

В этом выпуске:

НАНОМАТЕРИАЛЫ

В Новый год – с борофеном

Интернациональный коллектив ученых из США, Китая и России преподнес замечательный новогодний подарок международному нанотехнологическому сообществу, синтезировав атомарно тонкие пленки бора – борофен [1]. Используя твердый бор в качестве источника атомов бора, авторы вырастили монослои борофена на подложках Au(111) в условиях сверхвысокого вакуума (рис. 1).

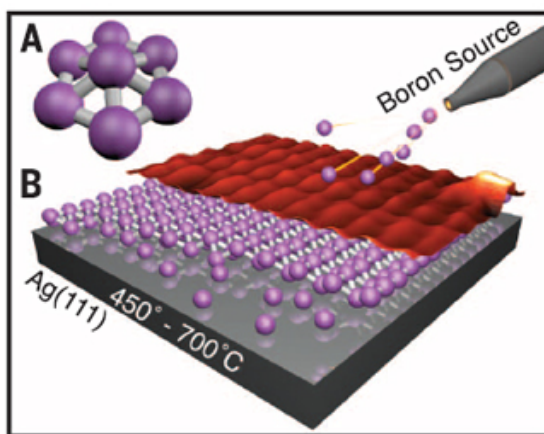


Рис. 1. Кластер B_7 – “строительный блок” для борофена (А) и схематическое изображение процесса роста борофена (В).

Они обнаружили сосуществование в этих монослоях двух фаз – однородной (метастабильной) и “страйповой” (устойчивой, рис. 2), – относительное содержание которых в образце зависит от скорости осаждения и температуры синтеза. Расчеты электронной структуры борофена указывают на то, что он является металлом (рис. 3) – в отличие от объемных полупроводниковых аллотропных модификаций бора.

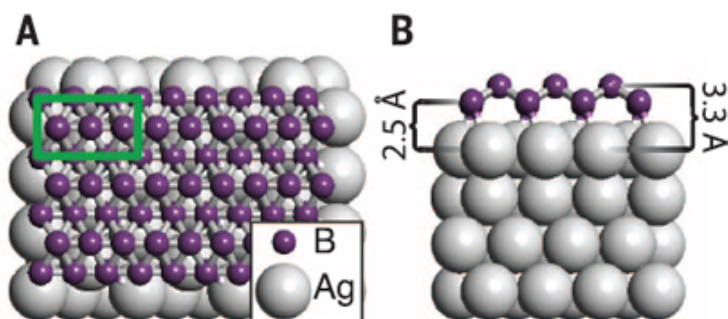


Рис. 2. Структура низкоэнергетической страйповой фазы борофена. Виды сверху (А) и сбоку (В). Зеленой линией показана элементарная ячейка.

Это подтверждают данные сканирующей туннельной спектроскопии. Волнистость вдоль направления b приводит к сильной анизотропии электропроводности.

И далее ...

2 Восставший из мусора

КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ

3 Три стадии декогерентизации электронных спиновых кубитов в квантовых точках

Вейлевские полуметаллы второго типа

Классическая запутанность?

ГРАФЕН

4 Графен борется с биокоррозией

НАНОСТРУКТУРЫ, НАНОТЕХНОЛОГИИ

6 Скирмионы в сегнетоэлектрическом нанокompозите

Лист лотоса – основа метаматериалов

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

8 Устойчивость углеродного гиперкуба

КОНФЕРЕНЦИИ

9 50-ая Школа по физике конденсированного состояния (ФКС-2016), 14-19 марта 2016 г., Санкт-Петербург (Зеленогорск)

5th International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences (IC-MSQUARE 2016), May 23-26, 2016, Athens, Greece

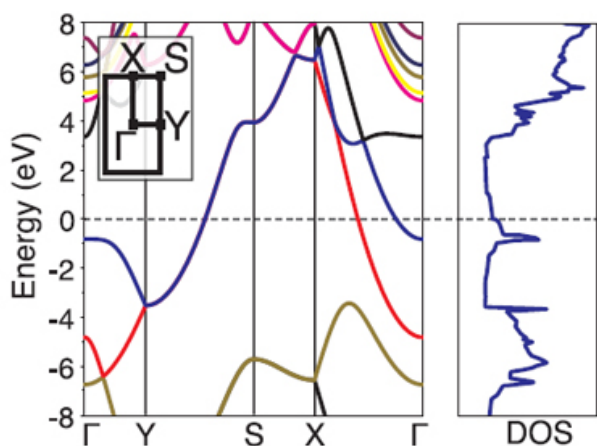


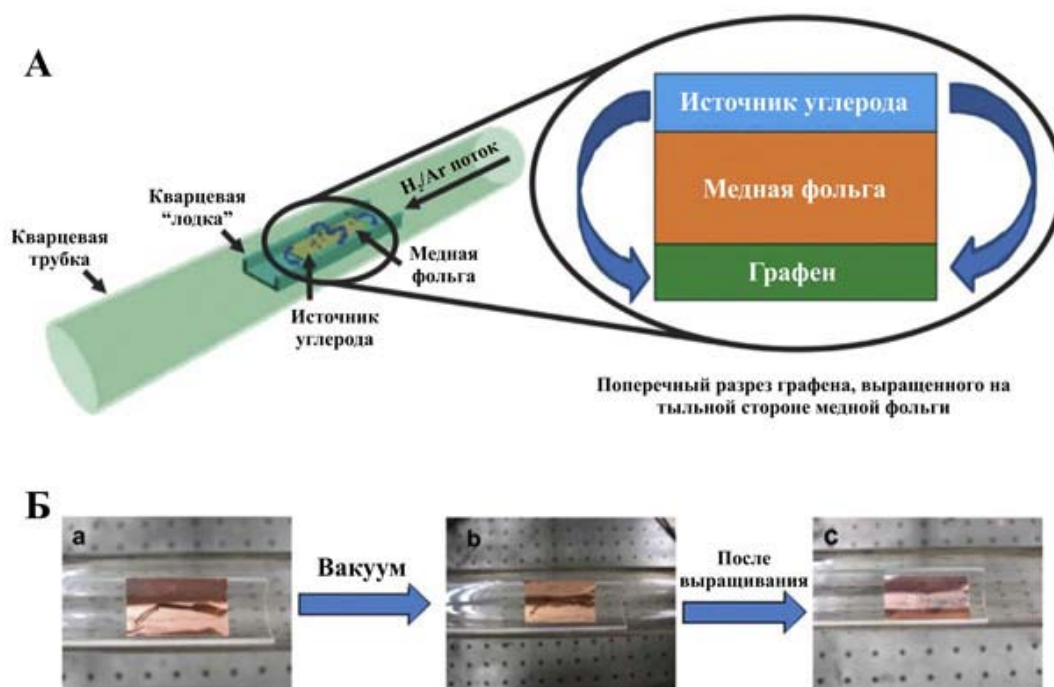
Рис. 3. Зонная структура (слева) и плотность электронных состояний (справа) борофена. Пунктиром показан уровень Ферми.

Л. Опенов

I. A.J.Mannix et al., Science 350, 1513 (2015).

Восставший из мусора

В последнее время все чаще на страницах научных журналов высказываются идеи так называемого “зеленого синтеза” углеродных наноматериалов. Другими словами, во главу угла ставится не только эффективный выход нужных соединений, но и обязательное использование энергосберегающих технологий наряду с дешевизной прекурсоров и безопасностью соответствующего производственного цикла для окружающей среды. Авторы работы [1] не побоялись “покопаться в мусоре” и представили довольно подробный обзор современных методик получения графена и углеродных нанотрубок из промышленных и бытовых отходов. Широта возможных реагентов впечатляет – всему находится применение. Оказывается, что для синтеза углеродных нанотрубок можно с успехом использовать полипропилен, полиэтилен, поливиниловый спирт, скипидар, кокосовый орех, различную древесину, отходы животного происхождения (допустим, куриный жир), глицерин, машинное масло и многое другое. Для графена список не менее богат. Здесь также присутствуют всевозможные пластмассы, жмых, органические удобрения, бумага, различная биоматерия. Удивительным выглядит, например, процесс получения монослоя графена высокого качества из пищевых отходов, насекомых и полистирола (см. рис.).



Превращение полистирола, пищевых отходов и насекомых в графеновый монослой в трубчатой печи.

Рассматривая различные методики “зеленого синтеза”, авторы не просто перебирают уже известные факты, но и предпринимают попытку охарактеризовать их роль в общей картине современных способов получения углеродных наноматериалов.

Кратко резюмируя их основные выводы, нельзя не заметить, что миф об очень малом выходе продуктов, получаемых методами “зеленого синтеза”, а также низком их качестве не соответствует действительности. Так, полезный выход в ряде методик

может достигать 80%, при этом качество получаемых наноматериалов оказывается не хуже, чем при использовании традиционных подходов. Что касается непосредственно наноглеродных объектов, то авторы отмечают, что “зеленый синтез” углеродных нанотрубок на современном этапе развития несколько превосходит таковой для графена. Однако предпосылки для улучшения общей эффективности последнего несомненно существуют. В конечном счете, различные типы пластика и биомасса являются наиболее популярными отходами для производства углеродных наноматериалов. При этом образцы, произведенные из пластика, получают более качественными. В заключение необходимо отметить, что разработанные в настоящее время способы “зеленого синтеза” необходимо расширять, модифицировать и масштабировать на другие углеродные (и не только) системы, снижая при этом возможную токсичность побочных продуктов таких химических реакций, следуя философии “зеленого синтеза”. Наверно эти и подобные им технологии окажутся единственно возможными для человечества, когда на Земле кроме мусора уже ничего не останется.

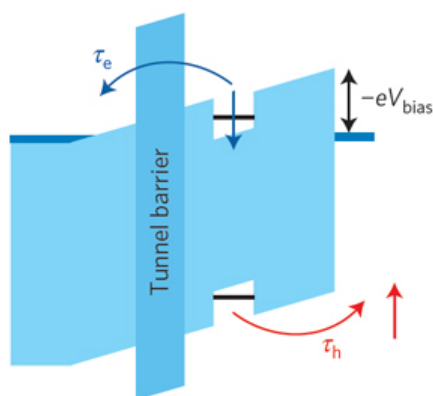
М. Маслов

1. J. Deng et al., Carbon 96, 105 (2016).

КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ

Три стадии декогерентизации электронных спиновых кубитов в квантовых точках

Контроль электронных спиновых кубитов в полупроводниковых квантовых точках требует знания механизмов их декогерентизации. Согласно феноменологическим моделям, в слабых магнитных полях различают две стадии декогерентизации: быструю дефазировку за время ≈ 2 нс из-за воздействия сверхтонких полей и медленную необратимую релаксацию за время > 1 мкс, связанную со сложными многочастичными эффектами.



Схематическое изображение зонной диаграммы квантовой точки InGaAs/AlGaAs с асимметричным туннельным барьером. Времена туннелирования электронов (τ_e) и дырок (τ_h) контролируются электрическим полем.

В работе [1] (Германия, США) показано, что существует еще и третья, “промежуточная” стадия, которая соответствует процессам когерентной прецессии в резервуаре ядерных спинов на временах ~ 750 нс и обусловлена квадрупольным взаимодействием этих спинов с градиентами электрического поля, возникающими из-за деформаций. Для экспериментов использовались квантовые точки InGaAs (см. рис.). Авторы считают увеличение времени декогерентизации спиновых кубитов принципиально возможным, что важно для приложений в квантовой информатике.

1. A. Bechtold et al., Nature Phys. 11, 1005 (2015).

Вейлевские полуметаллы второго типа

Вейлевские фермионы, которые не удалось найти в экспериментах с высокоэнергетическими элементарными частицами, недавно были обнаружены в твердотельных системах – топологических полуметаллах [1]. Поверхность Ферми у вейлевских полуметаллов является точечной (вейлевская точка, рис. 1а). В теоретической работе [2] предсказано существование вейлевских полуметаллов второго типа, у которых вейлевская точка возникает при контакте электронных и дырочных карманов поверхности Ферми (рис. 1б). К числу таких полуметаллов относятся, возможно, WTe₂ и MoTe₂.

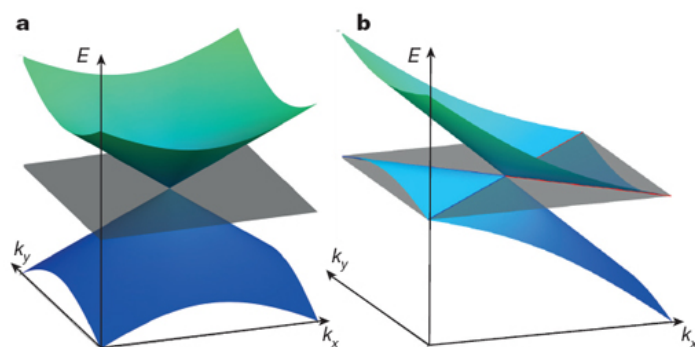


Рис. 1. Вейлевская точка первого (а) и второго (б) типа. Серая плоскость соответствует положению уровня Ферми. Синие (красные) линии – границы дырочных (электронных) карманов.

1. S.-Y. Xu et al., Science 349, 613 (2015).

2. A.A. Soluyanov et al., Nature 527, 495 (2015).

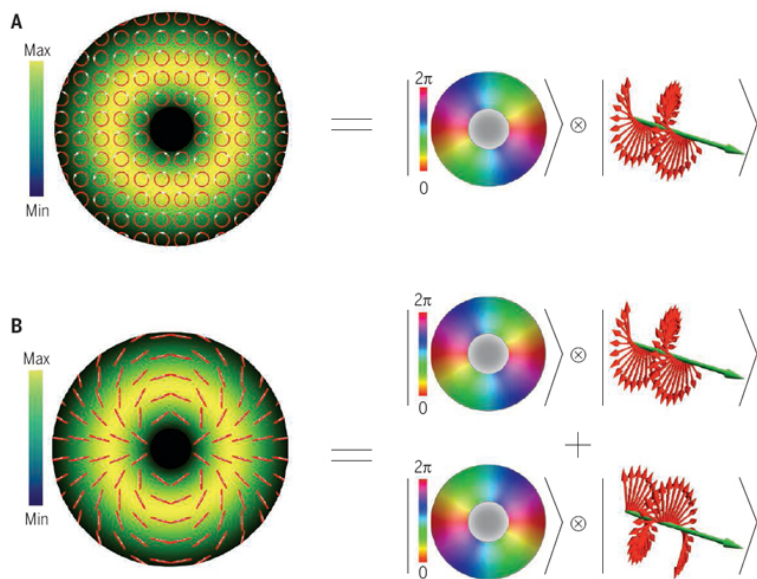
Классическая запутанность?

Создание квантовой теории на долгие годы озадачило ученых и философов очевидной неопределенностью характеристик физической системы до момента их измерения. Другими словами, квантовая механика в конечном итоге несовместима с так называемым “реализмом”, основанным на том, что присущие системе свойства не зависят от измерительных процедур.

Концепция запутанности (entanglement) была введена в научный обиход Шредингером в связи с парадоксом Эйнштейна-Подольского-Розена. Запутанность подразумевает наличие сильных нело-

кальных корреляций, которые могут существовать даже между удаленными друг от друга квантовыми системами. Многочисленные эксперименты показали, что природа ведет себя “по Шредингеру”. В частности, было установлено, что физические законы существенно нелокальны: измерения, проведенные в одной точке, могут повлиять на результаты измерения в другой точке.

С некоторых пор термин “запутанность” стал иногда использоваться в более широком смысле, включая “одночастичную запутанность” и “классическую запутанность”. Это вызвало нарекания со стороны ряда специалистов, поскольку приписывать другим значения термину, который широко используется в квантовой физике уже более 80 лет, – значит создать предпосылки для необычайной путаницы. Кроме того, в новом подходе к проблеме запутанности отсутствует ключевой ингредиент – нелокальность, которая в свое время сыграла первостепенную роль в зарождении концепции запутанности. Например, говоря об одночастичной запутанности, имеют в виду корреляции двух степеней свободы одной и той же частицы, то есть о нелокальности и речи нет. Более того, квантовую запутанность в принципе нельзя описать на классическом языке.



Сепарабельное и несепарабельное состояния классического светового поля: А - состояние циркулярно поляризованного светового пучка с изменяющимся по азимуту распределением фазы является сепарабельным: его можно представить в виде произведения поляризационного и фазового состояний; В - линейная суперпозиция состояния А и состояния с противоположной циркулярной поляризацией и противоположным распределением фазы – пример несепарабельного классического состояния.

Есть и еще один важный аспект. Квантовая запутанность тесно связана с так называемой “несепарабельностью” – невозможностью представить волновую функцию запутанного состояния двух частиц в виде произведения волновых функций каждой из этих частиц по отдельности. При этом, ес-

ли, например, $|\Psi\rangle = (|a\rangle_1|b\rangle_2 - |b\rangle_1|a\rangle_2)2^{-1/2}$, то до измерения каждая из частиц 1 и 2 с равной вероятностью находится в состоянии $|a\rangle$ или $|b\rangle$, но если уж при измерении частицу 1 найдут в состоянии $|a\rangle(|b\rangle)$, то можно не сомневаться, что частица 2 находится в состоянии $|b\rangle(|a\rangle)$. И это справедливо даже для далеко отстоящих друг от друга частиц (нелокальность запутанности). Хотя любое запутанное состояние несепарабельно, обратное неверно: несепарабельное состояние может и не быть запутанным. Пример классического несепарабельного (но НЕ запутанного) состояния приведен на рисунке. Для такого состояния нет смысла говорить о нелокальности.

*По материалам заметки
“Classical entanglement?”,
E.Karimi, R.W.Boyd, Science 350, 1172 (2015).*

ГРАФЕН

Графен борется с биокоррозией

Проблемы коррозии всем хорошо известны. Ежегодные прямые и косвенные потери от нее в промышленно развитых странах чрезвычайно велики. По оценкам в США в 2015 г. они превысят 1 триллион долларов [1]. Однако наверно не все знают, что около 50% ущерба связано с биокоррозией, вызванной микроорганизмами. Первая информация о роли микроорганизмов в коррозии появилась еще в конце XIX в., но общая теория до сих пор отсутствует. Считается, что в процессе жизнедеятельности бактерий и других микроорганизмов образуются кислоты, щелочи, пероксиды, H_2S и другие продукты обмена, которые повышают коррозионную активность среды. Биокоррозия разрушает нефтепромышленное оборудование, трубопроводы, подземные металлоконструкции, системы очистки воды, наносит заметный ущерб флоту, авиации, жилищно-коммунальному хозяйству, средствам связи. Такие методы борьбы с биокоррозией, как обработка среды бактерицидными препаратами или применение покрытий и красок, содержащих биоциды (вещества, убивающие живые организмы), не всегда возможны, т.к. опасны для человека и окружающей среды. Достаточно эффективно использование защитных полимерных или металлических покрытий. Заметный вклад может внести и внедрение достижений нанотехнологий. Например, для борьбы с биообрастанием (образованием пленки из множества микроорганизмов) в морской воде было предложено использовать наночастицы V_2O_5 , обладающие антибактериальной активностью, но не токсичные для морской флоры и фауны (см. ПерсТ [2]). Исследователи из США и Китая в своей недавней работе [3] продемонстрировали преимущества применения графена вместо распространенных полимерных антикоррозионных покрытий. В экспериментах использовали Ni (никелевую пену) с покрытиями из полипараксилилена (парилена)

(PA/Ni), полиуретана (PU/Ni) и графена (Gr/Ni). Средняя толщина PA-покрытий – 40-50 нм, PU-покрытий – 20-80 мкм, а графена – 1-2 нм. Пленки графена, состоящие из нескольких слоев, были выращены методом CVD (рис. 1d).

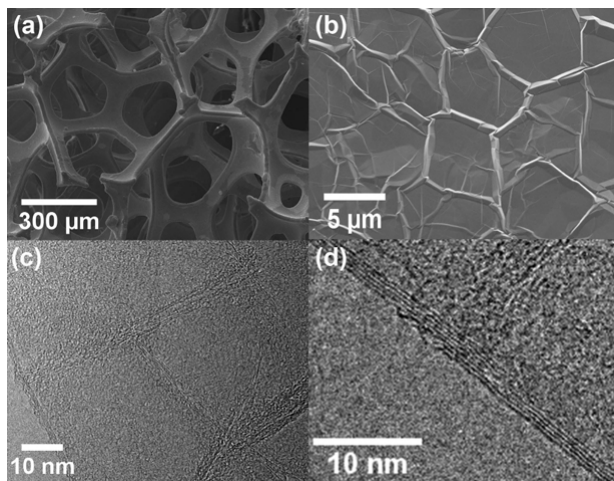


Рис. 1. SEM (a,b) и TEM (c,d) изображения покрытия из нескольких слоев графена на Ni пене.

Коррозионные испытания проводили в течение 30 дней в электрохимических ячейках в условиях, благоприятных для биомикробной коррозии. Образцы Ni с покрытиями служили анодом. Результаты исследований показали, что на всех образцах возникла биопленка, при этом на образцах PA/Ni и PU/Ni появились продукты коррозии зеленого цвета (вероятно, соединения двухвалентного никеля); графеновое покрытие не изменилось (рис. 2).

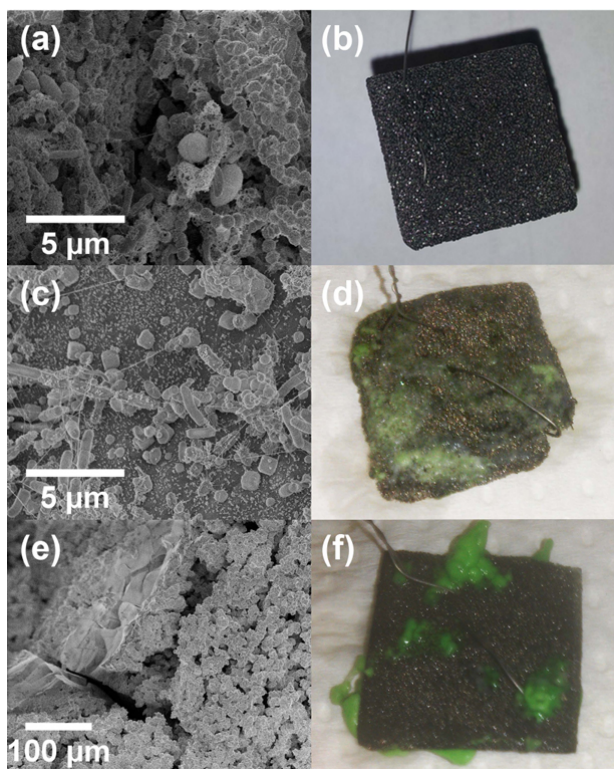


Рис. 2. SEM изображения биопленок на образцах Gr/Ni (a), PA/Ni (c), PU/Ni (e) и соответствующие фотографии образцов после 30 дней коррозионных испытаний.

Кроме того, на PA-покрытии видны микронные разрывы, а покрытие PU не является конформным и имеет плохую адгезию к Ni (рис. 3).

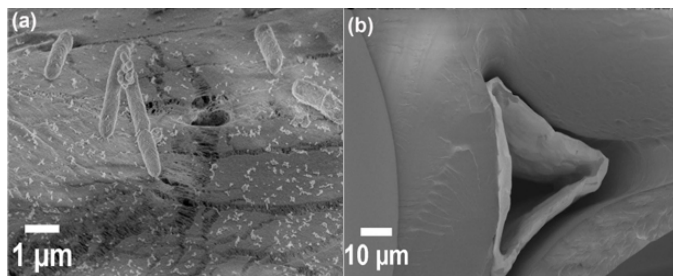


Рис. 3. а - Дефекты PA-покрытия; b - плохая адгезия и отсутствие конформности PU-покрытия.

Детальный электрохимический анализ, проведенный авторами [3], показал, что стойкость графенового покрытия к биокоррозии в 10 раз превышает стойкость полиуретанового покрытия и в 100 раз – стойкость покрытия из парилена (несмотря на то, что толщина графенового покрытия в 25 раз меньше толщины PA-покрытия и в 4000 раз меньше толщины PU-покрытия).

Изучение растворения никеля в электрохимических ячейках показало, что скорости коррозии Ni с покрытиями PA и PU заметно возрастали в циклах испытаний “1 неделя, 2 недели, 3 недели”. Так, в течение первой недели для PA/Ni и PU/Ni они были, соответственно, 2.22 и 0.915 мг/л/день, а через три недели – уже 6.708 и 5.229 мг/л/день! Для графена скорость коррозии была одной и той же (1.5-3 мг/л/день). Концентрация никеля, перешедшего в раствор из образцов с покрытиями PA и PU, также возрастала (рис. 4). Коррозионная стойкость графенового покрытия, наоборот, только улучшилась. Авторы объясняют результаты, во-первых, минимальным количеством дефектов у графенового покрытия; во-вторых, ограниченной диффузией продуктов коррозии Ni через несколько слоев графена; в-третьих, залечиванием возможных дефектов в результате адгезии полисахаридов и нерастворимой биомассы к гидрофобной поверхности графена.

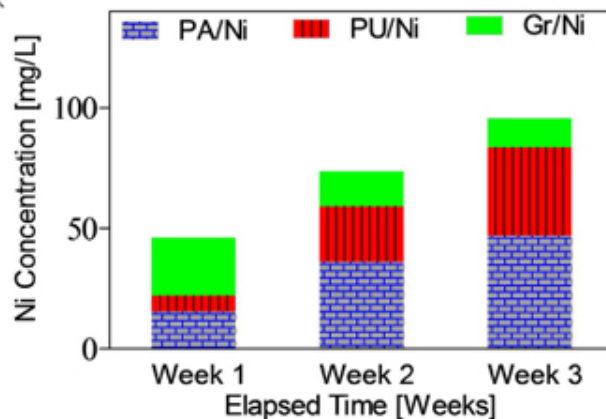


Рис. 4. Концентрация никеля, перешедшего в раствор, для трех коррозионных ячеек.

Исследователи сделали еще два важных для практического применения вывода. Во-первых, необходимо использовать покрытие из нескольких слоев графена, т.к. в однослойном могут быть сквозные дефекты. Во-вторых, графеновое покрытие должно быть получено непосредственно на защищаемой поверхности, т.к. при переносе пленок на подложку возникает большое количество дефектов.

О. Алексеева

1. <http://www.g2mtlabs.com/corrosion/cost-of-corrosion/> (2014).
2. ПерсТ 19, вып.18, с.1 (2012).
3. A.Krishnamurthy et al., *Sci. Reports* 5, 13858 (2015).

НАНОСТРУКТУРЫ, НАНОТЕХНОЛОГИИ

Скирмионы в сегнетоэлектрическом нанокompозите

Скирмионы (топологические солитоны) – частый сюжет новостей о физике магнитных материалов. Являясь аналогом гипотетической частицы – бариона, они представляют собой вихреобразную конфигурацию намагниченности (рис. 1а). Поскольку долгое время предполагалось, что необходимым условием их образования является специфическая разновидность обменного взаимодействия (антисимметричного обмена Дзялошинского-Мории), то считалось очевидным, что подобные хиральные структуры в сегнетоэлектриках зарождаться не могут. Статья американско-французской группы ученых [1] ломает эти стереотипы.

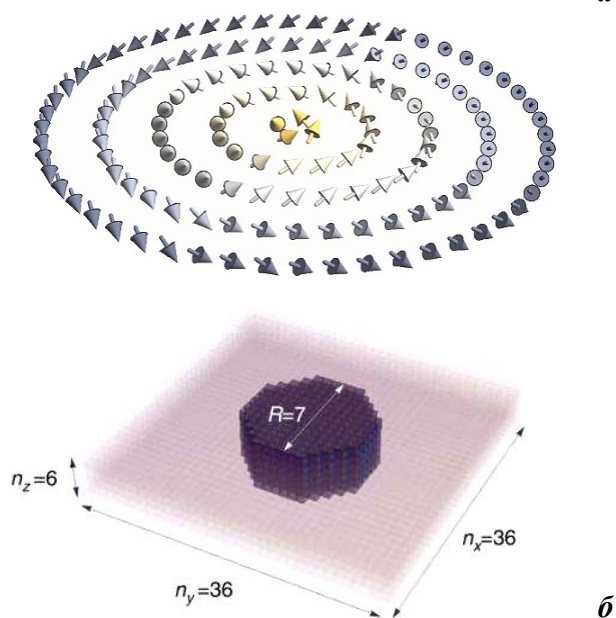


Рис. 1. Скирмионы в сегнетоэлектриках: а - скирмионная конфигурация электрической поляризации; б - модельная композиционная структура из двух сегнетоэлектриков ($\text{SrTiO}_3/\text{BaTiO}_3$), стабилизирующая скирмион. Диаметр нити из титаната бария порядка 3 нм.

Впрочем, стоит оговориться, что авторы [1] рассмотрели не однородный сегнетоэлектрик, а композитную структуру: нанопроволоку из титаната ба-

рия толщиной в 3 нм в матрице из титаната стронция. Пара сегнетоэлектрических материалов выбрана так, чтобы критические поля переключения поляризации были разными: смена направления поляризации в матрице происходила при меньшей величине поля, чем в нити. В результате в некотором диапазоне поля возникает противонаправленная конфигурация поляризаций нити и ее окружения с плавным переходом между ними. Характерные поля, при которых это происходит – десятки-сотни киловольт на сантиметр.

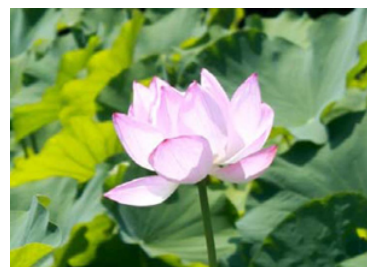
Хотя полной аналогии с магнитными скирмионами достичь не удастся (так распределение топологического заряда в сегнетоэлектрических скирмионах не аксиально симметрично), тем не менее, это первый шаг к созданию стабильных сегнетоэлектрических скирмионных структур с размерами порядка нескольких нанометров.

А. Пятаков

1. Y.Nahas et al., *Nature Commun.*, 6, 8542 (2015).

Лист лотоса – основа метаматериалов

Лист лотоса, “священного растения”, с древних времен удивлял и восхищал людей своей способностью к самоочищению. Электронная микроскопия помогла ученым выяснить, что важную роль



а в супергидрофобности играет уникальная иерархическая наноструктура поверхности листа. Первые результаты получили в конце прошлого века немецкие ботаники W. Barthlott и C. Neinhuis [1]. В последние годы было опубликовано много результатов исследований, посвященных синтезу самоочищающихся и супергидрофобных поверхностей, в той или иной степени воспроизводящих такую структуру (см., например, ПерсТ [2] и обзор японских ученых [3]). Но недавно выяснилось, что лист лотоса способен вдохновить на создание совсем других материалов! Авторы [4], также ученые из Японии, использовали его как основу для синтеза “черных” пленок золота, поглощающих свет во всем видимом диапазоне.

Исследователи вырастили лотос из семян в воде с очень небольшим количеством удобрения. Появившиеся листочки через несколько недель перенесли на предметное стекло и нанесли на них пленки золота. Три образца (I, II, III) были получены с помощью ионного (магнетронного) распыления и один образец (IV) – путем резистивного термического испарения в вакууме. Толщины пленок: 10 нм (I), 20 нм (II), 30 нм (III) и 30 нм (IV). Для контроля 30 нм пленки золота методом ионного распыления нанесли на листья докудами (*хауттуйниш*), а также японского перечного дерева и индийской полыни.

Фотографии образцов с покрытиями, а также листья лотоса и докудами приведены на рис. 1. Видно, что после нанесения пленок золота методом ионного распыления поверхность листьев лотоса приобрела черный цвет даже при толщине пленки 10 нм (образцы I–III). Лист докудами с 30 нм покрытием, нанесенным методом ионного распыления (образец VI), стал золотистым. Такими же стали листья пе-

речного дерева и индийской полыни (на рис. 1 не показаны). Образец IV, полученный методом резистивного термического испарения в вакууме, также приобрел золотистый цвет. С помощью электронной микроскопии авторы [4] изучили морфологию поверхности листьев после нанесения пленок и объяснили изменение цвета.

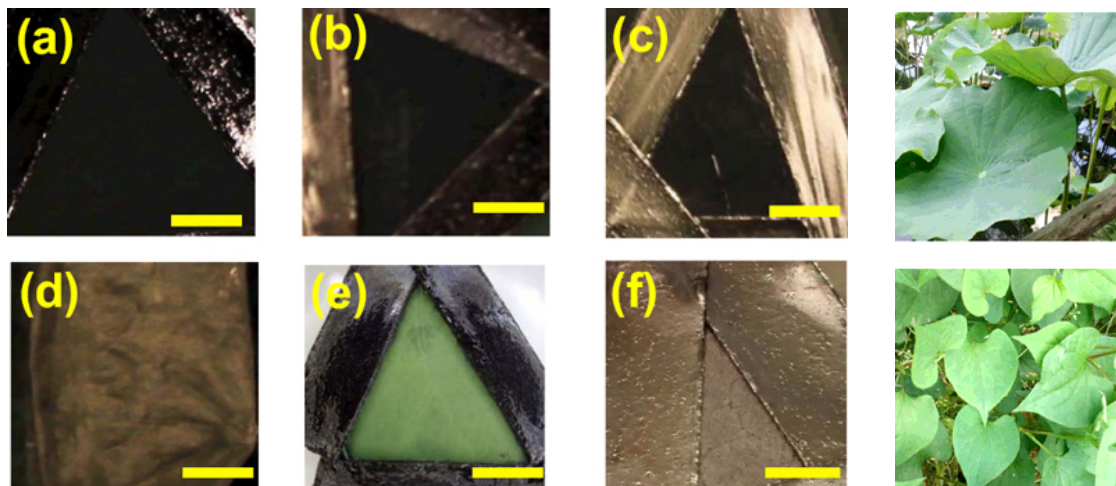


Рис. 1. (a)-(f) – Фотографии образцов. Листья лотоса с золотым покрытием разной толщины, полученным путем распыления: (a) 10 нм, (b) 20 нм, (c) 30 нм (образцы I-III); (d) лист лотоса с 30 нм пленкой золота, нанесенной методом термического испарения (образец IV); (e) лист лотоса без покрытия (образец V); (f) – лист докудами с 30 нм золотым покрытием, полученным путем распыления (образец VI). Шкала 5 мм. На фотографиях видны полиимидные и углеродные пленки, с помощью которых фиксировали образцы.

Справа приведены фотографии листьев лотоса (вверху) и докудами (внизу.)

Как известно, поверхность листа лотоса покрыта микробугорками с огромным количеством нановолосок, ориентированных случайным образом (рис. 2). Эти нановолоски, полые внутри (“наномакарроны”, как их назвали в работе [4]), имеют внешний диаметр около 100 нм и внутренний ~ 50 нм.

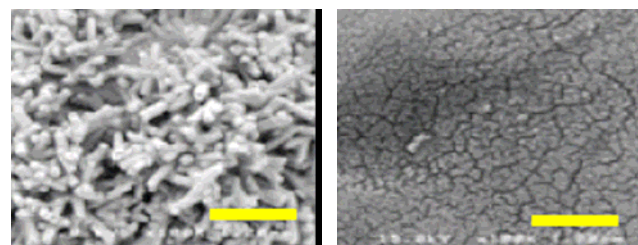


Рис. 3. SEM изображения поверхности образцов III (слева), IV (справа) и VI (внизу). Шкала 1 мкм.

После нанесения пленок методом распыления морфология поверхности листа лотоса (микробугорки с нановолосками) у образцов I-III сохранилась, а поверхность листа после нанесения пленки методом резистивного термического испарения (образец IV) сгладилась. Поверхность образца VI (основа – лист докудами) также не имеет нужной наноструктуры. На рис. 3 приведены SEM изображения поверхности образцов III, IV и VI (все с 30 нм покрытиями).

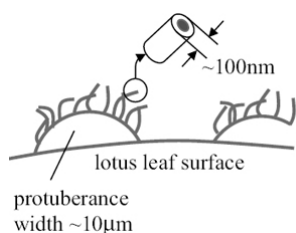
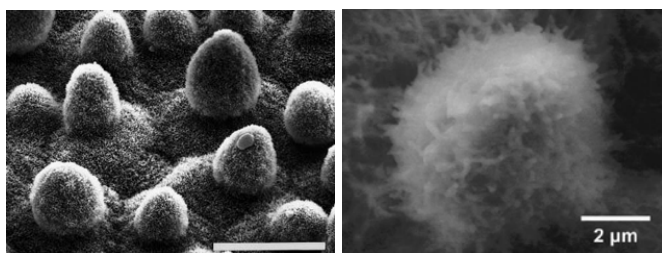


Рис. 2. Слева – одно из первых SEM изображений поверхности листа лотоса [1], шкала 20 мкм. Справа – SEM изображение отдельного микробугорка [5]. Внизу – схематическое изображение структуры поверхности листа лотоса [4].

Коэффициент отражения “черных” образцов I-III очень мал (меньше 0,01) во всем диапазоне видимого света (рис. 4). Отражательная способность практически не зависит от толщины пленки и остается низкой даже при длинах волн 700-800 нм, несмотря на сильное отражение (для золота и листа лотоса) в этом диапазоне. Коэффициент отражения “золотого” образца IV составляет несколько процентов. Для листа лотоса без покрытия (образец V) имеется пик при 550 нм, что естественно, т.к. эта длина волны соответствует зеленому цвету. Листья также хорошо отражают ИК излучение (с длиной волны больше 700 нм).

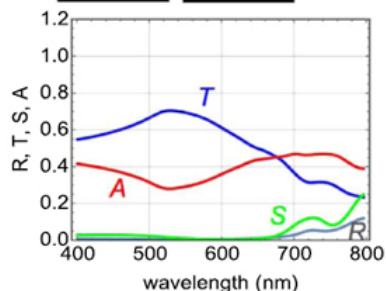
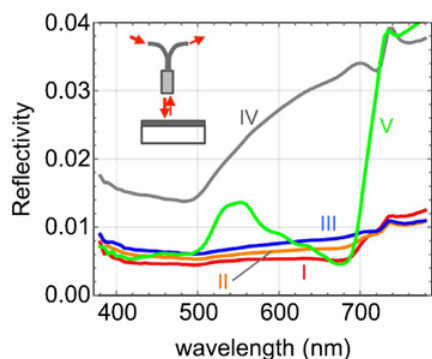


Рис. 4. Вверху: спектры отражения образцов I-V, измеренные при нормальном падении света. Внизу: результаты расчета коэффициентов отражения (R), поглощения (A), пропускания (T) и рассеяния (S) для структуры наностержней, показанной вверху (общий вид – желтый цвет, вид сверху – зеленый цвет).

Результаты моделирования с помощью метода конечных разностей во временной области (FDTD) [4], подтвердили, что для создания “черных” метаматериалов очень важна наблюдаемая экспериментально наноструктура из элементов, ориентированных случайным образом. Расчеты были проведены для наностержней диаметром 100 нм и длиной 380 нм, покрытых 10 нм пленкой золота и расположенных в двумерной квадратной решетке. Расстояние между элементами структуры 100 нм. Коэффициент отражения для длин волн до 700 нм по расчетам меньше 0,02 (рис. 4), что довольно хорошо соответствует экспериментальным данным.

Авторы [4] считают, что для создания “черных” метаматериалов подойдут и другие металлы, например, серебро.

Единственное препятствие – трудно отделить черный метаматериал от основы механическим путем. Однако авторы полагают, что смогут решить эту проблему, используя химическую обработку едким натром.

О.Алексеева

1. W.Barthlott, C.Neinhuis, *Planta* **202**, 1 (1997).
2. *ПерсТ* **18**, вып. 15/16, с.5 (2011).
3. S.S.Latthe et al., *Molecules* **19**, 4256 (2014).
4. Y.Ebihara et al., *Sci. Rep.* **5**, 15992 (2015).
5. Y.Zheng et al., *Appl. Phys. Lett.* **92**, 084106 (2008).

ФУЛЛЕРЕНА И НАНОТРУБКИ

Устойчивость углеродного гиперкуба

Совсем недавно в научной периодике появилось описание так называемого углеводородного молекулярного аналога четырехмерного гиперкуба, названного впоследствии гиперкубаном (мы, разумеется, также не обошли вниманием это событие [1]).

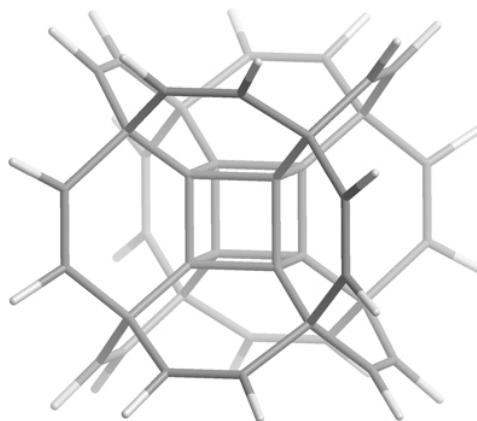


Рис. 1. Молекула углеводородного гиперкубана $C_{40}H_{24}$

Молекула действительно уникальна по своей структуре (см. рис. 1) и, к тому же, согласно предсказательным расчетам в рамках теории функционала плотности, является термодинамически устойчивой. Тем не менее, очевидно, что на современном этапе задача его синтеза чрезвычайно сложна, и скептицизм относительно непосредственного получения изолированных гиперкубанов небезоснователен. Более того, гиперкубан может оказаться нестабильным даже при криогенных температурах, не говоря уже о комнатных, что сделает затруднительным (или вообще невозможным) его получение, не говоря уже о практическом использовании. Безусловно, мы сможем подержать гиперкубан в руках еще очень нескоро, однако российскому коллективу исследователей уже сейчас удалось продемонстрировать его высокую термическую устойчивость, сравнимую с таковой для классического “трехмерного” кубана C_8H_8 [2]. С помощью прямого молекулярно-динамического моделирования с потенциалом сильной связи авторы показали, что кинетиче-

ПерсТ, 2015, том 22, выпуск 23/24

ская устойчивость гиперкубана ничуть не уступает его “низкоразмерному родственнику”. Так, согласно проведенным расчетам, его энергия активации составляет 1.8 эВ, что согласуется с соответствующей экспериментальной величиной для кубана 1.9 эВ. Основываясь на полученных данных, авторы оценивают время жизни гиперкубана при комнатной температуре $\sim 10^{14}$ с. Дополнительные исследования в рамках теории функционала плотности эти оценки подтверждают. Столь значительное время жизни дает обнадеживающий прогноз относительно получения гиперкубана как минимум без использования экстремальных температурных режимов. Кроме того, стоит отметить, что авторам удалось однозначно идентифицировать канал распада углеродного гиперкуба. Так, в отличие от C_8H_8 он здесь всего один, а среди продуктов реакции разложения присутствуют молекулы ацетилена и так называемый углеводородный “пропеллер” $C_{34}H_{18}$ (см. рис. 2), который при ближайшем рассмотрении состоит из трех соединенных фрагментов графена, пассивированных атомами водорода.

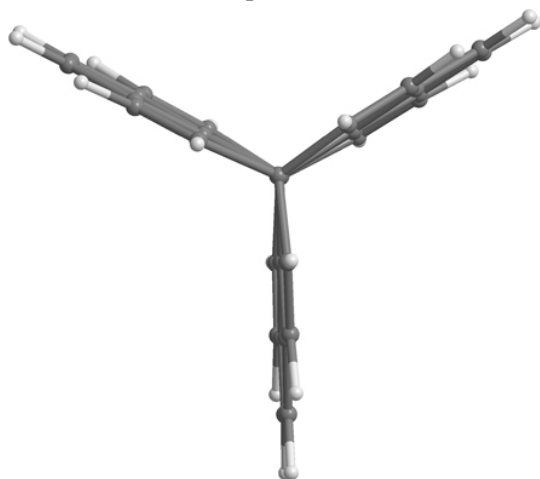


Рис. 2. Один из основных продуктов распада гиперкубана: “пропеллер” $C_{34}H_{18}$

Поэтому одним из возможных путей синтеза гиперкубана вполне может стать использование в качестве прекурсоров системы графен плюс ацетилен при ультравысоких давлениях в присутствии определенных катализаторов. К слову, авторы разместили компьютерную анимацию на страничке журнала с публикацией [2] в качестве дополнительных материалов, что позволяет всем заинтересованным читателям наблюдать за процессом распада собственными глазами.

1. [ПерсТ 21, вып. 22, с. 5 \(2014\).](#)
2. М.М.Маслов, К.Р.Катин, *Chem. Phys. Lett.*, published online 17.12.2015, <http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2015.12.022>

КОНФЕРЕНЦИИ

50-ая Школа по физике конденсированного состояния (ФКС-2016), 14 -19 марта 2016 г., Санкт-Петербург (Зеленогорск)

Важные даты

01.12.2015 - начало регистрации участников

05.02.2016 - окончание регистрации

05.02.2016 - окончание подачи тезисов

Подробная информация и регистрация доступны на сайте.

E-mail: fks@lns.pnpi.spb.ru

Web site: <http://fks2016.pnpi.spb.ru/>

5th International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences (IC-MSQUARE 2016), May 23-26, 2016, Athens, Greece

IC-MSQUARE 2016 aims to promote the knowledge and the development of high-quality research in mathematical fields that have to do with the applications of other scientific fields and the modern technological trends that appear in them, these fields being those of Physics, Chemistry, Biology, Medicine, Economics, Sociology, Environmental sciences etc.

Topics

Some of the main topics of the IC-MSQUARE are:

- mathematical modeling in fundamental physics
- computational chemistry, biology, and biophysics
- evolutionary computation
- new generation computing tools

Important dates

January 31, 2016 - Abstract submission deadline

February 15, 2016 - Notification of acceptance

February 19, 2016 - Early registration deadline

Web: <http://www.icmsquare.net>

*Поздравляем Вас и ваших близких
с наступающим Новым годом и Рождеством!*

*Мы ждем чудес, мы верим в сказку,
Мы дружим, любим, мы творим...
И в этот добрый зимний праздник,
Когда горят вокруг огни,
Когда нарядно светит елка,
Гремят салюты каждый час,
Пусть счастье к нам зайдет надолго,
Пусть радость не оставит нас.
Пусть все сбудутся желанья,
Уйдет бесследно грусть-тоска.
Любви, тепла, очарованья,
Чудес волшебных на века!
Здоровья, благополучия, творческих успехов и
оптимизма!*

Редакция и авторы ПерсТа



Экспресс-бюллетень ПерсТ издается совместной информационной группой
ИФТТ РАН и НИЦ «Курчатовский институт»

Главный редактор: И.Чугуева, e-mail: irina@issp.ras.ru

Научные редакторы К.Кугель, Ю.Метлин

В подготовке выпуска принимали участие: О. Алексеева, М. Маслов, Л. Опенов, А.Пятаков

Выпускающий редактор: И.Фурлетова

Адрес редакции: 119296 Москва, Ленинский проспект, 64^а