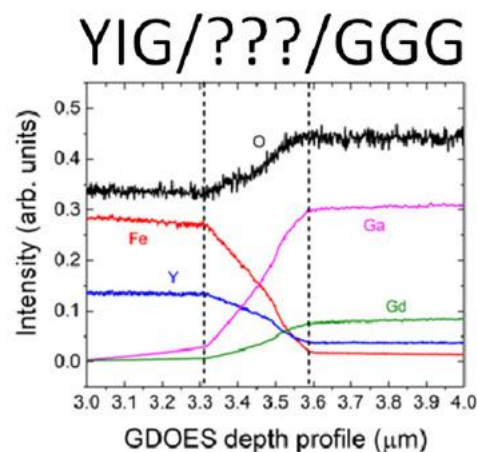
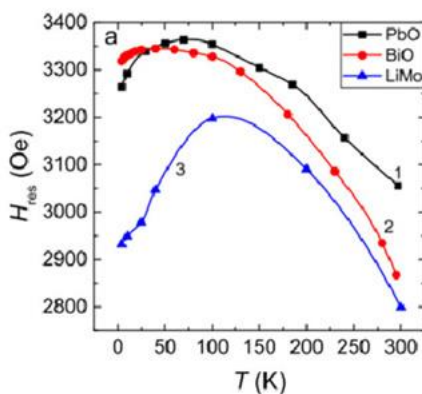
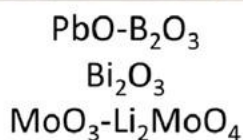
Обнаружен новый источник затухания спиновых волн в пленках ферритов гранатов

Пленки железо-иттриевых гранатов (ЖИГ), основного материала магнитооптики, в последнее время рассматриваются и как перспективные материалы для магнонных приложений, что связано с очень низкой $\sim 10^{-5}$ величиной параметра затухания Гильберта. Однако при создании на их основе квантовых вычислительных систем [1] с большим временем корреляции магнонов и малыми размерами элементов,

требования к параметру затухания среды становятся еще жестче.

Квантовые вычисления подразумевают работу при низких температурах и тут, казалось бы, не должно быть проблем с затуханием, так как диссипация обычно уменьшается при понижении температуры. И вот тут-то исследователей ждет неприятный сюрприз: в пленках ферритов гранатов при температурах ниже 50 К наблюдается рост затухания.

В работе российских ученых из МГУ, Крымского федерального университета, Российского квантового центра, МФТИ, Института экспериментальной минералогии РАН и МИЭТ [2] найден источник этого дополнительного затухания и предложен способ, как от него избавиться.



Слева – ростовая установка, под ней – формулы обычно используемых растворителей. Справа – кристаллическая структура ЖИГ (YIG). На графиках: температурная зависимость резонансного магнитного поля для трех видов растворов и распределение ионов по толщине пленки – виден переходный слой с повышенным содержанием Gd между пленкой ЖИГ и подложкой из $\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ (GGG)[2].

Методом оптической эмиссионной спектроскопии с тлеющим разрядом они обнаружили 300-нанометровый слой на границе между пленкой железо-иттриевого граната и подложкой из гадолиний-галлиевого граната, в котором намагниченность при низких температурах может на порядок превосходить намагниченность в самой пленке (за счет высокой концентрации редкоземельного гадолиния). Казалось бы, что в этом плохого? Однако при возбуждении спиновых волн в пленке в этом слое также возбуждается ферромагнитный резонанс, что приводит к дополнительным потерям энергии.

Избавиться от этого неожиданного источника затухания можно лишь отказавшись от тради-

ционно используемых для роста ЖИГ подложек из гадолиний-галлиевого граната: авторы, например, предлагают растить пленки на подложке из $\text{Y}_3\text{Ga}_3\text{Sc}_2\text{O}_{12}$.

А. Пятаков

- Y.M. Bunkov et al., Sci. Rep. 11, 7673 (2021).*
- A.N. Kuzmichev et al., Mater. Res. Bull. 149, 111691(2022).*

КОНФЕРЕНЦИИ

Четвёртая школа молодых ученых “Новые материалы и технологии для систем безопасности”, с 1 по 2 июня 2022 года, Черногловка, Московская область

Четвёртая школа молодых ученых “Новые материалы и технологии для систем безопасности” планируется местом обсуждения современного состояния и перспектив исследований в актуальных областях физики твёрдого тела и физической химии – физики новых полупроводниковых и металлических материалов. Значительное внимание предполагается уделить вопросам, связанным с разработкой новых физических принципов детектирования электромагнитных волн терагерцового диапазона, созданию новых метаматериалов, позволяющих усиливать оптические сигналы, развитию новых технологий для производства микроэлектронных структур.

Проведение Четвёртой школы молодых ученых “Новые материалы и технологии для систем безопасности” планируется в онлайн-формате на платформе Zoom. В качестве слушателей на конкурсной основе приглашаются молодые ученые в возрасте до 35 лет включительно.

E-mail: elena.morozova@gmail.com

Web: <http://www.issp.ac.ru/nmtss2022/>

Девятая Всероссийская конференция с международным участием “Топливные элементы и энергоустановки на их основе”, Шестая школа молодых ученых “Современные аспекты высокоэффективных топливных и электролизных элементов”, с 20 по 23 июня 2022 года, Черногловка, Московская область

Тематика конференции

На конференции предполагается обсудить следующие вопросы:

- Анионные проводники. Изготовление газоплотных пластин анионных проводников. Тонкопленочные технологии.
- Катодные материалы для ТОТЭ. Получение и свойства. Новые материалы со смешанной ионно-электронной проводимостью. Исследование самодиффузии анионов кислорода в материалах с ионно-электронной проводимостью.

- Анодные материалы для ТОТЭ. Структура и свойства композиционных анодов. Серотолерантные аноды.
- Процессы переноса заряда и протекания окислительно-восстановительных реакций на электродах топливных элементов. Изучение механизмов деградации и методы увеличения ресурса топливных элементов.
- Мембранно-электродные блоки. Технология нанесения многослойных электродов. Приготовление паст.
- Дизайн ячеек ТОТЭ. Технологии изготовления ячеек и их характеристики.
- Высокотемпературные клеи и герметики.
- Защитные покрытия. Отработка режимов нанесения. Длительные ресурсные испытания.
- Расчет конструкции и изготовление токовых коллекторов.
- Расчет конструкции стека, включая моделирование газораспределения, тепловыделения и упругих напряжений. Моделирование электрохимических процессов.
- Энергоустановки на ТОТЭ.
- Твердополимерные электролиты и мембраны. Новые материалы с высокой протонной проводимостью.
- Процессы переноса заряда в протон-обменных мембранах, кроссовер водорода, кислорода и азота.
- Высокоэффективные катализаторы для водородно-воздушных топливных элементов. Катализаторы, толерантные к СО, катализаторы для окисления спиртов.
- Методы исследования материалов, компонентов единичных топливных элементов и стеков. Импедансная спектроскопия.
- Энергоустановки на топливных элементах с протонообменной мембраной.
- Топливные процессоры для производства синтез-газа. Конверсия спиртов и углеводов.
- Методы получения водорода и материалы для хранения водорода.
- Щелочные топливные элементы и ЭУ на их основе.

- Гибридные энергоустановки.
- Экономические оценки эффективности использования энергоустановок на базе топливных элементов и их себестоимости.

E-mail: fuelcell2022@issp.ac.ru

Web: <http://www.issp.ac.ru/fuelcell2022/>

Информационный бюллетень ПерсТ
издается информационной группой ИФТТ РАН

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