

В этом выпуске:

НАНОСТРУКТУРЫ, НАНОТЕХНОЛОГИИ

Экологичный клей из нанокристаллов целлюлозы и... воды

Склеивание, по определению энциклопедий и справочников – “метод получения неразъемного соединения, основанный на адгезии клеевой прослойки и склеиваемого материала”. Адгезия может быть обусловлена химическими связями или межмолекулярным (преимущественно ван-дер-ваальсовым) взаимодействием. Клеевая прослойка, естественно, формируется из клея, природного или синтетического. Природные клеи бывают и неорганические (керамические, силикатные, фосфатные и др.), и органические (животные, растительные). Самые древние, пожалуй, те, которые делали из костей и сухожилий, из чешуи рыб. Хоть и древние, но их и сейчас используют. Из растительных наиболее известны клеи на основе крахмала. Наверно, кое-кто еще помнит, как с помощью крахмала заклеивали на зиму окна бумажными полосками... Конечно, в наше время наиболее широко распространены синтетические клеи (феноло-формальдегидные, эпоксидные, полиуретановые, поливинилацетатные, поливинилхлоридные, акрилатные и др.). Один из самых популярных – “суперклея” на основе цианоакрилата.

Кстати, изобретение “суперклея” (*Super Glue*) – пример того, как важны даже отрицательные результаты научных исследований. В 1942 году, во время Второй мировой войны, молодой американский химик Гарри Кувер (Harry Coover) участвовал в работах по поиску прозрачных пластиков, которые могли быть использованы в качестве прицелов. Он изучал различные вещества, среди которых были цианоакрилаты, но они не подошли – оказались слишком клейкими. Позже, в 1951 году, при разработке термостойкого покрытия для реактивного самолета Гарри Кувер вернулся к своим любимым цианоакрилатам. Для решения новой задачи они опять не подошли, зато прочно склеили (и испортили!) один из приборов, с помощью которого изучали их свойства. Но теперь ученый понял, как можно использовать этот материал, и после упорной работы Кувера с коллегами по оптимизации состава в 1958 году на рынке появился “*Super Glue*” – суперклея...

Этот клей, как и другие клеи, если склеит, так уж склеит. А ученым и инженерам по-прежнему хочется разработать такой клей, который позволял бы не только прочно склеивать детали, но и при необходимости расклеивать их. Примеры мы видим в живой природе – это “сухой адгезионный клей”, которым пользуются ящерицы гекконы и некоторые насекомые,

И далее ...

НАНОМАТЕРИАЛЫ

- 4 Упругость допированного силицена
- 5 Двумерные материалы из четырехмерных молекул

МУЛЬТИФЕРРОИКИ

- 6 Чудеса на виражах: в поисках скирмионов в феррите висмута

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

- 7 Фуллерены против ВИЧ

КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ

- 9 Ускоряя молекулярную динамику

например, пауки, умеющие передвигаться по вертикальным стенам и даже потолку (*подробнее см. ПерсТ [1,2]*). У гекконов адгезию за счет сил Ван-дер-Ваальса обеспечивают щетинки на лапках. Эти щетинки на концах делятся на лопатообразные кончики из β -кератина размером 100-200 нм. По мотивам этих лапок ученым удалось создать массивы углеродных нанотрубок, обеспечивающих довольно высокую адгезию к подложке [1]. Правда, практического применения эти материалы пока не нашли. Современные методы исследования позволили получить новую детальную информацию о структуре и составе различных зон щетинок ходильных ног странствующего паука [2]. На концах щетинок находятся контактные элементы, пластинки размером ~ 1 мкм и толщиной 20 нм, которые и обеспечивают высокую адгезию к поверхности за счет сил Ван-дер-Ваальса. “Отклеивание” у живых существ происходит за счет определенного движения лапок, включая изменение угла контакта щетинок с поверхностью. Воспроизводить, причем неоднократно, такое действие в

биомиметическом клее, конечно, невозможно.

Однако недавно коллективу ученых из Финляндии, Японии, США и Канады удалось создать клей, действующий аналогично адгезионному “клею” лапок живых существ и позволяющий не только прочно склеивать, но и расклеивать детали [3]. Основа клея – нанокристаллы целлюлозы (далее CNCs – cellulose nanocrystals) и вода. Ученые продемонстрировали, что простое явление самосборки CNCs в водной суспензии приводит к многоуровневому упорядочению с образованием в итоге вытянутых ламелей с иерархической структурой. Адгезия ламелей к поверхности суперсильная. Самосборка происходит при испарении воды в ограниченном объеме (рис. 1). Процесс авторы назвали C-EISA (*confined evaporation induced self-assembly*). В эксперименте, показанном на врезке рис. 1, использована одна капля суспензии нанокристаллов целлюлозы длиной ~ 130 нм (CNCs имеют вытянутую форму, их поперечный размер существенно меньше – 5-10 нм). Испарение происходит при температуре 23°C в течение, как минимум, 2 часов.

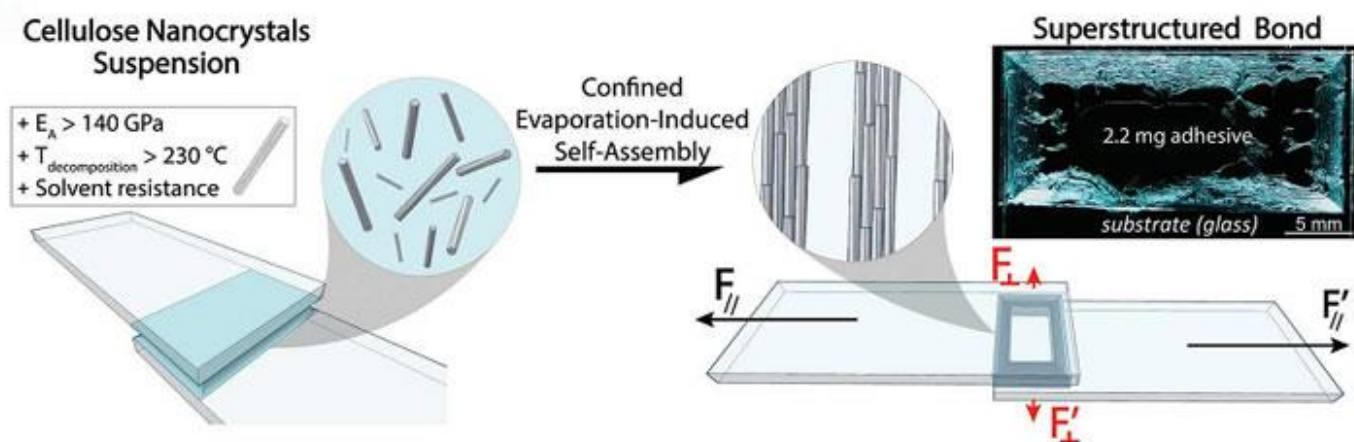


Рис. 1. C-EISA между двумя стеклянными пластинками приводит к образованию клея из суспензии CNCs. Схема иллюстрирует ориентированное упорядочение, возникающее благодаря самосборке нанокристаллов при испарении воды в ограниченном объеме. Черная и красная стрелки F показывают анизотропные силы вдоль плоскости и перпендикулярно ей, соответственно. Врезка справа – пример суперструктурированных связей с многоуровневым упорядочением CNCs с дальним порядком. Использована суспензия из 2.2 мг CNCs и 20 мкл воды.

По адгезии новый “растительный” клей сравним с лучшим суперклеем. Сила адгезии (сила, необходимая для разделения поверхностей) в экспериментах [3] в среднем равна 4.7 МПа (максимум достигает 7 МПа) в направлении вдоль плоскости. Испытание клея под нагрузкой показано на рис. 2.

Но у нового клея есть и другие замечательные свойства. В перпендикулярном направлении

сила адгезии во много раз ниже – всего 0.08 МПа. Такая сильная анизотропия позволяет склеивать и расклеивать поверхности. На рис. 3 показан пример прочного склеивания с использованием 2.2 мг CNCs. Площадь контакта 1 см^2 . Для расклеивания достаточно нажать большим пальцем перпендикулярно плоскости (это особенно хорошо видно на видео №3 в дополнительном материале к статье [3]).

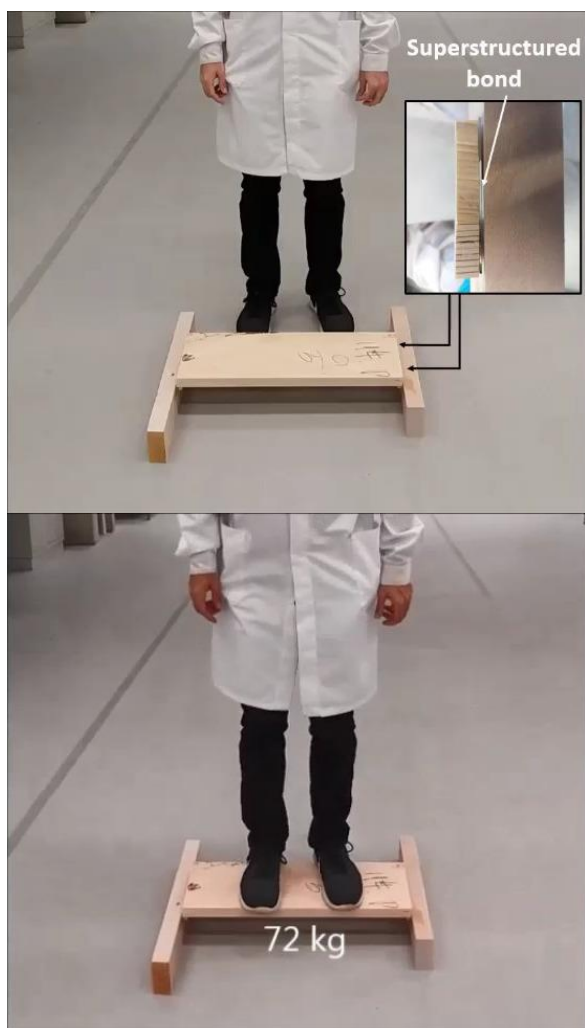


Рис. 2. Испытание клея под нагрузкой. $D_{\text{CNC}} = 0.33 \text{ мг/см}^2$.



Рис. 3. Иллюстрация анизотропии силы адгезии, полученной с 2.2 мг CNCs при площади контакта 1 см². Нажатия большим пальцем той же руки достаточно, чтобы разъединить детали.

Такая анизотропия особенно желательна, если требуется повторное использование хрупких ценных элементов. Клей легко убрать, просто потерев пальцем.

Прочность адгезии, как определили исследователи, зависит не от концентрации нанокристаллов целлюлозы, а от площади контакта и дальнего порядка ансамбля частиц. Структура ламелей видна на SEM изображениях (рис. 4).

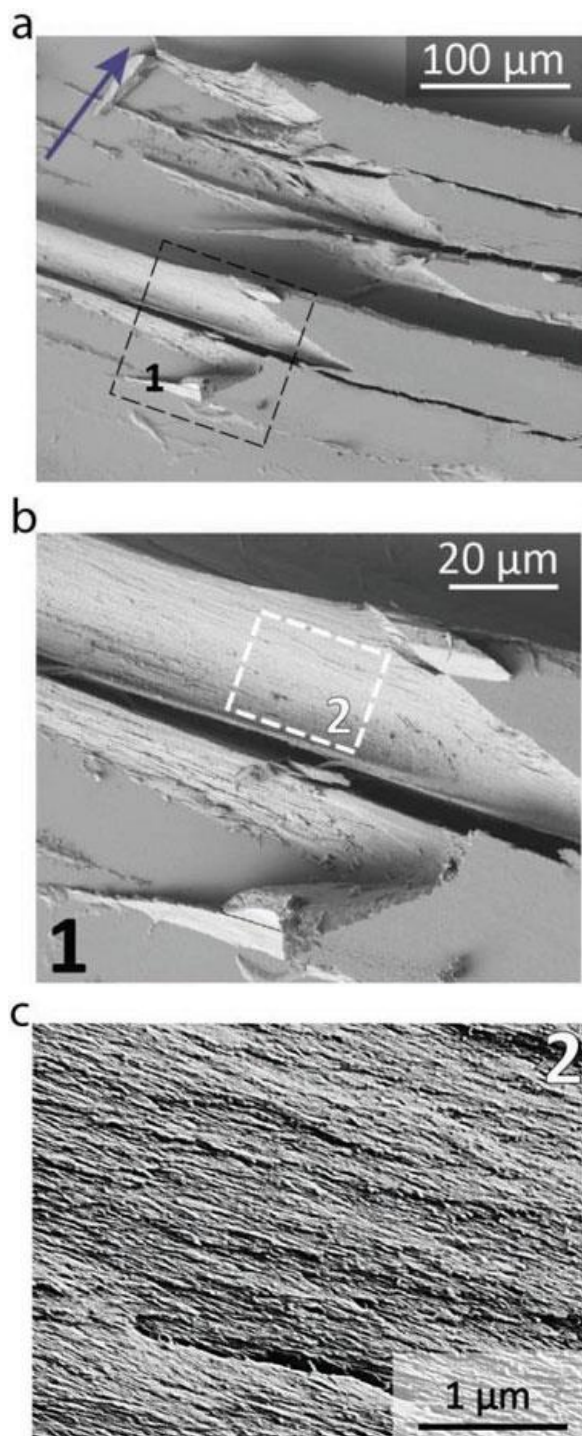


Рис. 4. Иерархическая структура ламелей: а - стрелка показывает направление испарения суспензии; б - увеличенное изображение участка 1 на рис. 4а; с - увеличенное изображение участка 2 на рис. 4б.

Исследования с помощью SEM, SAXS, far-IR показали, что процесс самосборки происходит в три стадии. Схема приведена на рис. 5. При высыхании суспензии нанокристаллы целлюлозы концентрируются у фронта высыхания и выстраиваются параллельно друг другу. Из близко расположенных CNCs благодаря межмолекулярным взаимодействиям формируются ламели. Вне ламелей CNCs нет (рис. 4), что свидетельствует о сильной внутренней когезии. Многоуровневое упорядочение начинается с молекулярного уровня (цепочки макромолекул целлюлозы) и заканчивается на макроуровне образованием ламели из стержнеобразных CNCs, ориентированных вдоль её продольной оси параллельно друг другу. Это напоминает иерархические биологические структуры – какие, например, создала природа для лапок геккона.

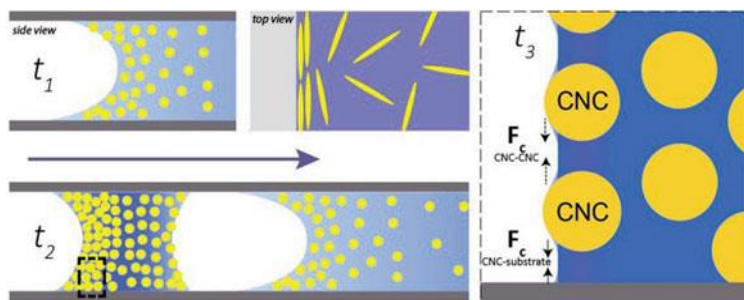


Рис. 5. Схема механизма самосборки нанокристаллов целлюлозы в процессе С-EISA. Процесс идет в три стадии: t_1 - CNCs концентрируются вблизи границы воздух-вода (вид сбоку и вид сверху), t_2 - локальная концентрация растет, расстояния между кристаллами резко уменьшаются, образуются внутримолекулярные и межмолекулярные связи, начинается ориентирование CNC и формирование ламели; t_3 – при высыхании CNCs выстраиваются параллельно друг другу и формируют ламели, прочно связанные с поверхностями, растет дальний порядок.

Склеивание происходит довольно медленно, и для его ускорения потребуются дальнейшие исследования. Тем не менее, исключительная анизотропия адгезии, устойчивость по отношению ко многим растворителям и высокая термостабильность (температура разложения выше 230°C) открывают широкие перспективы применения. Немаловажно, что получение суперпрочного клея – “зеленый” процесс. Основные компоненты – нанокристаллы целлюлозы, которые могут быть синтезированы из дешевой остаточной биомассы (например, сельскохо-

зяйственного производства) или переработанной бумаги, и вода.

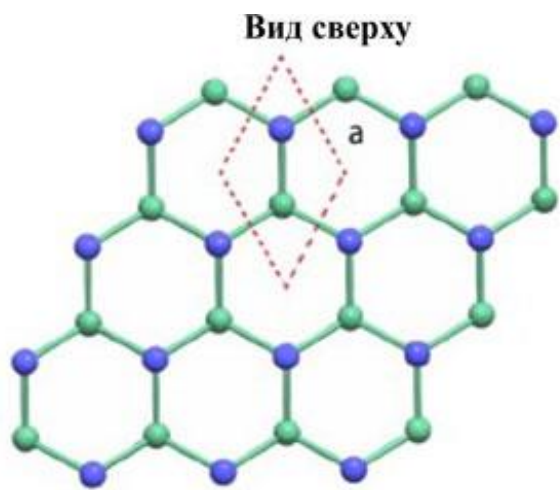
О. Алексеева

1. [ПерсТ 13, вып. 6, с.4 \(2006\).](#)
2. [ПерсТ 26, вып. 5/6, с.4 \(2019\).](#)
3. *V.L.Tardy et al., Adv. Mater.* **32**, 1906886 (2020).

НАНОМАТЕРИАЛЫ

Упругость допированного силицена

Двумерные наноматериалы не сдают позиции в современных трендах научной периодики. Помимо графена под пристальным вниманием исследователей находится и его кремниевый аналог – силицен. В работе [1] исследователи из Ирана с помощью теории функционала плотности проанализировали влияние процессов адсорбции атомов водорода и фтора на механические характеристики этого квазидвумерного материала. По сути, они рассмотрели допированный силицен как с односторонним, так и полным покрытием атомами адсорбата (см. рис.). Расчеты исследователи выполнили с помощью программного пакета Siesta на уровне теории РВЕ/DZP с учетом слабого ван-дер-ваальсового взаимодействия посредством включения дисперсионных поправок Гримме. Сначала авторы провели структурную оптимизацию незамещенного силицена, а также его водород- и фтор-содержащих производных и определили фононные спектры для подтверждения динамической устойчивости систем. Убедившись, что для всех рассмотренных образцов частоты оказываются действительными, они приступили к изучению их механических характеристик. Анализ упругих свойств незамещенного и допированного силицена при одноосной и равномерной (двухосной) механической деформации показал, что его модуль Юнга и модуль объёмного сжатия в процессе адсорбции уменьшаются. При этом влияние гидрирования на величину модуля Юнга более существенное, чем фторирования. Авторы отмечают, что при одностороннем растяжении пассивация приводит к уменьшению области упругих деформаций по сравнению с незамещенным силиценом. Другими словами, область пластических деформаций достигается при меньших механических воздействиях. При равномерном же растяжении, напротив, область необратимых деформаций наступает при более значительном растяжении по сравнению с незамещенным силиценом.



Атомная структура силицена с односторонней и полной гидрогенизацией/фторированием (X обозначает атомы водорода или фтора)

По мнению авторов, выявленный с помощью компьютерного моделирования факт изменения механических характеристик силицена в процессе адсорбции, существенен для практического применения этого двумерного наноматериала в качестве элемента сенсоров, датчиков и других наноразмерных устройств.

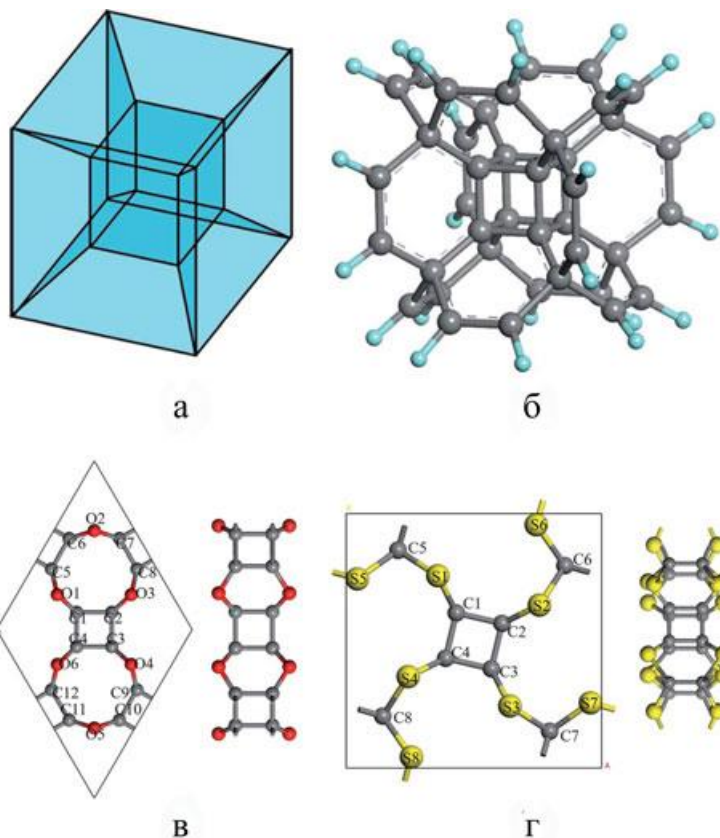
М. Маслов

1. M.Goli et al., Physica E 119, 113984 (2020).

Двумерные материалы из четырехмерных молекул

Можно без преувеличения сказать, что квазидвумерные кристаллы и тонкие пленки – это один из трендов развития современных нанотехнологий. Такие материалы, как графен, силицен и гексагональный нитрид бора у всех на слуху. Все больше и больше выходит работ по этой теме. Тема – благодатная. Однако среди многообразия работ отличились авторы публикации из Ocean Univ. (Китай) и Univ. of Twente (Нидерланды) [1], которые представили удивительный квазидвумерный материал – слои, построенные из “четырёхмерных” молекул гиперкубана (см. рис.). О гиперкубане мы уже неоднократно писали на страницах ПерсТа [2-4]. Это удивительный молекулярный аналог тессеракта или четырехмерного гиперкуба. Причем эта уникальная по своей структуре молекула обладает аномально высокой кинетической устойчивостью. Авторы работы [1] построили, пока что на компьютере, двумерные слои из производных гиперкубана и систематически исследовали полученные низкоразмер-

ные структуры с помощью теории функционала плотности. Роль производных сыграли фрагменты гиперкубана, в которых атомы водорода замещены атомами кислорода, серы и селена.



Изображения тессеракта (а), молекулы гиперкубана (б) и фрагментов квазидвумерных слоев, построенных из кислородсодержащих (в) и серосодержащих (г) производных гиперкубана.

Теоретический анализ выполнен обширный и достаточно подробный. Авторы воспользовались программой VASP для оценки термоди-

намической устойчивости пленок и их электронных свойств. При этом они использовали как традиционный GGA-PBE функционал, так и гибридный функционал HSE06 для расчета зонной структуры наноматериалов. Слабое ван-дер-ваальсовое взаимодействие также принималось во внимание с помощью поправок Гримме (DFT-D3). По электронным характеристикам авторы определили пленки на основе гиперкубана как полупроводники (диэлектрические щели этих систем оказались в диапазоне от 2.17 до 3.35 эВ), за исключением серосодержащих производных (энергетическая щель этих систем превышает 4 эВ). Дополнительную верификацию термической устойчивости авторы провели с помощью традиционного метода *ab initio* молекулярной динамики в программе CASTEP с использованием NVT канонического ансамбля. Нагревание проводили вплоть до 1500 К. Авторы установили, что слои не претерпевают разрушения при 1000 К по крайней мере в течение 10 пс, что свидетельствует об их высокой кинетической стабильности. Любопытно, что авторы пришли к выводу, что двумерные слои на основе гиперкубана слабо пригодны для приложений нанoeлектроники в приборах и устройствах. По их мнению, это лучшие кандидаты для “молекулярного сита”, по сути, фильтров. Действительно, эти наноструктуры являются пористыми, и по данным исследователей они обладают высочайшей селективностью. Например, мембраны из селенсодержащих производных гиперкубана способны практически полностью отделить гелий из смеси He/CH₄. Таким образом, работа [1] не только, в некотором смысле, расширяет класс двумерных материалов, но и предлагает еще один потенциальный способ извлечения гелия из природного газа. Будем, вслед за авторами, надеяться на их скорый синтез.

М. Маслов

1. L.Zhou et al., *RSC Advances* **10**, 8618 (2020).
2. [ПерсТ 21, вып. 22, с. 5 \(2014\).](#)
3. [ПерсТ 22, вып. 23/24, с. 8 \(2015\).](#)
4. [ПерсТ 25, вып. 9/10, с. 5 \(2018\).](#)

МУЛЬТИФЕРРОИКИ

Чудеса на виражах: в поисках скирмионов в феррите висмута

Одна из направляющих идей физики мультиферроиков сегодня – поиск в магнитоэлектрических средах скирмионов и скирмионо-подобных состояний. Основным вызовом для исследователей здесь становится то, что большинство мультиферроиков являются антиферромагнетиками: компенсация намагниченностей подрешеток лишает нас такого рычага управления, как магнитное поле, а именно в магнитном поле стабилизируется скирмионная фаза и возникают устойчивые решетки скирмионов. Команда французских ученых избрала другую стратегию: искать скирмионные состояния там, где сталкиваются различные спиновые циклоиды [1].

О спиновых циклоидах, возникающих в мультиферроике феррите висмута BiFeO₃, много раз было рассказано в ПерсТ (см., например, [2]). В данном случае важно повторить, что это магнитная структура обязана своим названием аналогии с траекторией точки на ободке вращающегося колеса: именно такую траекторию описывает кончик вектора магнитного параметра порядка, если следить за ним, переходя от точки к точке кристалла. Направление пространственной модуляции описывается волновым вектором циклоиды **Q**, а плоскость вращения циклоиды, как правило, образована вектором электрической поляризации **P** и вектором **Q** (впрочем, бывают и исключения, когда поляризация выходит из плоскости циклоиды, см., например, [3]). Ученые решили разобраться, что происходит на границе двух сегнетоэлектрических доменов, где, подобно двум колесам, катящимся в разных направлениях и с различной ориентацией осей вращения, сталкиваются две циклоиды. Вопреки ожиданиям, “ДТП” при этом не происходит, реализуется совсем другой сценарий.

Для того чтобы увидеть, что происходит в месте стыка двух циклоид, ученые использовали целый арсенал методов: сегнетоэлектрические домены визуализировали с помощью пьезоэлектрической силовой микроскопии, а для получения магнитного контраста от циклоид с практически полностью скомпенсированным магнитным моментом использовали сверхчувствительную разновидность зондовой микроскопии с зондом – магнитометром на азотных вакансиях (или NV-центрах, подробнее см.

ПерсТ). Однако наиболее интересные и неожиданные результаты были получены с помощью резонансного рассеяния излучения мягкого рентгеновского диапазона – она позволяет детектировать хиральность – направление вращения параметра порядка, как магнитного, так и сегнетоэлектрического. Оказалось, что и магнитная, и сегнетоэлектрическая структура гомохиральны, т.е. имеют неизменную хиральность во всех точках образца.

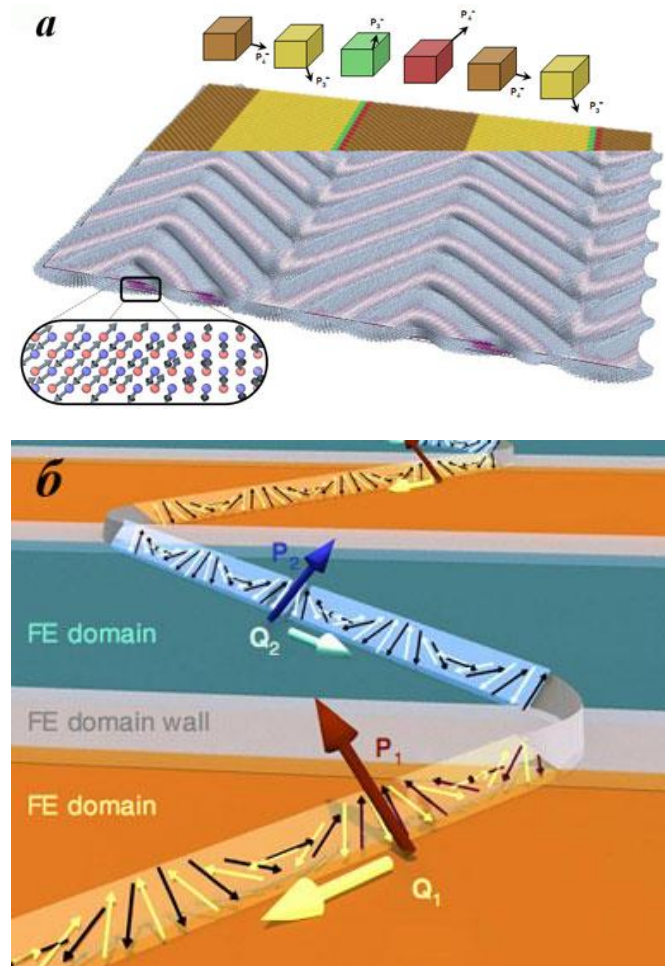


Рис. 1. Хиральные сегнетоэлектрическая и магнитная структуры в феррите висмута: а – комбинарованное изображение обеих структур в сканирующей пьезоэлектрической микроскопии (нижний слой) и односпиновой магнитометрии на NV-центре (верхний слой); б – “виражи” спиновой циклоиды на сегнетоэлектрической доменной структуре [1].

Надо сказать, что сегнетоэлектрические доменные границы в феррите висмута довольно необычны: в отличие от традиционных доменных границ Изинга, в которых электрическая поляризация изменяется по модулю, уменьшаясь до нуля, а затем, возрастая до прежней величины, но уже с противоположной ориентацией, в случае феррита висмута происходит разворот вектора поляризации без изменения ее модуля от

одной главной диагонали квазикубической ячейки кристалла до другой (рис. 1а).

Гомохиральность сегнетоэлектрической структуры имеет своим следствием необычную и даже противоестественную ситуацию: в каждой второй границе разворот поляризации происходит на угол больше 180 градусов, что ранее представлялось невозможным по энергетическим соображениям.

Гомохиральная магнитная структура также довольно необычна: циклоида совершает виражи, как будто катящееся “колесо” делает разворот и, не меняя направления вращения, продолжает катиться уже в другую сторону (рис. 1б). При этом на каждой второй доменной границе (там, где электрическая поляризация вращается по длинному пути) можно наблюдать зародыши скирмионоподобных состояний (“бульбочки” в местах изгиба на рис. 1а), в которых направления модуляции спинов имеют множественные направления “multyQ-state”. Взаимосвязь сегнетоэлектрической и магнитной структур в таких объектах позволит осуществлять управление скирмионами не магнитным, а электрическим полем, что имеет большие перспективы для практических приложений в запоминающих устройствах [4].

А. Пятаков

1. J.-Y. Chauleau et al., *Nature Materials* **36**, 386 (2020).
2. [ПерсТ, 24, вып. 19/20, с. 4 \(2017\)](#).
3. Z.V. Gareeva et al., *JMMM*, **469**, 593-597 (2019).
4. [ПерсТ, 19, вып. 9, с. 6 \(2012\)](#).

ФУЛЛЕРЕНА И НАНОТРУБКИ

Фуллерены против ВИЧ

Наши соотечественники из ИПХФ РАН, ИНЭОС РАН и Сколтеха совместно с зарубежными коллегами сообщают о получении пяти новых производных фуллерена C_{60} (см. рис.), обладающих биологической активностью против вируса иммунодефицита человека ВИЧ-1 [1]. Их образование происходит в результате реакции хлорфуллерена $C_{60}Cl_6$ с диметил-2,2'-(1,4-фениленбис(окси))диацетатом с последующим выделением с помощью высокоэффективной жидкостной хроматографии (HPLC). Продукты реакции исследователи проанализировали с помощью масс-спектрометрии с использованием химической ионизации при атмосферном давлении (APCI-MS), а также 1H , ^{13}C и двумерной ЯМР-спектроскопии.

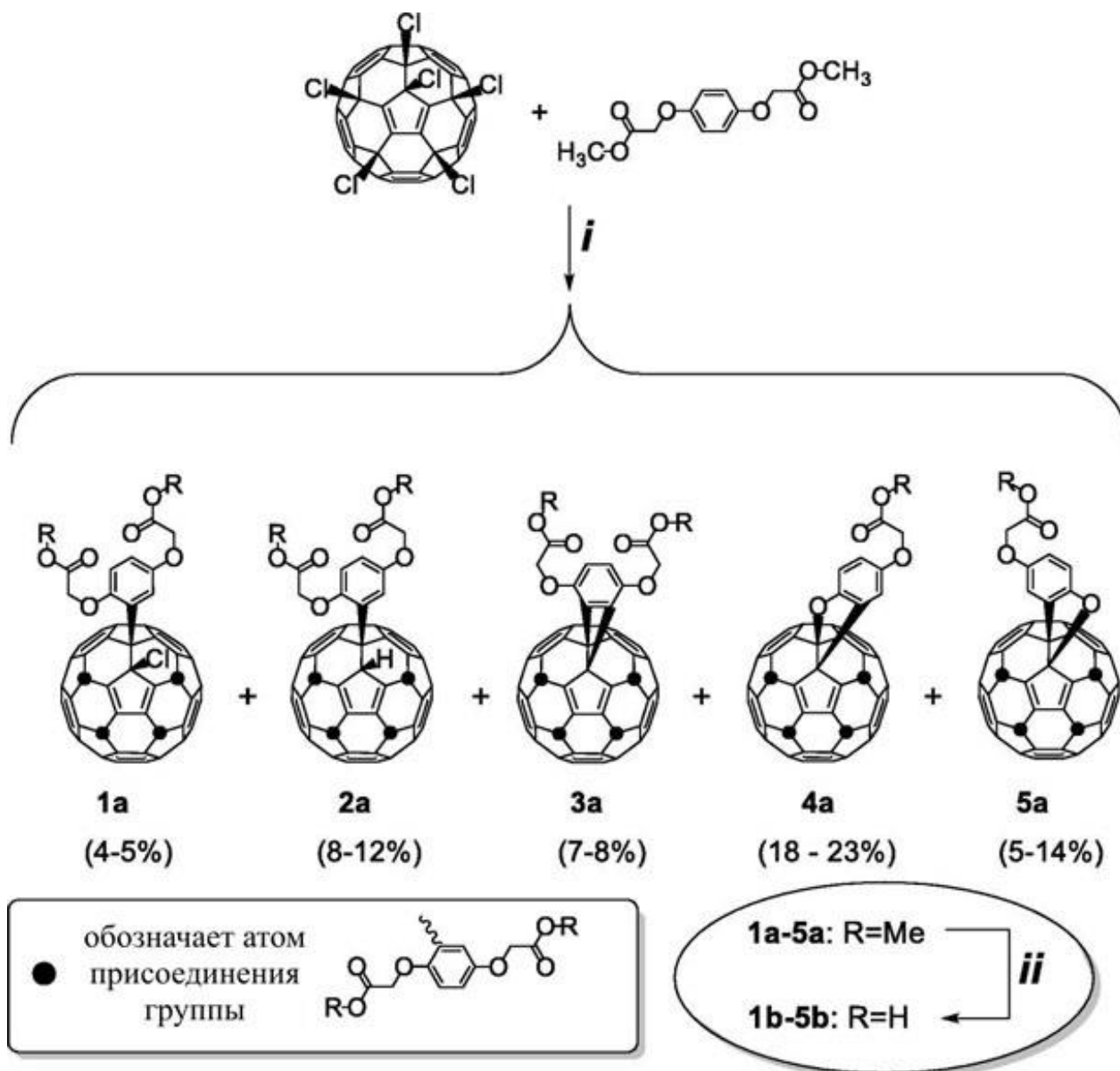


Схема синтеза производных фуллера C_{60} , обладающих анти-ВИЧ активностью, и их структура (Me = CH_3)

Затем авторы более детально изучили вопрос цитотоксичности и биоактивности калиевых солей всех полученных производных (от **1b-К** до **5b-К**, см. рис.) против вируса иммунодефицита человека. Известно, что на ранней стадии инфекции белок оболочки вируса ВИЧ-1 gp120 способен связываться одновременно с CD4-рецептором и CCR5-коррецептором на поверхности клетки иммунной системы (например, макрофагов). Такое поведение характерно для так называемого CCR5-тропического вируса или вируса R5. На более поздних стадиях ВИЧ-инфекции белок gp120 видоизменяется и становится способным связываться с клетками, содержащими как CD4-рецептор, так и CXCR4-коррецептор (Т-лимфоциты). Такое поведение отличает CXCR4-тропический вирус или вирус X4 от вируса R5. Принимая во внимание обо-

значенные факты, авторы сконцентрировались на анализе действия фуллереновых производных против вирусов R5 и X4. Любопытно, что все рассмотренные соединения демонстрируют сильную анти-ВИЧ активность. Наименее токсичными из предложенных являются соединения **3b-К** и **4b-К**, содержащие бензофурановые или бензоциклобутановые звенья, присоединенные к фуллереновой клетке. Однако их активность против обоих вирусов R5 и X4 оказалась несколько сниженной по сравнению с соединениями **1b-К** и **2b-К**. Оптимальные характеристики продемонстрировали производные **3b-К** и **5b-К**: при исключительно слабой токсичности их активность соответствовала соединениям **1b-К** и **2b-К**. Исследователи предполагают, что решающую роль в достижении наибольшей эффективности ингибирования ак-

тивности ВИЧ может принадлежать атомам хлора, которые присутствуют в **1b-K**, или водорода, которые содержит **2b-K**, присоединенным к циклопентадиенильному фрагменту на фуллереновой клетке. В конечном итоге, выявленные корреляции между молекулярной структурой производных фуллеренов и их биологическими свойствами, по мнению авторов, должны способствовать оптимальному и эффективному “молекулярному дизайну” новых водорастворимых производных фуллеренов с повышенной активностью против вируса иммунодефицита и низким токсичным воздействием на организм человека.

М. Маслов

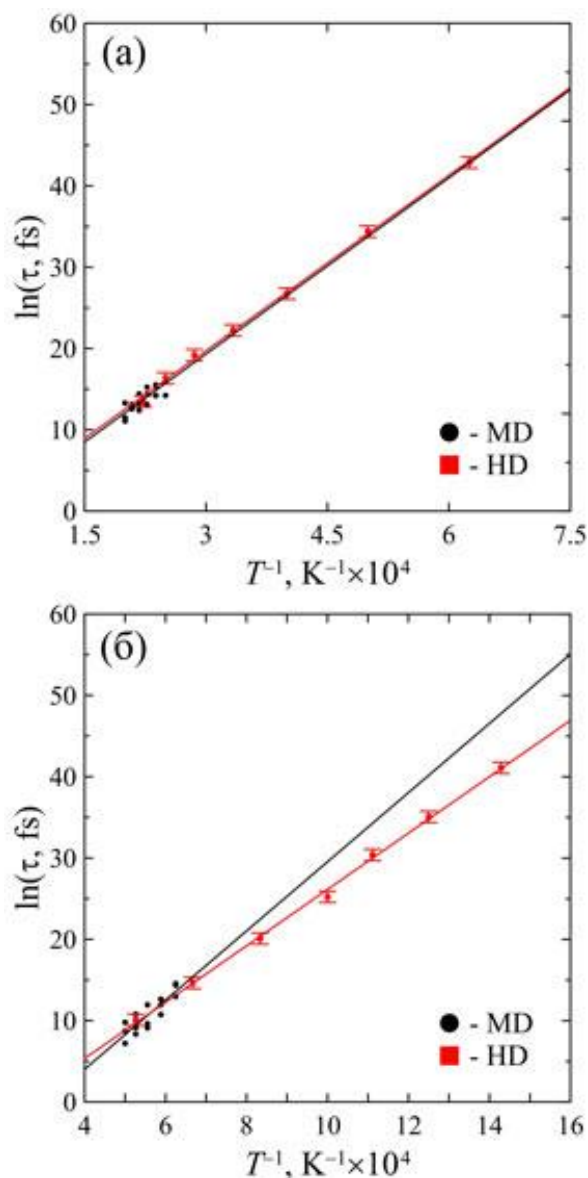
I. I. Voronov et al., Tetrahedron Letters 61, 151598 (2020).

КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ

Ускоряя молекулярную динамику

Метод молекулярной динамики по праву считается современным “золотым” стандартом компьютерного моделирования временной эволюции многочастичных систем: молекул, олигомеров и кристаллов. Он традиционно используется для анализа термической устойчивости наноструктур и вычисления их термокинетических параметров. Однако его, наверное, самым известным недостатком является так называемая “проблема временных масштабов”, которая проявляется из-за существенного несоответствия типичного временного шага молекулярной динамики, выбор которого обусловлен необходимостью адекватного описания атомных колебаний, с характерными временами изучаемых процессов, способных достигать совсем уж макроскопических величин. В этом смысле непосредственное исследование физических объектов и явлений с помощью молекулярной динамики на реальных временных масштабах, соответствующих условиям натуральных экспериментов, является своеобразной “светлой мечтой”. Попытки заставить молекулярную динамику ускориться предпринимались неоднократно. Тем не менее, в работе [1] авторы представили свое видение на процедуру гипердинамики, построенной на основе неортогональной модели сильной связи NTBМ. Нельзя сказать, что этот подход является абсолютно новым, основные идеи таких методов, как гипердинамика и метадинамика, хорошо известны. Тем не менее, удачное сочетание предложенного авторами гипердинамического алгоритма, 2020, том 27, выпуск 5/8

ритма с потенциалом сильной связи NTBМ и разработанного оптимизированного программного обеспечения представляет собой комплекс, который демонстрирует впечатляющие результаты.



Время, необходимое для вращения связи C–C (дефект Стоуна-Уэльса) в фуллерене C_{60} (а) и разрушения связи C–N в допированном фуллерене C_{60}NH_2 , как функция обратной температуры. Черные кружки и красные квадраты – результаты расчетов в рамках молекулярной динамики и гипердинамики, соответственно. Прямые линии – аппроксимации методом наименьших квадратов.

По заверениям авторов, коэффициент ускорения при использовании представленного комплекса алгоритм-модель-программа достигает фантастических 10^7 по сравнению с использованием классической молекулярной динамики. Кроме того, предложенный метод не требует обязательного предварительного анализа ландшафта гиперповерхности потенциальной энергии системы, как, например, ряд методов

метадинамики. Основным направлением применения своего подхода авторы называют как раз исследование термоактивированных процессов в ковалентных системах различной размерности, в частности термически индуцированных дефектов, возникающих в средних или относительно крупных атомных системах при низких температурах. Для демонстрации его эффективности исследователи рассмотрели два известных классических процесса: образование дефекта Стоуна-Уэльса в фуллерене C_{60} и поведение группы NH_2 на поверхности фуллереновой клетки. В последнем случае авторы проанализировали возможность отрыва группы от фуллерена и образование “мостиковой конфигурации” с тетракоординированным атомом азота, которая проявляется при достаточно высоких температурах. В результате они пришли к выводу, что гипердинамика приводит, по сути, к тем же результатам, что и традиционная молекулярная динамика, но охватываемый диапазон температур у первой несравнимо шире (см. рис.). Авторы рассчитывают, что предложенный подход окажется полезным при решении современных задач вычислительной химии. К слову, рабочая версия программы с гипердинамикой распространяется свободно, ее можно скачать и попробовать по адресу <http://ntbm.info>.

М. Маслов

I. K.P.Katin et al., J. Chem. Theor. Comput. 16, 2065 (2020).



От всей души поздравляем вас с **75-летием** победы в Великой Отечественной войне.

75 лет мы живем под мирным небом, строим города, развиваем науку, воспитываем детей. Чем дальше от нас военные годы, тем глубже осознание великого подвига советского народа. Освободив мир от нацизма, он задал высокую планку преданности своему отечеству.

Проходят десятилетия, сменяются поколения, но память о великой победе нашего народа остается в наших сердцах. Никто не забыт, ничто не забыто, низкий поклон и бесконечная благодарность дорогим победителям, уважаемым ветеранам и труженикам тыла.

В день великой победы желаем всем здоровья, душевного тепла, внимания и заботы близких. Пусть будет мирным каждый новый день. Чистого неба над головой.

Редакция и авторы

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 О.Алексеева, М.Маслов, А.Пятаков

Выпускающий редактор: И.Фурлетова

Адрес редакции: 119296 Москва, Ленинский проспект, 64