

ISSN: 2782-5515



Перст

Информационный бюллетень
перспективные технологии
наноструктуры сверхпроводники фуллерены

Том 32, выпуск 12

декабрь 2025 г.



Светодиодная лента

Черноголовка

Том 32, выпуск 12

декабрь 2025 г.

В этом выпуске:

НАНОМАТЕРИАЛЫ***Нанокапсулы полидатын-хитозан в медицине***

Хитин и хитозан привлекают большое внимание исследователей в области медицины. Хитин, природный полисахарид, содержится в панцирях крабов и креветок, в кутикулах насекомых, в клеточных стенках грибов. Уникальными антибактериальными и антиоксидантными свойствами обладает хитозан, получаемый из хитина. Биосовместимые, биоразлагаемые нанокомпозиты на основе хитина и хитозана используют для регенеративной медицины, тканевой инженерии. ПерсТ недавно рассказывал о получении эффективных биоадгезивов из волокон хитозана [1]. Очень важным для медицины является микрокапсулирование лекарственных препаратов. Например, нано- и микрочастицы хитозана были успешно использованы для микрокапсулирования карведилола, препарата для лечения сердечно-сосудистых заболеваний [2]. Недавно ученые из Италии предложили способ создания нанокапсул полидатын-хитозан и продемонстрировали повышение эффективности системы доставки лекарства и, соответственно, терапевтического эффекта полидатына в онкологии [3].

Полидатын получают из корней и корневищ растения *Polygonum cuspidatum* (горец японский, или горец остролистный). Это натуральное вещество давно используют в традиционной медицине Китая, Японии и Южной Кореи, поскольку оно обладает противовоспалительными, антибактериальными, антиоксидантными свойствами. В последнее время большой интерес к полидатыну проявили биомедики. Исследования показали, что он может быть полезен при лечении сердечно-сосудистых, нейродегенеративных заболеваний, диабета и даже раковых опухолей. Однако клиническое применение затруднено из-за низкой биодоступности, химической нестабильности, плохой растворимости. Для преодоления этих препятствий необходимо улучшить системы доставки. Авторы работы [3] изготовили капсулы из хитозана. Такие биосовместимые, биоразлагаемые носители не только повышают точность доставки к цели и длительность выделения лекарства, но также защищают препарат от деградации, увеличивают растворимость.

Нанокапсулы из хитозана (пустые CS-NPs и заполненные полидатыном PD-CS-NPs) получали методом ионотропного желирования. Это простой метод, не требующий применения органических растворителей, что важно для безопасности и масштабирования. Исследователи изучили морфологию

И далее ...

**ФУЛЛЕРЕНЫ
И НАНОТРУБКИ**

- 4 Блуждание C_{60} на фуллереновых монослоях

ГРАФЕН

- 5 Проблема согласования расчетных ячеек: чья деформация важнее

ДЛЯ ПРАЗДНОГО УМА

- 6 Научные новости года по версии серии журналов Physical Review

КОНФЕРЕНЦИИ

- 8 International Conference on “Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications” (PHENMA 2026), July 15-18, 2026, Busan, Korea

нанокапсул, эффективность заполнения и биологические эффекты при воздействии на раковые клетки. Размер нанокапсул около 100 нм (рис. 1).

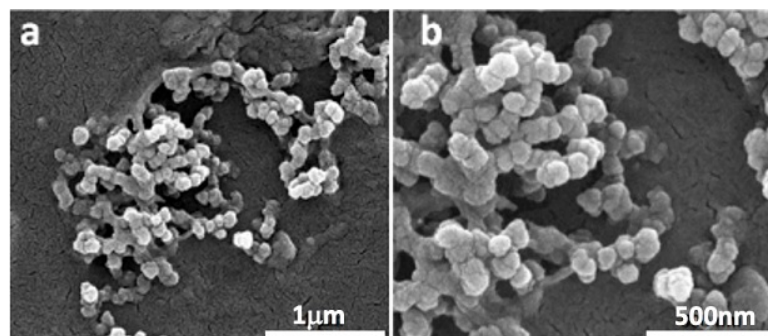


Рис. 1. SEM изображения нанокапсул, заполненных полидатином

Для оценки противоопухолевого эффекта авторы [3] использовали клетки рака молочной железы человека SKBR3. Изучили воздействие нанокапсул в концентрации 200 и 400 мг/мл в течение 72 часов. Нанокапсулы с полидатином заметно снизили пролиферацию (размножение) клеток и вызвали гибель раковых клеток.

Микрофотографии, полученные с помощью флуоресцентной микроскопии, представлены на рис. 2.

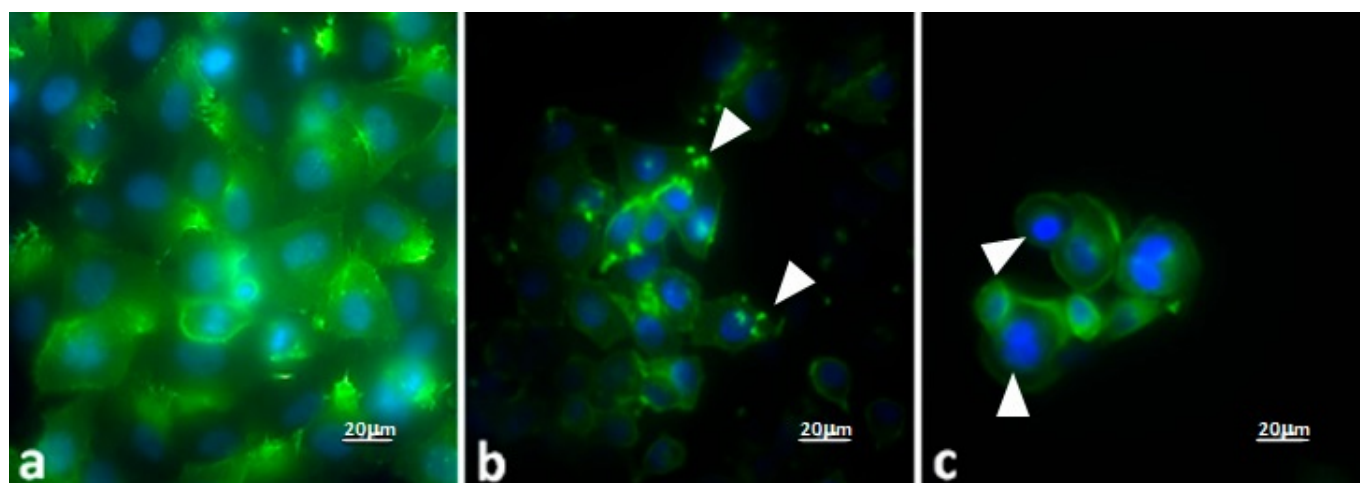


Рис. 2. Микрофотографии, полученные с помощью флуоресцентной оптической микроскопии: **а** – контрольный образец клеток SKBR3, без нанокапсул; **б** – клетки SKBR3 после воздействия PD-CS-NPs в концентрации 200 мг/мл, **с** – клетки SKBR3 после воздействия PD-CS-NPs в концентрации 400 мг/мл. Актин окрашен зеленым, ядра имеют синий цвет.

Видно, что контрольные клетки сохранили типичную полигональную морфологию без заметных изменений цитоскелета, состоящего из филаментов белка актина (рис. 2а). Множество клеток прилипло к покровному стеклу. После воздействия на клетки нанокапсул с полидатином в концентрации 200 мг/мл произошла значительная деполимеризация актина, основы цитоскелета. Меньше клеток присоединено к покровному стеклу, но у них много контактных точек, показанных белыми стрелками (рис. 2б). После воздействия на клетки нанокапсул с полидатином в концентрации 400 мг/мл видны морфологические изменения. Практически все клетки отсоединены от подложки. Произошла конденсация хроматина (*хроматин – сложный комплекс в ядрах клеток, основа хромосом*),

приводящая к гибели клеток (белые стрелки на рис. 2с).

Результаты итальянских исследователей [3] продемонстрировали, что наполненные полидатином нанокапсулы из хитозана способны снизить пролиферацию раковых клеток SKBR3. Новая система доставки в сочетании с эффективным природным препаратом расширяет возможности лечения онкологических заболеваний. Конечно, до клинического применения необходимы дальнейшие исследования, в том числе *in vivo*.

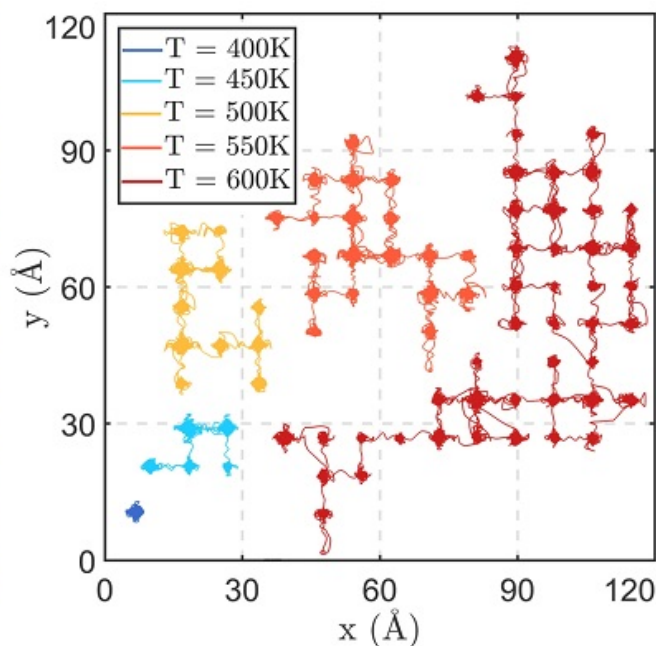
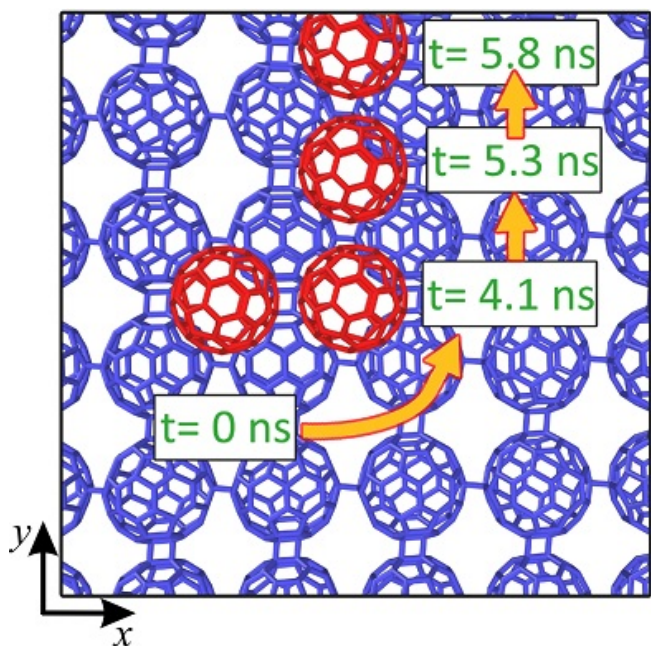
О. Алексеева

1. [ПерсТ 32, вып. 9 с.1 \(2025\).](#)
2. [ПерсТ 22, вып. 8, с. 2 \(2015\).](#)
3. D.Nichil et al., *Molecules* **30**, 4400 (2025).

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

Блуждание C_{60} на фуллереновых монослоях

Недавно синтезированные монослои квазитетрагональной фазы фуллерена (qTPC60) открывают новые возможности для изучения молекулярного транспорта на наноструктурированных поверхностях. Исследователь из Sharif Univ. of Technology (Иран) [1] выполнил детальный анализ случайного блуждания молекулы C_{60} на подложке qTPC60 при помощи молекулярно-динамического моделирования (см. рис. 1).



Структура монослоя квазитетрагональной фуллереновой фазы qTPC60, а также расположение молекулы C_{60} на этом слое в различные моменты времени (слева). Траектории двумерного дискретного случайного блуждания C_{60} на подложке qTPC60 при температурах 400, 450, 500, 550 и 600 К (справа).

Автор выполнял все расчеты в программном пакете LAMMPS, используя потенциал Терзоффа для описания внутримолекулярных взаимодействий в C_{60} и потенциал Леннарда-Джонса для описания взаимодействия C_{60} с подложкой. Молекулярно-динамическое моделирование проводили в ансамбле NVT с использованием термостата Нозе-Гувера. В отличие от графена или гексагонального нитрида бора, где фуллерен “скользит” по поверхности, демонстрируя непрерывную диффузию, структурированный потенциальный ландшафт qTPC60 создает периодические адсорбционные центры – тетраэдрические междоузлия, образованные четырьмя соседними молекулами фуллерена. Анализ поверхности потенциальной энергии показал, что минимум достигается именно в этих тетраэдрических полостях, а для перехода между соседними такими центрами

молекула должна преодолеть энергетический барьер в 0.40 эВ при движении вдоль оси x или y , либо 0.53 эВ при диагональном перемещении (см. рис.). Согласно теории переходного состояния, разница свободных энергий между соседними адсорбционными центрами оказывается незначительной, что свидетельствует о практически равной вероятности переходов во всех направлениях и подтверждает симметричность и обратимость элементарных шагов случайного блуждания. Константа скорости переходов оценена автором в 0.23 нс^{-1} , что соответствует среднему времени пребывания молекулы в адсорбционном центре около 4.35 нс. Молекулярно-динамическое моделирование при температурах от 450 до 600 К показало, что C_{60} совершает термически активированные прыжки между центрами адсорбции с характерной длиной шага 8.4 Å , что как раз соответствует

периоду решетки qTPC60. Однако при температуре выше 550 К термическая энергия становится достаточной для десорбции C_{60} с поверхности. Анализ траекторий движения фуллерена свидетельствует о дискретном случайном блуждании молекулы по поверхности qTPC60 (см. рис.). Молекула диффундирует вдоль поверхности без выраженного направления. Для количественной характеристики диффузионного процесса были рассчитаны среднеквадратичные смещения C_{60} при различных температурах. Линейная зависимость среднеквадратичного смещения от времени указывает на режим нормальной диффузии. Данный вывод согласуется и с результатами статистического анализа. Распределение положений молекулы соответствует гауссову закону, что также является характерным признаком нормальной диффузии. В конечном итоге совокупность полученных данных однозначно подтверждает механизм дискретного случайного блуждания молекулы C_{60} по поверхности qTPC60. По мнению автора, система $C_{60}/qTPC60$ представляет собой перспективную модельную платформу для исследования механизмов дискретного молекулярного транспорта с потенциальным применением в разработке устройств прецизионного позиционирования молекул и программируемых наноструктурированных систем.

М. Маслов

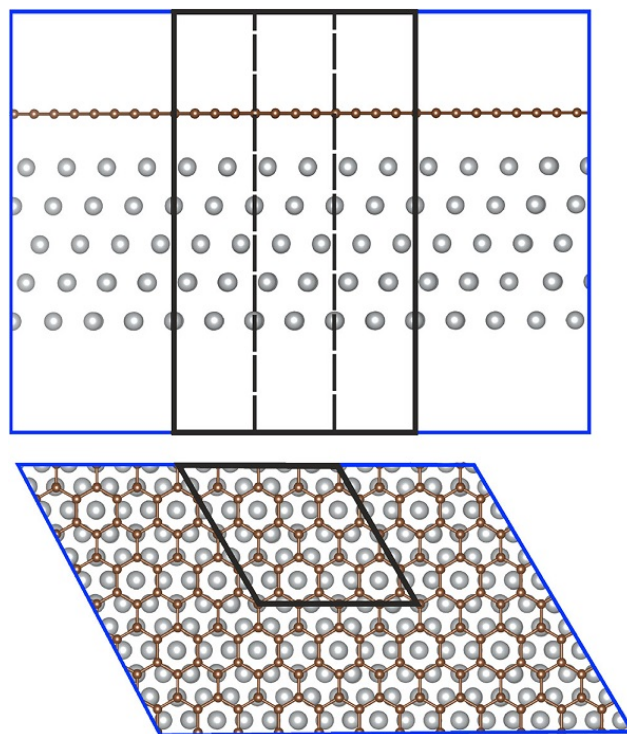
I. M.Vaezi, Micro Nanostructures 209, 208401 (2026).

ГРАФЕН

Проблема согласования расчетных ячеек: чья деформация важнее

Атомистическое моделирование гетерогенных систем на основе двумерных материалов сталкивается с фундаментальной проблемой выбора способа построения расчетной ячейки. Суть вопроса состоит в следующем: при построении расчетных ячеек для систем “2D-материал на подложке” неизбежно возникает рассогласование параметров решеток, которое приходится компенсировать деформацией. Так какой же именно структурный компонент следует подвергать деформации для согласования параметров решетки? В качестве модельной системы исследователи из России и Южной Африки [1] выбрали графен на подложке Ag(111) (см. рис.) и проанализировали три различных подхода к построению расчетной ячейки: деформация только графена Gr^* , деформация только под-

ложки Ag^* и взаимная деформация обоих компонентов $(Gr-Ag)^*$. Расчетная ячейка содержала 32 атома углерода и 60 атомов серебра в пятислойной подложке.



Атомная структура графена на подложке Ag(111). Атомы углерода показаны коричневым цветом, а атомы серебра – серым. Элементарная ячейка обведена черным контуром, а сверхъячейка 3×2 выделена синим цветом.

Пятислойная модель подложки Ag(111) с фиксированными двумя нижними слоями обеспечивала реалистичное описание поверхности металла. Такая конфигурация корректно отражает физическое ограничение массивной подложки, заключающееся в невозможности ее значительной деформации под влиянием одного лишь взаимодействия с адсорбированным монослоем. Все расчеты авторы выполняли в программном пакете VASP с использованием функционала PBE, а для корректного описания межслоевого взаимодействия учитывали дисперсионную поправку Гримме DFT-D3. Результаты оказались весьма показательными. Энергия связи между графеном и подложкой практически не зависит от способа построения ячейки моделирования. Различия составили менее 1%, что находится в пределах вычислительной погрешности. Однако энергия адсорбции атома бора на поверхности графена продемонстрировала более существенную зависимость от типа расчетной ячейки. В ряду $Gr^* \rightarrow (Gr-Ag)^* \rightarrow Ag^*$ энергия адсорбции систематически уменьшается, при этом разница

между крайними значениями составляет 11%. Авторы также установили, что мостиковая позиция, когда атом бора расположен над центром межуглеродной связи, является энергетически наиболее выгодной для адсорбции независимо от конфигурации ячейки, а присутствие серебряной подложки снижает прочность связи бора с графеном для всех конфигураций в среднем на 0.12 эВ по сравнению со свободным графеном. Еще более драматичные различия наблюдали при расчете коэффициентов диффузии бора по поверхности графена. Для определения барьеров миграции и частотных факторов авторы применили метод упругой ленты с восходящим образом (CI-NEB) с четырьмя промежуточными изображениями. Оказывается, коэффициенты диффузии вдоль кресельного направления при температуре 300 К различаются почти на порядок величины в зависимости от ячейки моделирования: от $5.89 \cdot 10^{-8}$ м²/с для ячейки Gr* до $7.60 \cdot 10^{-9}$ м²/с для ячейки Ag*. Авторы отмечают, что такая экстремальная чувствительность обусловлена доминирующим влиянием предэкспоненциального множителя в уравнении Аррениуса, который сильно зависит от деформации решетки. При этом барьеры миграции определяются преимущественно взаимодействием с подложкой, тогда как частотные факторы обусловлены главным образом механической деформацией. Что касается направления зигзаг, то здесь согласованность результатов между различными ячейками оказалась значительно лучше, с максимальным разбросом всего в 1.3 раза. В конечном итоге исследователи полагают, что для надежного предсказания свойств двумерных материалов на подложках необходимо систематически использовать несколько типов расчетных ячеек с различным распределением деформации между компонентами. По сравнению с традиционным подходом выбора одной конфигурации, такая стратегия позволит идентифицировать и устранить артефакты, связанные с методом моделирования. Полученные результаты имеют непосредственное значение для проектирования сенсоров, каталитических интерфейсов и нанoeлектронных устройств на основе графена, где точное знание диффузионных характеристик допантов критически важно для оптимизации технологических процессов.

M. Маслов

I. A. Kochaev et al., J. Phys. Chem. C **129**, 22202 (2025).

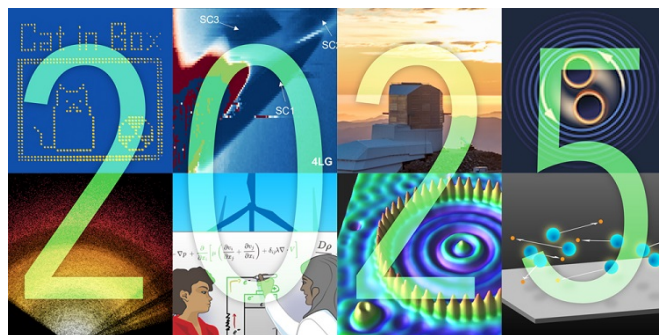
ДЛЯ ПРАЗДНОГО УМА

Научные новости года по версии серии журналов *Physical Review*

Электронный журнал Physics, реферирующий статьи серии Physical Review, во второй половине декабря составляет подборку научных новостей года, и 2025 не стал исключением [1].

Как отмечает редакция, минувший год прошел под знаком объявленного ООН Международного года квантовой науки и технологий, столетие которой почему-то было условлено отметить не от доклада Макса Планка 14 декабря 1900 года, а со статьи Вернера Гейзенберга, которую для краткости принято называть “Umdeutung” (переосмысление, истолкование), а полное название на русский переводится как “О квантотеоретическом истолковании кинематических и механических соотношений”.

Зримым воплощением юбилея стал мультфильм про кота Шредингера, необычность которого состоит в том, что отрисован он коллективом из полутысячи атомов, находящихся в оптических ловушках [2]: ему выделена левая верхняя клетка коллажа на рис. 1, а само видео можно посмотреть по этой [ссылке](#). Атомы перемещались в области размером в четверть миллиметра, все видео в реальном времени длится не более секунды, поэтому для восприятия оно замедлено в 30 раз. Для отрисовки кадров, сменяющих друг друга через каждые 60 мс, воспользовались помощью искусственного интеллекта (куда же нынче без него!), программировавшего пространственный модулятор света, который и создавал оптические ловушки для атомов.



Коллаж из “научных хитов” года [1]

Возможно, больший интерес у читателей ПерсТ вызовет сюжет из следующей клетки, в которой приведена фазовая диаграмма для новых сверхпроводящих состояний, обнаруженных в многослойном ромбоэдрическом графене [3] – для лучшей видимости мы вынесли этот сюжет на отдельный рисунок 2.

Ромбоэдрический многослойный графен получается сдвигом каждого следующего слоя относительно предыдущего на треть периода кристаллической решетки. Интерес к нему обусловлен формой энергетических зон электронов: если в монослойном графене валентная зона и зона проводимости встречаются в одной точке, то в ромбоэдрическом графене место контакта двух зон расплывается в плоскую площадку, что означает практически отсутствующую дисперсионную зависимость: энергия электронов слабо зависит от импульса. Взаимодействие между такими медленными электронами намного сильнее, чем в полупроводниках, что и создает условия для появления необычных фаз, в том числе и сверхпроводящих.

Сверхпроводящее состояние в ромбоэдрическом графене было обнаружено 4 года назад [3], а в 2025 были найдены еще две сверхпроводящие фазы, весьма необычные, поскольку в них электронные пары имеют одно и то же направление спина, т.е. $S = 1$, при этом их общий орбитальный момент L так же равен единице. Две новые фазы легко распознаются во внешнем магнитном поле: сверхпроводящие фазы SC1, SC2 выживали в поле больше 0.6 Тесла, а “обычная” фаза SC3 с $S=0$, $L=0$ разрушалась уже при 0.1 Тесла.

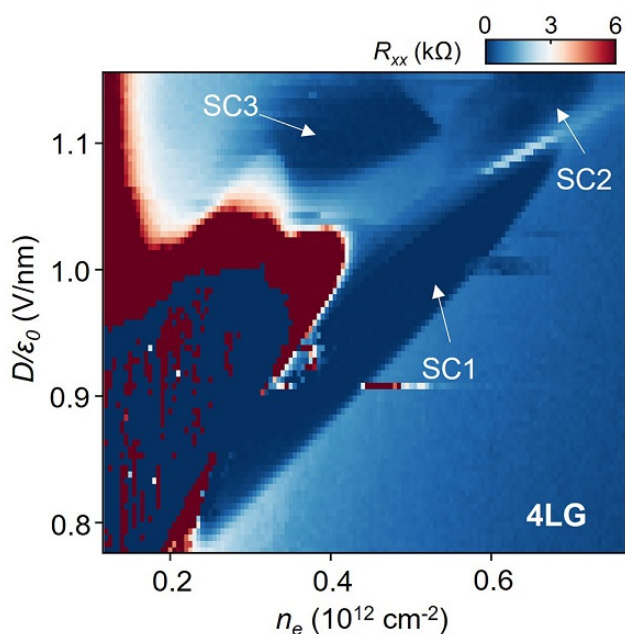


Рис. 2. Продольное сопротивление (обозначено цветом) четырехслойного графена на фазовой диаграмме в координатах функции плотности электронов (ось абсцисс) и приложенного напряжения (ось ординат). Темно-синие области, SC1, SC2 и SC3, указывают сверхпроводящие фазы. *T. Han et al. [4]*

Такая “дружба” сверхпроводимости и ферромагнетизма необычна уже сама по себе, но исследователи заинтригованы прежде всего тем, что обе или хотя бы одна из этих фаз (прежде всего SC2) может оказаться топологическим квантовым состоянием, поиски которого ведутся уже не один год.

Еще один сюжет верхнего ряда, занимающий крайний правый квадратик, напрямую не относится к физике конденсированного состояния, но достоин внимания, хотя бы в виду глубоких аналогий с физикой твердого тела в такой далекой от нее области, как динамика слияния черных дыр. В этом году исполнилось десять лет с момента детектирования первого гравитационно-волнового события и с тех пор регистрация гравитационных сигналов, возникающих при столкновении массивных объектов во Вселенной, превратилась в рутину – их счет идет на сотни. Однако в этом году сильно усовершенствованная методика детектирования гравитационных волн позволила получить самый отчетливый из зарегистрированных сигналов и, наконец, проверить теорему Хокинга о площадях [5]. Эта теорема гласит, что при слиянии черных дыр площадь горизонта событий получившейся черной дыры не может быть меньше суммы соответствующих площадей первоначальных черных дыр. Данное утверждение является следствием второго начала термодинамики, что покажется не столь невероятным, если вспомнить, что все события, оказавшиеся за горизонтом событий, отрезаны от нашего мира, то есть имеет место потеря информации и увеличение энтропии.

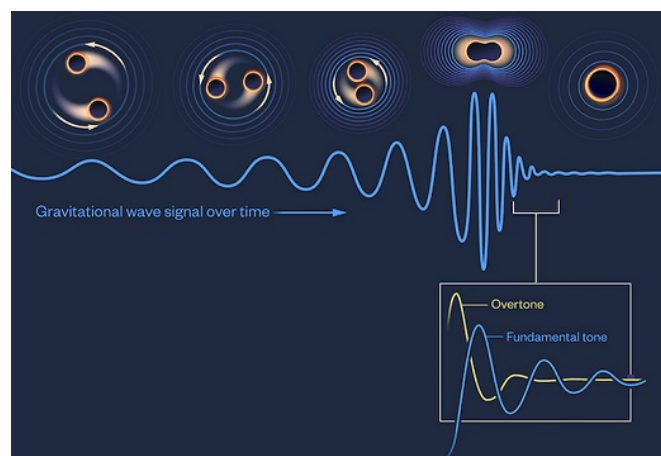


Рис. 3 Представлен сигнал от гравитационно-волнового события GW250114 – слияния двух черных дыр массой 30-40 масс Солнца: сигнал разлагается на две моды колебаний – основную (фундаментальную) и дополнительную (ошибочно обозначенную авторами из Physics [1] как “обертон”).

Оказывается, по форме гравитационного сигнала можно определить эти площади. На начальном этапе, когда пара черных дыр “вальсирует” по скручивающейся спирали, форма сигнала дает информацию о площади черных дыр до слияния. На следующем же этапе объединенная черная дыра вибрирует подобно колоколу – в сигнале присутствуют две близкие частоты с отличающимся временем затухания – именно по этому «звону» и удастся определить площадь горизонта событий для образовавшейся черной дыры. Однако близость частот предъявляет повышенные требования к чистоте сигнала для их обнаружения, именно поэтому вплоть до последнего времени не удавалось однозначно говорить о доказательстве теоремы Хокинга. За десять лет, прошедших с момента первого детектирования слияния черных дыр, отношение сигнал/шум для гравитационных антенн возросло с 26 до 80, что позволило с 99.999-процентной вероятностью утверждать, что теорема Хокинга подтверждается экспериментом.

Следующий сюжет, находящийся на стыке космологии и физики твердого тела – это лазер, излучающий нейтрино. Нейтрино – частица трудноуловимая и крайне слабо взаимодействующая с веществом. Кроме того, нейтрино – фермион, частица с полуцелым спином. Поэтому идея о том, что нейтрино могут излучаться когерентно, подобно фотонам в лазере, кажется очень странной и вызывающей. Однако в статье [6], опубликованной в PRL, показано, что такой эффект возможен. Авторы моделировали поведение бозе-эйнштейновского конденсата радиоактивных атомов ^{83}Rb , и оказалось, что за счет коллективного взаимодействия атомов в конденсате излучаемые ими при бета-распаде нейтрино также будут когерентными. Рассчитан эффект увеличения интенсивности нейтрино и предложены методы экспериментального исследования этого эффекта. Если этот эффект будет доказан экспериментально, то исследования нейтрино выйдут на качественно новый уровень. Характерные температуры, при которых проявляется этот эффект, составляют доли милликельвина, что представляет существенные технические трудности, однако не является непреодолимым.

Однако вернемся к обычным, земным температурам и более жизненным историям. Такое, казалось бы, простое дело, как варка макарон, занимает немалое место в умах физиков. Особен-

но актуально изучить этот процесс с позиций энергосбережения.



Рис.4. Лауреаты “Шнобелевской премии”, диаграмма энергосбережения и паста с итальянским соусом.

В обзоре [7] научные журналисты APS собрали самые “вкусные” научные статьи, касающиеся тематики спагетти. Например, в одной из работ научно обоснован “бабушкин рецепт”, позволяющий экономить электроэнергию: выключить нагревание после закипания спагетти, а до состояния “al dente” они доварятся сами. В другой работе описана механика приготовления традиционного итальянского соуса к спагетти, удостоенная “Шнобелевской премии” этого года [8].

Приведенные на рисунке 4 лауреаты “Шнобелевской премии” намекают на приближение веселого праздника. Мы, в свою очередь, желаем всем читателям ПерсТа последовать их примеру, радоваться жизни, вкусной еде и творчеству, несмотря на необходимость энергосбережения и прочие технические трудности!

А. Пятаков, З. Пятакова

1. “Highlights of the Year”, *Physics* **18**, 191 (2025).
2. R.Lin et al., *Phys. Rev. Lett.* **135**, 060602 (2025).
3. H.Zhou et al., *Nature* **598**, 434 (2021).
4. T.Han et al., *Nature* **643**, 654 (2025).
5. A.G.Abac et al., *Phys. Rev. Lett.* **135**, 111403 (2025).
6. B.J.P.Jones and J.A.Formaggio, *Phys. Rev. Lett.* **135**, 111801 (2025).
7. <https://physics.aps.org/articles/v18/22>
8. <https://physics.aps.org/articles/v18/163>

КОНФЕРЕНЦИИ

2026 International Conference on “Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications” (PHENMA 2026), July 15-18, 2026, Busan, Korea

Scope of the Conference

The scope of the conference includes the following topics:

Materials: Ferro-Piezoelectrics, Semiconductors, Superconductors, Environmental Materials, Composite, Ceramics, Thin Films, Nanomaterials, Advanced Materials for Additive Manufacturing, Metal Engineering Materials, Functionally Graded Materials etc.

Synthesis & Processing: Powder Processing, Processing Technologies, Piezoelectric Technologies, MEMS-Processing, etc.

Characterization and Research Methods: Material Design, Microstructure Properties, Chemical Properties, Physical Properties, Mechanical Properties, Strength Properties, Finite-Element Modeling, Mathematical Modeling, Physical Modeling, Physical Experiment, etc.

Applications: MEMS, Hetero-structures, Piezotransducers, Energy Harvesting, Superconductive Devices, Light-Emitting Diodes, Multimedia Communication, Fiber Reinforced Composites, Construction Health Monitoring, Lubricant and Tribology, etc.

Underwater Technologies: Underwater Communication, Marine Engineering, Power System, Ocean Energy, etc.

Biomedical Engineering: Medical Materials, Nanotechnology in Medicine, Medical Instrumentation, Physical Methods in Medicine, Waste, Biological Product Processing, etc.

Industry and Management: CAD/CAM/CAE Application, Industrial Instruments, EDM, Materials Machining, Machines, Design and Building Constructions, etc.

The conference will consist of keynote, oral and poster sessions. The official language of the conference will be English.

Dates & Deadlines

Deadline for Abstracts: **March 1, 2026**

Preliminary Registration: **March 1, 2026**

Notification of Acceptance: **April 1, 2026**

E-mail: parinov_ia@mail.ru

Website: <http://phenma2026.sfedu.ru/>

*Дорогие наши читатели!
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!*



Редакция и авторы ПерсТа

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

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