

В этом выпуске:

МИКРОТЕХНОЛОГИИ

Электроэнергия из дождя

Шум осеннего дождя за окном вдохновляет не только поэтов, но и ученых, в особенности, тех, кто разрабатывает нетрадиционные источники электроэнергии. Использовать энергию падающих капель – вроде бы очевидная идея, но далеко не просто технически реализуемая. В недавней работе ученых из South China Normal Univ. и Univ. of Twente (Китай, Нидерланды) [1] сообщается о разработке и исследовании такого “капельного” наногенератора электрической энергии.

Принцип действия устройства заключается в следующем. Имеется электрод, покрытый тонкой пленкой гидрофобного полимера, несущего некоторый поверхностный заряд. Падающая капля работает как дополнительный электрод. Ударяясь о поверхность с некоторой кинетической энергией, она деформируется и растекается, меняя емкость системы. За счет изменения емкости будет меняться и заряд системы – значит, через сопротивление нагрузки пойдет импульс электрического тока. Величина силы тока в данный момент времени зависит от площади капли (так как емкость зависит от площади электрода), и ток будет максимальным в момент максимального растекания. Если поверхность немного наклонена, капля стекает с поверхности, за счет поверхностного натяжения, восстанавливая свою форму, и подзаряжает разряженный конденсатор, позволяя избежать насыщения и увеличивая силу тока, создаваемую большим числом капель. Исследователи варьировали плотность заряда на пленке, высоту падения капель, сопротивление нагрузки и другие параметры для того, чтобы получить максимально возможную силу тока и мощность наногенератора.

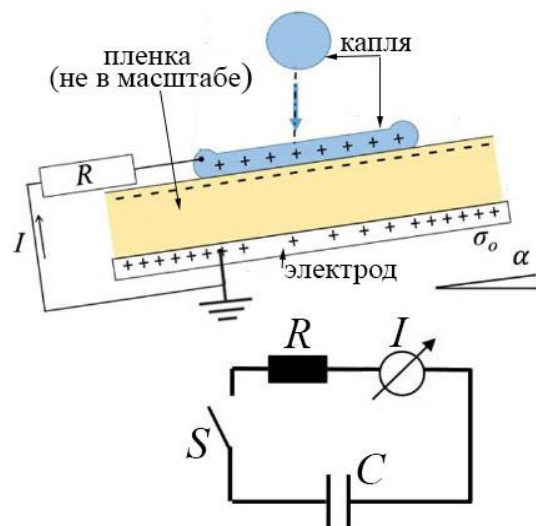


Рис. 1. Схема наногенератора на падающих каплях и принципиальная электрическая схема.

И далее ...

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

- 2 Борсодержачие каркасы для доставки лекарств
- 3 Как сломать нанотрубки из карбида бора

СНОВА К ОСНОВАМ

- 4 Плавание вверх тормашками

КОНФЕРЕНЦИИ

- 6 Всероссийский коллоквиум по физике конденсированного состояния

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

Борсодержащие каркасы для доставки лекарств

Вслед за традиционными фуллеренами в качестве курьеров лекарственных средств набирают популярность и замкнутые клетки, содержащие отличные от углерода элементы. Иранские исследователи из Islamic Azad Univ. [1] представили результаты компьютерного моделирования смешанных фуллереноподобных систем, построенных из атомов бора и азота, а также бора и фосфора. Их исследование направлено на анализ адсорбции аромазина, противоракового препарата, на соединениях $B_{12}N_{12}$ и $B_{12}P_{12}$ с помощью теории функционала плотности на уровне теории PBE/6-311G(d,p) и MPW1PW91/6-311++G(d,p). Авторы проводили расчеты с помощью программы Gaussian09 как в вакууме, так и в растворителе. Роль растворителя отводилась воде. Им удалось выяснить, что аромазин адсорбируется на поверхности клеток посредством функциональных групп CO и CN. Наиболее сильное химическое связывание наблюдается между атомом кислорода, входящим в принадлежащую лекарственному средству карбонильную группу в расположении шестичленного кольца, и атомом бора в составе квазифуллерена (см. рис.).

При этом сравнительный анализ энергий адсорбции свидетельствует, что минимальная величина соответствует все-таки соединению $B_{12}P_{12}$ как в вакууме, так и в водной среде. Кроме того, авторы оценили и электронные характеристики молекулярных комплексов, построенных из борсодержащих фуллеренов и аромазина. Расчеты показали, что присутствие лекарства приводит к заметному уменьшению НОМО-LUMO щели каркаса, что, в свою очередь, может существенно изменить электропроводность, превращая квазифуллерен не только в агента доставки препарата, но и в своего рода химический сенсор. Кроме того, адсорбция аромазина на $B_{12}N_{12}$ меняет полярность последнего, что подтверждается полученными величинами дипольного момента. Рассчитанные энергии сольватации показывают, что растворимость аромазина, взаимодействующего с $B_{12}N_{12}$, существенно увеличивается по сравнению с изолированным соединением. В конечном итоге, по мнению авторов, совокупность физико-химических характеристик именно борнитридного фуллерена $B_{12}N_{12}$ делает его перспективным кандидатом на роль но-

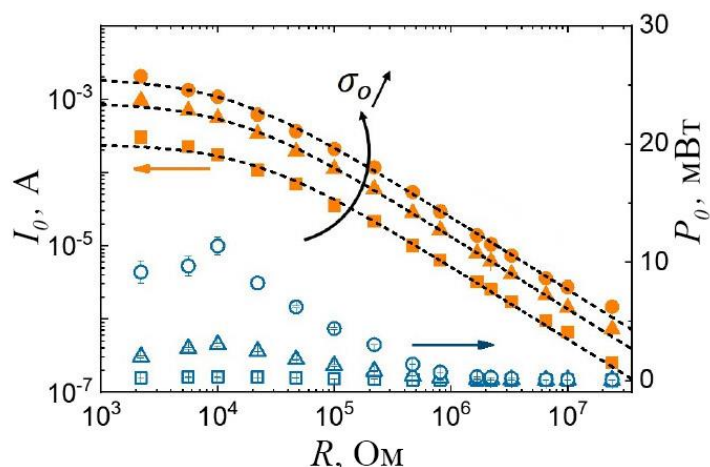


Рис. 2. Экспериментальные результаты: зависимость максимальной силы тока и мощности наногенератора от внешнего сопротивления при различных величинах начальной плотности заряда.

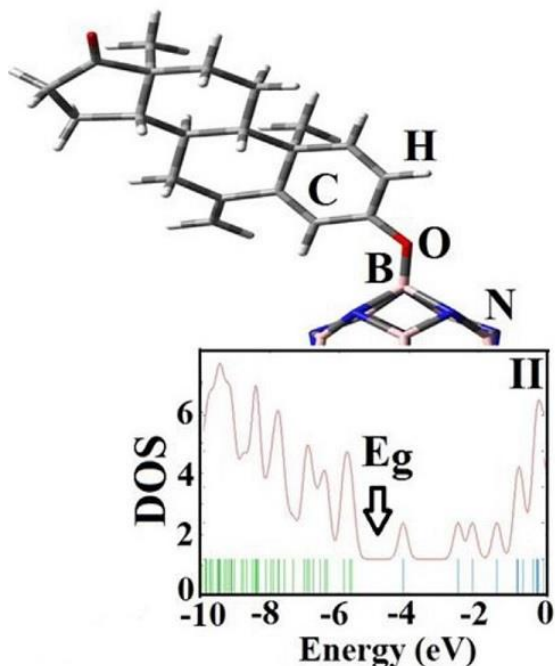
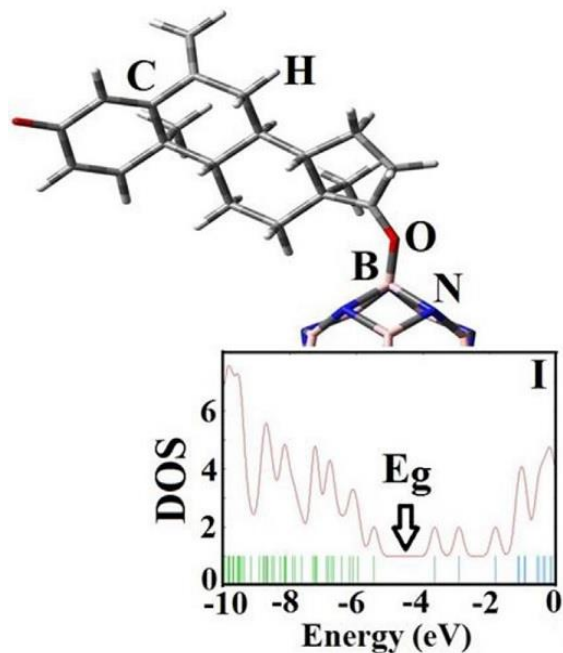
Авторы использовали капли децимолярного раствора поваренной соли, миллиметрового диаметра, падающие с высоты от 3 до 18 см на кремниевый электрод, покрытый пленкой фторполимера. При повышении плотности заряда сила тока и мощность, как и ожидается, увеличиваются. В зависимости от сопротивления нагрузки мощность меняется немонотонно, наблюдается максимум, что тоже вполне ожидаемо. Максимальная величина силы тока составила 2.2 мА, а мощности – 12 мВт. Для оптимальных условий максимальная энергия, “отобранная” у капли, составляет 0.4 мДж при начальной потенциальной энергии 14 мДж.

Таким образом, эффективность запаса энергии составляет около 3%. Пока КПД такого устройства меньше, чем у паровоза, но все же это большой прогресс по сравнению с предыдущими работами, в которых сообщалось об эффективности в 0.01%. Возможности дальнейшего повышения эффективности, мощности и надежности таких устройств внушают оптимизм и ожидания большого будущего небольших генераторов электроэнергии.

3. Пятакова

1. H. Wu et al., *Phys. Rev. Lett.* **125**, 078301 (2020).

сителя противораковых препаратов, приближая победу над страшной болезнью.



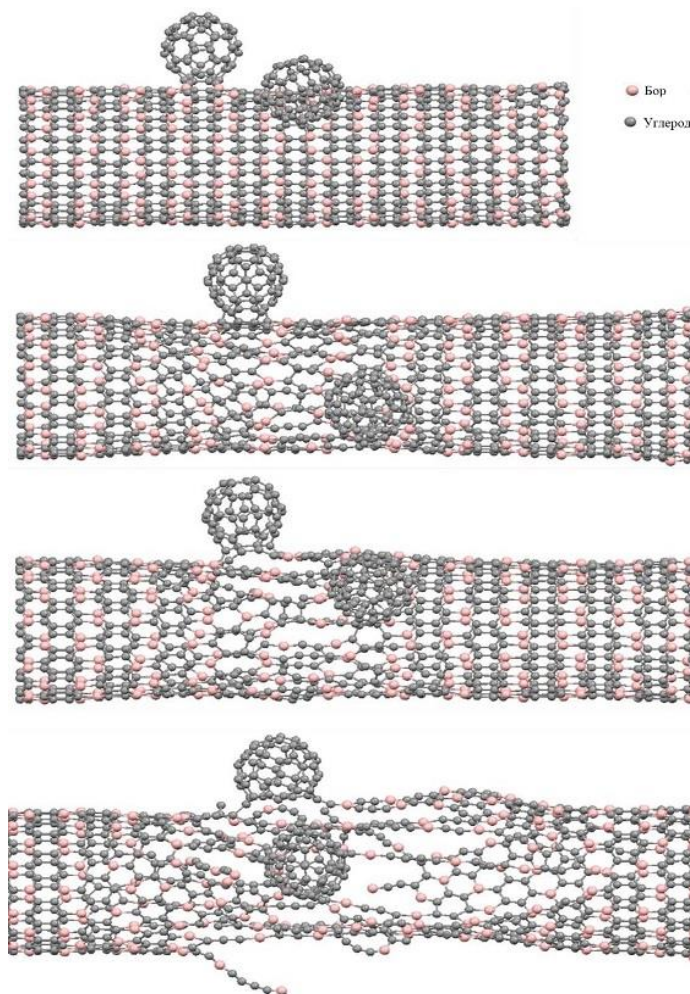
Атомная структура и плотность электронных состояний квазифуллерена $B_{12}N_{12}$ с адсорбированной на его поверхности молекулой ароматина. Ароматин химически связывается с замкнутым каркасом $B_{12}N_{12}$ с помощью функциональной группы CO в расположении пятичленного (вверху) и шестичленного (внизу) кольца.

М. Маслов

I. M. Kian et al., J. Mol. Struct. 1217, 128455 (2020).

Как сломать нанотрубки из карбида бора

Известно, что углеродные нанотрубки обладают целым набором уникальных характеристик. Это и механическая прочность, и высокие термическая и электрическая проводимости, и возможность формировать эндоэдральные комплексы в роли соединения-хозяина. Однако химический состав семейства нанотрубок не ограничивается лишь углеродом, и исследователи активно изучают свойства аналогичных низкоразмерных квазиодномерных соединений, построенных в том числе из атомов бора и азота (борнитридные нанотрубки) или бора и углерода (боркарбидные нанотрубки). Последним и посвящена работа иранских и французских исследователей [1]. Авторы с помощью классической молекулярной динамики попытались проанализировать влияние хиральности, числа стенок (напомним, что нанотрубки могут быть как одностенными, так и многостенными), диаметра и температуры на механическую устойчивость BC_3 -нанотрубок, как идеальных, так и содержащих дефекты, и BC_3 -нанопочек (см. рис.).



Моментальные снимки процесса разрушения нанопочки $(18,0)-2C_{60} BC_3NT$

Боркарбидные нанотрубки авторы “получали” из чисто углеродных аналогов посредством замещения части атомов углерода на бор. Молекулярную динамику они выполняли в программе LAMMPS с использованием модифицированного потенциала Терзофа. Длина образцов составила около 5 нм. Для расчета механических характеристик исследователи изначально выполнили молекулярно-динамическое моделирование с использованием изотермо-изобарического ансамбля при 300 К и давлении 1 бар. Затем ячейку моделирования постепенно растягивали вдоль главной оси нанотрубки. Для анализа влияния температуры на механические характеристики авторы выбрали одностенные кресельные и зигзагообразные нанотрубки и диапазон температур от 300 до 900 К. В результате исследователи получили модули Юнга, напряжения разрушения и критическую деформацию образцов, которая приводит к необратимому распаду боркарбидных нанотрубок. Кроме того, авторы сопоставили результаты с углеродными нанотрубками различной хиральности и диаметра, чтобы понять, как замена четверти атомов углерода атомами бора влияет на механические свойства вновь образованной системы. Итак, анализ полученных данных показал, что увеличение количества стенок в боркарбидной нанотрубке BC_3NT существенно повышает модуль Юнга, напряжение разрушения и критическую деформацию независимо от индексов хиральности. Так, двустенные нанотрубки BC_3NT в этом отношении демонстрировали заметно лучшие характеристики, чем одностенные. Соответственно максимальным модулем Юнга обладали трехстенные боркарбидные нанотрубки. Моделируя, нанопочки, которые представляют собой от одного до четырех фуллеренов C_{60} , присоединенных к внешней поверхности одностенной нанотрубки BC_3NT (см. рис.), авторы заметили небольшое ослабление механических характеристик с увеличением числа фуллеренов в системе. Таким образом, самыми низкими величинами модуля Юнга, напряжения разрушения и критической деформации для любых рассмотренных индексов хиральности оказалась система с четырьмя прикрепленными C_{60} . Например, наименьший модуль Юнга для BC_3 кресельных нанопочек и нанопочек типа зигзаг составил 556.6 ГПа и 531.4 ГПа для наноструктур (10.10)- $4C_{60}$ и (18.0)- $4C_{60}$, соответственно, что оказалось на ~ 30% ниже соответствующих величин для чистых одностенных нанотрубок

BC_3NT . Дальнейший анализ одностенных BC_3NT , содержащих вакансии, а также дефекты Стоуна-Уэльса, позволил авторам установить, что классические дефекты Стоуна-Уэльса незначительно ослабляют механические характеристики нанотрубок, как и одноатомные вакансии, в то время как присутствие двухатомных вакансий снижает их уже более существенно. В конечном итоге, авторы считают, что механические характеристики боркарбидных нанотрубок не сильно уступают углеродным, что позволит им занять свою уникальную нишу в семействе углеродсодержащих наноматериалов для различных технологических приложений.

М. Маслов

I. A. Salmankhani et al., Comput. Mater. Sci. 186, 110022 (2021).

СНОВА К ОСНОВАМ

Плавание вверх тормашками

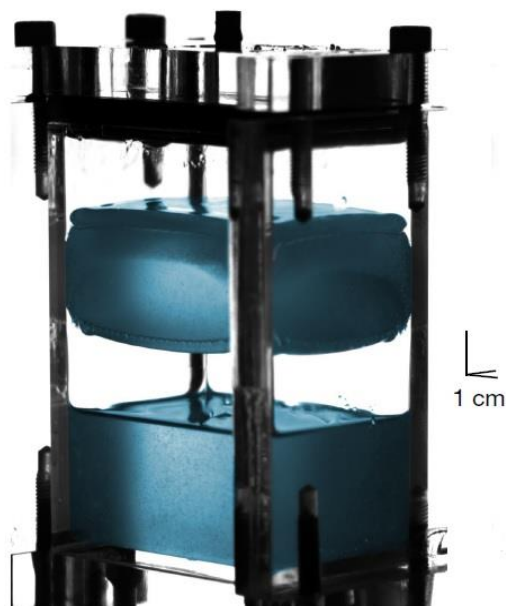
Житейская мудрость говорит, что неудобно спать на потолке – одеяло спадает. Ученые из Paris Sciences et Lettres Univ. (Франция) [1] показали, что вниз головой, можно если не спать, то хотя бы плавать. Они заставили левитировать в сосуде слой жидкости, а для вящей убедительности – еще и пустили по нему плавать кораблик вверх килем (рис. 1).

То, что в сосуде более плотная жидкость не может находиться над менее плотной, а, тем более, парить на слое из воздуха, подсказывает простой здравый смысл. Физики же говорят в таком случае, что на границе раздела двух сред в гравитационном поле развивается неустойчивость Рэлея-Тейлора. Даже если вначале граница строго горизонтальна, любое возмущение на поверхности будет только нарастать: участки более плотной среды продолжат опускаться, а менее плотной – всплывать. Заставить висеть слой жидкости в сосуде на воздушной подушке – задача сродни удержанию какого-нибудь груза, подпирая его спицей.

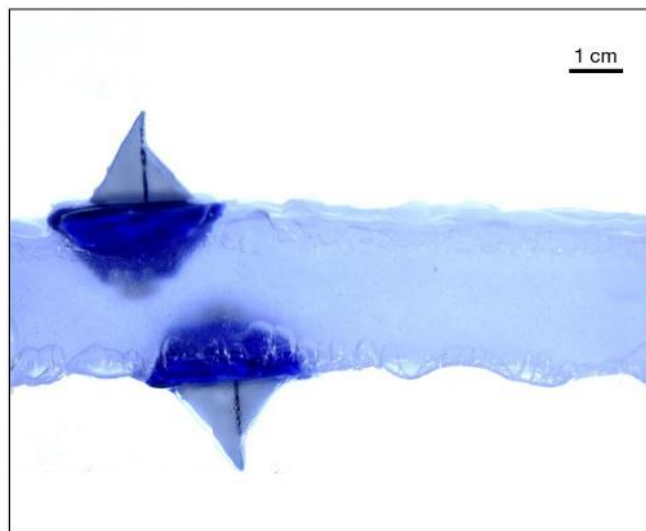
Надобно сказать, что именно такая задача была решена Петром Леонидовичем Капицей более полувека тому назад. Маятник, закрепленный на подвесе, вибрирующем с частотой, много большей собственной частоты маятника, может находиться в устойчивом равновесии в перевернутом положении. При усреднении быстрых осцилляций по периоду возникает эффективный потенциал, отличающийся от того вида, который характерен для статического случая

ПерсТ, 2020, том 27, выпуск 17/18

(рис. 2, пунктирная и сплошные кривые, соответственно): в верхнем, ранее неустойчивом положении возникает локальный минимум. Для этого необходимо выполнение условия стабилизации: произведение амплитуды колебаний подвеса на их частоту должно превышать критическую величину, равную квадратному корню из произведения удвоенной длины маятника на ускорение свободного падения.



a

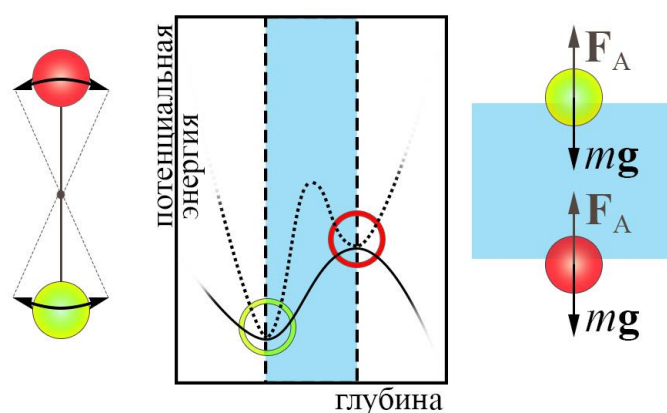


б

Рис. 1. Стабилизация неустойчивости Рэлея-Тейлора: *a* - слой силиконового масла, левитирующий в сосуде из оргстекла над слоем воздуха (ретушированный ч/б снимок); *б* - кораблик может плавать по обеим поверхностям [1].

Секрет фокуса французов практически не отличается от рецепта Капицы: нужно заставить поддон сосуда колебаться с частотой и ампли-

тудой, удовлетворяющим тому же условию квадратного корня (только вместо длины маятника нужно подставить в формулу другой характерный размер – длину границы раздела, поделенную на два π). Как показал эксперимент, величины критической амплитуды скорости поддона при изменении длины поверхности раздела, действительно, ложатся на корневую зависимость. Для полноты картины следует отметить, что во время опыта экспериментаторам требовалось избежать развития другого процесса, порожденного тряской – образования капиллярных волн (параметрическая неустойчивость Фарадея). Пройти между Сциллой и Харибдой двух неустойчивостей удалось, используя вязкие жидкости – силиконовое масло



или глицерин.

Рис. 2. Потенциальная энергия двух систем в статическом случае (сплошная кривая) и в динамике, на вибрирующем поддоне (пунктирная кривая). Эффективный потенциал, изображаемый пунктирной кривой, имеет абсолютный минимум (соответствующий нижнему положению маятника или поплавку, плавающему на верхней поверхности жидкости), а также локальный минимум, который описывает устойчивое равновесие перевернутого маятника или поплавка на нижней поверхности.

Как надеются авторы [1], проделанная ими работа не останется курьезной демонстрацией, а послужит толчком для исследований процессов на границе воздуха и жидкости в новых экзотических условиях.

А. Пятаков

1. *B. Apfel et al., Nature 585, 48 (2020).*

КОНФЕРЕНЦИИ

Всероссийский коллоквиум по физике конденсированного состояния

Начиная с 1 октября 2020 г. планируется на регулярной основе (1 и 3 четверг каждого месяца) проводить онлайн Коллоквиумы по современным проблемам физики конденсированного состояния. Формат Коллоквиума подразумевает доклады не по узким темам, а обзоры текущего состояния рассматриваемой физической проблемы, начиная с самых азов и с перспективами ее развития. Докладчиками будут выступать выдающиеся российские и зарубежные ученые мирового уровня:

1 Октября - Константин Новоселов, университет Манчестера, Великобритания (лауреат Нобелевской премии по физике за 2010 г.)
"Physics and Applications of van der Waals heterostructures"

15 Октября - Nicola Spaldin, ETH Zurich, Швейцария
"Transition metal oxides"

5 Ноября - Леонид Дубровинский, Университет Байройта, Германия.
"Физика высоких давлений: исследования новых материалов и строение планет"

19 Ноября - Дмитрий Ефетов, Барселонский институт Науки и Технологии, Испания
"Magic Angle Bilayer Graphene - Superconductors, Orbital Magnets, Correlated States and beyond"

3 Декабря - Robert Sava, Принстонский Университет, США
"Main problems in solid state physics: how chemists can help?"

17 Декабря - Игорь Мазин, Университет Джорджа Мейсона, США
"Conventional high- T_c superconductivity: from Al_5 to MgB_2 and H_3S "

Перечень докладчиков на 2021 г. уточняется. Языки докладов - русский (для русскоязычных докладчиков) и английский. Время докладов - 15:00 по Москве. Все подробности и актуальную информацию о Коллоквиумах можно найти по адресу: www.cond-mat.ru

Платформа семинаров - ZOOM. Это бесплатная программа и участие в семинарах, конечно, тоже бесплатное. Вы можете смотреть семинары на любом компьютере, планшете или смартфоне. Для этого нужно только поставить приложение ZOOM (<https://zoom.us/download>). Пользоваться ZOOM очень просто!

За несколько дней до первого Коллоквиума будет разослано информационное сообщение со ссылкой на ZOOM-конференцию.

Оргкомитет Коллоквиума:

А.Н. Васильев, МГУ им. Ломоносова, Москва
С.Г. Овчинников, ИФ СО РАН, Красноярск
Р.В. Писарев, ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург
С.В. Стрельцов, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург
Д.И. Хомский, Кельнский университет, Кельн (Германия)

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

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

Научные редакторы К.Кугель, Ю.Метлин

В подготовке выпуска принимали участие М.Маслов, А.Пятаков, З.Пятакова

Выпускающий редактор: И.Фурлетова

Адрес редакции: 119296 Москва, Ленинский проспект, 64